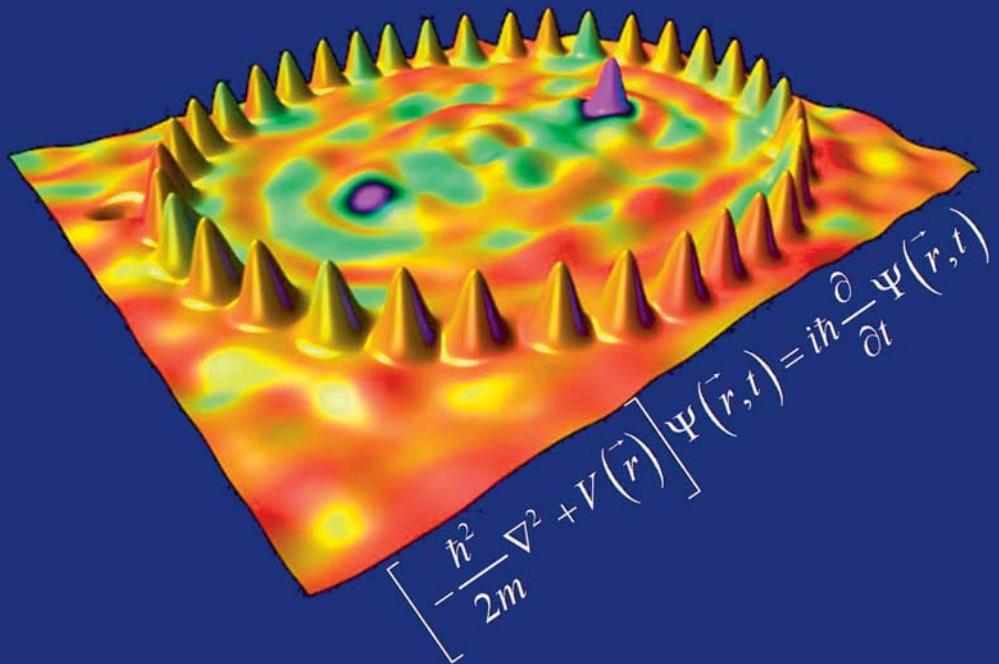


Física Cuántica I

Pablo García González
José Enrique Alvarellos Bermejo
José Javier García Sanz



Física Cuántica I

PABLO GARCÍA GONZÁLEZ
JOSÉ ENRIQUE ALVARELLOS BERMEJO
JOSÉ JAVIER GARCÍA SANZ

UNIVERSIDAD NACIONAL DE EDUCACIÓN A DISTANCIA

FÍSICA CUÁNTICA I

Quedan rigurosamente prohibidas, sin la autorización escrita de los titulares del Copyright, bajo las sanciones establecidas en las leyes, la reproducción total o parcial de esta obra por cualquier medio o procedimiento, comprendidos la reprografía y el tratamiento informático, y la distribución de ejemplares de ella mediante alquiler o préstamos públicos.

© Universidad Nacional de Educación a Distancia
Madrid 2014

www.uned.es/publicaciones

© Pablo García González, José Enrique Alvarellos Bermejo,
José Javier García Sanz

Ilustración de cubierta: Archivo fotográfico del Laboratorio de IBM Almaden Research Center (EE.UU.).

Todas nuestras publicaciones han sido sometidas a un sistema de evaluación antes de ser editadas.

ISBN electrónico: 978-84-362-6877-5

Edición digital: mayo de 2014

ÍNDICE GENERAL

PRÓLOGO

PARTE PRIMERA: FUNDAMENTOS

Tema 1. TEORÍA CLÁSICA DE LA RADIACIÓN

- 1.1. Ecuaciones de Maxwell
 - 1.2. Ondas planas
 - 1.3. El análisis de Fourier
 - 1.4. Modos normales de radiación
 - 1.5. Interferencia entre ondas electromagnéticas
 - 1.6. Difracción de una onda electromagnética
 - 1.7. Coherencia
- Problemas propuestos

Tema 2. PROPIEDADES CORPUSCULARES DE LA RADIACIÓN

- 2.1. Cuantización de la radiación. Fotones
- 2.2. Interpretación probabilística para el fotón
- 2.3. El problema de la cavidad radiante
- 2.4. El efecto Compton
- 2.5. Fotones y presión de radiación
- 2.6. Órdenes de magnitud y unidades atómicas

Problemas propuestos

Tema 3. ONDAS DE MATERIA. PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE

- 3.1. El estado cuántico de una partícula
- 3.2. El postulado de De Broglie
- 3.3. Interpretación física de la función de onda
- 3.4. Valores medios e incertidumbres
- 3.5. Difracción de partículas
- 3.6. El principio de incertidumbre de Heisenberg

Problemas propuestos

PARTE SEGUNDA: MECÁNICA ONDULATORIA

Tema 4. EL ESPACIO DE FUNCIONES DE ONDA

- 4.1. Similitud y producto escalar
- 4.2. El espacio de las funciones de onda
- 4.3. Bases de Fourier y bases de representación

Bases de Fourier

Bases de representación

Proyecciones ortogonales.

- 4.4. Operadores en un espacio de funciones
- 4.5. Representación matricial de un operador
- 4.6. Espacio de los estados. Notación de Dirac
- 4.7. El producto tensorial. Entrelazamiento

Problemas propuestos

Tema 5. MAGNITUDES FÍSICAS Y OPERADORES

- 5.1. Los operadores de posición y momento lineal
- 5.2. Operador representativo de una magnitud
- 5.3. Espectro puntual de una magnitud física
- 5.4. Espectro continuo de una magnitud física
- 5.5. Bases propias. Interpretación probabilística

Problemas propuestos

Tema 6. EVOLUCIÓN TEMPORAL DETERMINISTA

- 6.1. Evolución temporal de una partícula libre
- 6.2. La ecuación de Schrödinger
- 6.3. El operador de evolución temporal
- 6.4. La ecuación de continuidad
- 6.5. Estados estacionarios. Autoenergías
- 6.6. La representación en energías
- 6.7. Sistemas separables
- 6.8. Evolución temporal de valores medios
- 6.9. Correspondencia con la física clásica(*)

Problemas propuestos

Tema 7. MEDIDA Y POSTULADOS DE LA FÍSICA CUÁNTICA

- 7.1. Proyectores espectrales. Colapso del estado
- 7.2. Compatibilidad entre observables
- 7.3. Relación de incertidumbre generalizada
- 7.4. Incertidumbre energía-tiempo
- 7.5. Los postulados de la Física Cuántica

7.6. El problema de la medida

Problemas propuestos

Tema 8. MOMENTO ANGULAR

8.1. Los operadores de momento angular

8.2. Funciones de onda en coordenadas esféricas

8.3. Autofunciones del momento angular

8.4. Interpretación probabilística y momento angular

8.5. Estados estacionarios en campos centrales

Problemas propuestos

PARTE TERCERA: APLICACIONES A SISTEMAS SIMPLES

Tema 9. ESTADOS LIGADOS EN POZOS CUADRADOS

9.1. Espectro de energías en una dimensión

9.2. El pozo cuadrado finito

9.3. Otros pozos cuadrados

Problemas propuestos

Tema 10. ESTADOS DE COLISIÓN EN UNA DIMENSIÓN

10.1. Estados de colisión. Interpretación física

10.2. El potencial escalón

10.3. La barrera de potencial

10.4. La fórmula de Gamow

10.5. El microscopio de efecto túnel

Apéndice: Resonancias

Problemas propuestos

Tema 11. EL OSCILADOR ARMÓNICO

- 11.1. Estados estacionarios de un oscilador
- 11.2. Dinámica cuántica de un oscilador armónico
- 11.3. Operadores de creación y destrucción
- 11.4. Estados coherentes
- 11.5. El oscilador armónico en varias dimensiones

Problemas propuestos

Apéndice A. ANÁLISIS VECTORIAL

- A.1. Vectores. Operaciones con vectores
- A.2. Coordenadas ortogonales
- A.3. Campos escalares y vectoriales

Apéndice B. ESPACIOS DE FUNCIONES: COMPLEMENTOS

- B.1. La integral de Lebesgue
- B.2. Convergencia en espacios de funciones
- B.3. Formas lineales y distribuciones temperadas
- B.4. Equipamiento de espacios de Hilbert
- B.5. Derivada en sentido de distribuciones

BIBLIOGRAFÍA

ÍNDICE DE SÍMBOLOS

ÍNDICE ALFABÉTICO

PRÓLOGO

Durante los últimos treinta años se han producido profundos avances en la mecánica cuántica. Lo que hace medio siglo eran “experimentos Gedanke” o “experimentos de pizarrón”, como se dice en Latinoamérica, son hoy en día procesos físicos perfectamente realizable en el laboratorio. Si hasta ahora la Mecánica Cuántica preparaba al profesional para el estudio de muchas de las ramas de la Física (por ejemplo, de la Física Atómica, Nuclear, Subnuclear (partículas) o del Estado Sólido) hoy es requisito previo para abordar la Nanotecnología y la Teoría de la Información Cuántica. Si la “estrella” de un curso introductorio de Mecánica Cuántica era el átomo de hidrógeno, hoy tiene que serlo el *efecto túnel* y también será vez necesario hablar, aunque sea someramente, de entrelazamiento. Si hace décadas los temas más avanzados eran los relativos a la dispersión de partículas (*scattering*), ahora son los sistemas cuánticos abiertos y la teoría de la medida quienes deberían culminar un programa de Mecánica Cuántica. Sin desdeñar en absoluto el enfoque de textos hoy considerados clásicos, y por tanto perdurables, los nuevos libros de esta materia tienen que contemplar esta realidad: no hay duda de que la Física del Siglo XXI comparte buena parte de sus fundamentos con la del Siglo XX, pero los “terrenos de juego” son bien distintos.

Para abordar esta asignatura con éxito, el estudiante debe haber superado asignaturas previas de Mecánica y de Electromagnetismo. A su vez, tiene que estar perfectamente familiarizado con los contenidos de Álgebra Lineal (espacios lineales de dimensión finita), de Análisis Matemático (cálculo integrodiferencial en una y varias variables), con la resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias y con los fundamentos de la teoría de funciones de variable compleja.

Cada capítulo se abrirá con una breve presentación seguida de unas someras orientaciones para su estudio autónomo. Como regla general, deberá dedicarse un 40 % del tiempo de trabajo a una primera lectura detallada del texto, lo que sería el equivalente a las “clases de teoría” en una universidad presencial, junto con el estudio “activo” de los ejemplos resueltos incluidos en cada capítulo, lo que equivaldría a los “seminarios de problemas”. Para que estos ejemplos sean provechosos se debe intentar su resolución antes de ver la solución dada en el

texto, o bien reproducirla pero completando en detalle aquellos pasos matemáticos que se hayan omitido. El 60 % del tiempo restante deberá emplearse en afianzar los contenidos teóricos y resolver una serie de problemas propuestos, que no necesariamente han de ser los de este texto. Esto último es esencial: la teoría únicamente alcanza pleno sentido cuando se desarrolla y se aplica a situaciones específicas.

No queremos cerrar esta presentación sin agradecer a Jaime Arturo de la Torre, Teresa Martín Blas y otros compañeros del Departamento de Física Fundamental de la UNED, que nos han ayudado a intentar corregir los errores, imprecisiones y erratas, que son casi imposibles de evitar en cualquier texto. Por otra parte, a Roberto Canogar, del Departamento de Matemáticas Fundamentales, le debemos el estilo L^AT_EX que hemos utilizado, y le agradecemos su apoyo y disponibilidad para resolver algunas pequeñas dificultades.

Nota importante: Los ejemplos, problemas y secciones marcados con un asterisco (*) tienen alguna dificultad conceptual o exigen manipulaciones matemáticas laboriosas, aunque asumibles por un estudiante de tercer curso. Aquellos con dos asteriscos (**) son muy difíciles o complicados. Un signo de admiración (!) etiqueta un ejercicio de especial importancia y al que debe prestarse la debida atención. El doble signo de admiración (!!) indica que nos vamos a enfrentar a una situación sorprendente, curiosa o con resultados inesperados.

PRIMERA PARTE

Fundamentos

TEMA 1

TEORÍA CLÁSICA DE LA RADIACIÓN

Este libro trata de los procesos físicos que se producen a escala microscópica o, mejor dicho, de *cómo* estudiar esos procesos en sistemas cuya longitud natural está en el rango aproximado de 10^{-12} a 10^{-8} m. En este rango de distancias, la fuerza electromagnética (EM) es la interacción dominante. La razón de ello es que las fuerzas nucleares débil y fuerte empiezan a ser relevantes a longitudes más pequeñas mientras que la fuerza gravitatoria, la menos intensa de las interacciones fundamentales, sólo habrá de tenerse en cuenta cuando estemos bien adentrados en el mundo macroscópico.

Será, pues, el electromagnetismo quien dicte la dinámica de los procesos fisicoquímicos a nivel atómico y molecular, el comportamiento y la funcionalidad de nanodispositivos y también los fenómenos que ocurren en la escala de lo mesoscópico, esa difusa región que separa lo microscópico de lo macroscópico. Es entonces muy razonable abrir un curso de física cuántica con un breve repaso del electromagnetismo clásico y, por motivos que muy pronto se harán evidentes, focalizado en las propiedades de la radiación electromagnética. En este repaso prestaremos especial atención a diferentes temas que incluyen:

- el uso de funciones de variable compleja para expresar campos vectoriales
- la descomposición espectral de una onda mediante el análisis de Fourier
- los fenómenos de interferencia y difracción
- el concepto de coherencia

Esta selección, que ni de lejos constituye un resumen completo de la teoría electromagnética clásica, no es en absoluto casual. Por ejemplo, la física cuántica se formula en términos de campos complejos, por lo que resulta conveniente empezarlos a utilizar en un escenario cuyos conceptos físicos ya sean conocidos. Por otra parte, las técnicas de análisis de Fourier se utilizarán de manera continuada a lo largo del texto. La interferencia y la difracción de ondas, a su vez, son capitales en el establecimiento de las bases del formalismo cuántico; finalmente, la coherencia entre ondas es un concepto sutil pero importante y que queremos tratar con cierto detalle.

Orientaciones generales al plan de trabajo

Como hemos indicado, buena parte de este primer capítulo es un resumen de algunos aspectos de la teoría electromagnética clásica, la mayoría de ellos conocidos por el estudiante, y que se incluyen como referencia. El único apartado que puede ser conceptualmente nuevo es el análisis de la coherencia (**sección 1.7**) que, en todo caso, se trata también en asignaturas de óptica. A pesar de ello y puesto que las herramientas matemáticas que vamos a introducir se emplearán con mucha frecuencia en el futuro, sugerimos el estudio completo de este capítulo. A tal fin debe emplear unas **7 horas** dentro un curso semestral diseñado sobre la base de **150 horas de trabajo personal**, que se distribuyen a lo largo de quince semanas efectivas (10 horas por semana).

Objetivos del capítulo

- Afianzar conocimientos ya adquiridos en cursos anteriores sobre el tratamiento clásico de la radiación electromagnética.
- Familiarizarse con algunas herramientas matemáticas que serán de uso habitual en física cuántica.
- Ser capaz de manejar las técnicas de descomposición espectral basadas en el análisis de Fourier.
- Aprender a tratar fenómenos de interferencia y difracción usando un formalismo de campos complejos.
- Comprender el concepto de coherencia y saber distinguir entre superposición coherente y mezcla incoherente.

1.1. ECUACIONES DE MAXWELL

§ 1. El electromagnetismo clásico se construye a partir de un conjunto de ecuaciones que relacionan el *campo electromagnético* $\{\mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)\}$ con las *fuentes* que lo producen, y que están definidas por sus densidades de carga $\rho_c(\mathbf{r}, t)$ y de corriente eléctrica $\mathcal{J}_c(\mathbf{r}, t)$. Éstas son las *ecuaciones de Maxwell* que en el sistema internacional de unidades se escriben como:

$$\boxed{\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\epsilon_0} \rho_c(\mathbf{r}, t) && (\text{Ley de Gauss para } \mathbf{E}) \\ \nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= 0 && (\text{Ley de Gauss para } \mathbf{B}) \\ \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= -\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} && (\text{Ley de Faraday - Lenz}) \\ \nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mu_0 \mathcal{J}_c(\mathbf{r}, t) && (\text{Ley de Ampère})\end{aligned}} \quad (1.1)$$

donde $\epsilon_0 \simeq 8,85 \times 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$ ($\text{C}^2 \text{ N}^{-1} \text{ m}^{-1}$) y $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ N A}^{-2}$ son constantes universales denominadas *permitividad eléctrica* y *permeabilidad magnética* del vacío, respectivamente, mientras que $c = (\epsilon_0 \mu_0)^{-1/2} \simeq 3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$ es la *velocidad de la luz*. El significado físico de los campos \mathbf{E} y \mathbf{B} viene dado por la *fuerza de Lorentz*

$$\boxed{\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = q(\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{v} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t))} \quad (1.2)$$

que es la ejercida por el campo electromagnético (EM) sobre una carga q , situada en el instante t en un punto \mathbf{r} que se mueve a velocidad \mathbf{v} .

Las densidades de carga ρ_c y corriente \mathcal{J}_c no son independientes entre sí ya que, como se deduce de las ecuaciones de Maxwell, deben verificar la *ecuación de continuidad*

$$\boxed{\frac{\partial \rho_c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathcal{J}_c(\mathbf{r}, t)} \quad (1.3)$$

que no es otra cosa que la ley conservación de la carga.

Conviene indicar que las densidades de carga y de corriente eléctrica que aparecen en las ecuaciones de Maxwell son *netas*, por lo que incluyen las cargas de polarización y las corrientes de magnetización que surgen en un medio material

como respuesta a un campo EM externo. Además, tal y como hemos expresado las relaciones (1.1), se presupone que las fuentes *están dadas*, es decir, que conocemos exactamente cómo evolucionan en el tiempo [de acuerdo con lo expresado por las funciones $\rho_c(\mathbf{r}, t)$ y $\mathcal{J}_c(\mathbf{r}, t)$]. Por tanto, con la información que tenemos no es posible resolver un problema de electrodinámica en su sentido más amplio, en el que la evolución temporal de la fuente está afectada por la propia fuerza de Lorentz.

En ausencia de fuentes, las cuatro ecuaciones de Maxwell se reducen a

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (\text{Ley de Gauss para } \mathbf{E})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (\text{Ley de Gauss para } \mathbf{B})$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (\text{Ley de Faraday – Lenz}) \quad (1.4)$$

$$\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (\text{Ley de Ampère})$$

que son las adecuadas para describir la *radiación electromagnética libre*. Vemos que tanto el campo eléctrico como el campo magnético de la radiación libre son transversales (su divergencia es nula) y que están acoplados entre sí a través de las leyes de Faraday-Lenz y de Ampère: una variación temporal de \mathbf{E} genera un campo magnético y viceversa. Esto explica el conocido carácter autosostenido de la radiación electromagnética que, como sabemos y se deduce de las ecuaciones (1.4), se propaga a velocidad c . Es así legítimo llamar *onda electromagnética* a la radiación EM libre.

Las ecuaciones de Maxwell son lineales, por lo que el campo electromagnético cumple el **principio de superposición**: si en una región del espacio coexisten dos ondas EM, el campo electromagnético total es la suma de los campos de cada una de ellas. Debido a este principio de superposición, la solución general de las ecuaciones de Maxwell con fuentes (1.1) es igual al campo EM generado (o emitido) *realmente* por esas fuentes, superpuesto a un campo EM libre arbitrario que satisfaga las ecuaciones (1.4). Finalmente, y como es inmediato comprobar, el campo EM emitido por densidades de carga y corriente depende linealmente de éstas.

§ 2. La energía almacenada en un campo EM por unidad de volumen es

$$u_{\text{EM}}(\mathbf{r}, t) = \frac{\epsilon_0 |\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)|^2}{2} + \frac{|\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)|^2}{2\mu_0} = \frac{\epsilon_0}{2} \left(|\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)|^2 + c^2 |\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \quad (1.5)$$

Puesto que el campo EM es un ente físico por sí mismo es natural considerar $u_{\text{EM}}(\mathbf{r}, t)$ como su *densidad de energía*. A partir de las ecuaciones de Maxwell, y usando resultados del análisis vectorial que pueden encontrarse en el **Apéndice A**, puede probarse que la variación temporal de la densidad de energía de la radiación libre en un punto \mathbf{r} es

$$\frac{\partial u_{\text{EM}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -c^2 \nabla \cdot \boldsymbol{\pi}_{\text{EM}}(\mathbf{r}, t), \quad (1.6)$$

donde

$$\boxed{\boldsymbol{\pi}_{\text{EM}}(\mathbf{r}, t) = \epsilon_0 \boldsymbol{\mathcal{E}}(\mathbf{r}, t) \times \boldsymbol{\mathcal{B}}(\mathbf{r}, t)} \quad (1.7)$$

es la *densidad de momento lineal* del campo EM. Integrando (1.5) y (1.7) sobre todo el espacio tendríamos la energía y el momento lineal totales de la onda electromagnética.

La energía y el momento lineal de la radiación EM se manifiestan físicamente al interaccionar con partículas cargadas. En tal interacción hay una transferencia de energía y momento lineal de la radiación a las cargas y, recíprocamente, éstas emiten radiación a expensas de su energía y de su momento.

Si ahora integramos (1.6) sobre un volumen \mathcal{V} limitado por una superficie cerrada \mathcal{S} y aplicamos el teorema de la divergencia de Gauss (véase el **Apéndice A**) llegamos a la relación

$$-\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} u_{\text{EM}}(\mathbf{r}, t) d^3 \mathbf{r} = c^2 \oint_{\mathcal{S}} \boldsymbol{\pi}_{\text{EM}}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{n} d^2 \mathbf{r}, \quad (1.8)$$

donde \mathbf{n} es un vector unitario normal a la superficie \mathcal{S} en el punto \mathbf{r} . La igualdad (1.8) nos dice que *la variación temporal de la energía EM de la radiación libre almacenada en una región \mathcal{V} del espacio es igual (salvo signo) al flujo del momento del campo EM, $c^2 \boldsymbol{\pi}_{\text{EM}}(\mathbf{r}, t)$, a través de la frontera \mathcal{S} de dicha región*. Por tanto, en una onda electromagnética se produce un *transporte de energía* que es consecuencia de su propia naturaleza descrita y que está directamente relacionado con la densidad de momento lineal: la energía EM “viaja” en el espacio y la densidad de corriente de energía correspondiente es $c^2 \boldsymbol{\pi}_{\text{EM}}(\mathbf{r}, t)$, cantidad conocida como *vector de Poynting*. De esta manera, se considera que la dirección de propagación de una onda electromagnética en un punto \mathbf{r} es la del vector de Poynting.

§ 3. La estructura de las ecuaciones de Maxwell para la radiación libre (1.4) permite describirla en términos de un *potencial electromagnético vector* $\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t)$,

del cual deriva el campo EM en la forma

$$\boxed{\begin{aligned}\boldsymbol{\mathcal{E}}(\mathbf{r}, t) &= -\frac{\partial \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \\ \boldsymbol{\mathcal{B}}(\mathbf{r}, t) &= \nabla \times \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t)\end{aligned}} \quad (1.9)$$

En efecto, esta definición garantiza el cumplimiento automático de la ley de Gauss para el campo magnético y de la de Faraday-Lenz. Las leyes de Gauss para $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ y de Ampère se escriben en términos de $\boldsymbol{\mathcal{A}}$ como

$$\boxed{\begin{aligned}\nabla \cdot \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t) &= 0 \\ \left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{0}.\end{aligned}} \quad (1.10)$$

De esta manera, la radiación libre queda descrita únicamente¹ por el potencial $\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t)$, que resulta ser transversal (primera ecuación 1.10), y cuyas tres componentes satisfacen una *ecuación de ondas homogénea* (segunda ecuación 1.10).

1.2. ONDAS PLANAS

§ 1. Nos centraremos ahora en las propiedades de la radiación libre. Esta restricción es razonable no sólo por su importancia intrínseca sino también porque el campo electromagnético emitido por una fuente oscilante cualquiera se comporta suficientemente lejos de ésta como radiación libre. Nuestro objetivo será hallar la forma más general del potencial vector $\boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t)$ que satisfaga las ecuaciones (1.10), ya que a partir de él podremos obtener fácilmente los campos eléctrico y magnético y también otras propiedades de interés de la radiación, como sus densidades de energía y momento. Para ello empezaremos analizando las soluciones monocromáticas de la ecuación de ondas (1.10), puesto que el principio de superposición nos permitirá construir cualquier solución a partir de ellas.

¹ Sin embargo, la relación entre el campo EM y el potencial vector no es biunívoca. Distintos potenciales vector pueden describir el mismo campo.

Antes de proceder recordemos que una función $g(t)$ *real* es monocromática o armónica con frecuencia² $\omega > 0$ si se puede expresar como $g(t) = g_c \cos(\omega t) + g_s \sin(\omega t)$. Usando las relaciones trigonométricas fundamentales

$$\cos(\omega t) = \frac{e^{+i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2}; \quad \sin(\omega t) = \frac{e^{+i\omega t} - e^{-i\omega t}}{2i}$$

la función $g(t)$ también puede escribirse como la parte real de una función compleja $G(t) = G_0 e^{-i\omega t}$. En efecto, podemos escribir que

$$g(t) = \frac{G_0}{2} e^{-i\omega t} + \frac{G_0^*}{2} e^{+i\omega t} = \Re(G_0 e^{-i\omega t}) \equiv \Re(G(t)), \quad (1.11)$$

donde $G_0 = g_c + ig_s$, $G_0^* = g_c - ig_s$ es el complejo conjugado de G_0 , y \Re es la parte real. La utilización de esta representación compleja para $g(t)$ evita tediosas operaciones trigonométricas.

Además, si g es vectorial, los desfases entre las oscilaciones de sus componentes se pueden tratar de manera muy simple. En este caso definiremos el módulo de un vector de componentes complejas \mathbf{G} como el escalar real y positivo dado por

$$|\mathbf{G}| \equiv \sqrt{\mathbf{G}^* \cdot \mathbf{G}} \quad (1.12)$$

§ 2. De acuerdo con esta manera de representar funciones armónicas, podemos proponer que el potencial vector de una *onda monocromática libre* de frecuencia ω tiene la forma genérica

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \Re(\mathbf{A}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}) \quad (1.13)$$

donde $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ es una función de componentes complejas. Si sustituimos $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ en (1.10) vemos inmediatamente que $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ cumple las ecuaciones

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) &= 0 \\ \left(\nabla^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \right) \mathbf{A}(\mathbf{r}) &= \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (1.14)$$

por lo que concluimos que $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ ha de ser un campo complejo transversal que obedezca una *ecuación de Helmholtz homogénea*, la segunda de las ecuaciones (1.14).

² ω es la *frecuencia angular* o *pulsación* pero, por simplicidad, llamaremos a ω *frecuencia*. Si hubiese alguna posibilidad de confusión con $\nu = \omega/(2\pi)$, especificaríamos que ω es la pulsación.

La solución más sencilla de (1.14) es:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \text{ con } \begin{cases} \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_0 = 0 \\ |\mathbf{k}| = \frac{\omega}{c} \end{cases} \quad (1.15)$$

y, entonces,

$$\mathcal{A}(\mathbf{r}, t) = \Re \left(\mathbf{A}_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \right). \quad (1.16)$$

Aquí \mathbf{k} es un vector real con dimensiones de longitud recíproca (inversa de longitud), al que denominaremos *vector de onda*. La transversalidad de $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ queda asegurada al ser el vector constante \mathbf{A}_0 , de componentes complejas, perpendicular a \mathbf{k} , mientras que la llamada *relación de dispersión*, $|\mathbf{k}| = \omega/c$, garantiza el cumplimiento de la ecuación de Helmholtz.

Puesto que $\exp(2\pi i n) = 1$ para cualquier entero n , el potencial vector exhibe la siguiente periodicidad espacial:

$$\mathcal{A}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{A}(\mathbf{r} + n\lambda \mathbf{u}_k, t) \text{ para todo } n \in \mathbb{Z},$$

donde $\mathbf{u}_k \equiv \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$ es el vector unitario en la dirección de \mathbf{k} y $\lambda = 2\pi/|\mathbf{k}|$ es la denominada *longitud de onda*. De esta forma $\mathcal{A}(\mathbf{r}, t)$ siempre toma los mismos valores en planos perpendiculares a \mathbf{k} y separados una distancia λ . Esto justifica plenamente la denominación *onda plana* para este tipo de radiación libre monocromática

§ 3. Si \mathbf{u}_1 y \mathbf{u}_2 son dos vectores de módulo unidad perpendiculares entre sí y contenidos en el plano normal a la dirección \mathbf{u}_k (vea la FIG. 1-1), entonces tanto el potencial vector *físico* $\mathcal{A}(\mathbf{r}, t)$ como el vector complejo \mathbf{A}_0 son combinación lineal de \mathbf{u}_1 y \mathbf{u}_2 . En efecto, usando la forma polar de un número complejo, \mathbf{A}_0 puede escribirse como

$$\mathbf{A}_0 = A_1 e^{i\delta_1} \mathbf{u}_1 + A_2 e^{i\delta_2} \mathbf{u}_2 \text{ con } A_1, A_2 \in \mathbb{R}^+$$

y sustituyendo en (1.16),

$$\mathcal{A}(\mathbf{r}, t) = [A_1 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \delta_1)] \mathbf{u}_1 + [A_2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \delta_2)] \mathbf{u}_2 \quad (1.17)$$

Esta igualdad pone de manifiesto una de las ventajas de la notación compleja que ya adelantamos: el vector \mathbf{A}_0 contiene no sólo las amplitudes de oscilación del potencial vector a lo largo de cada dirección \mathbf{u}_1 y \mathbf{u}_2 sino también el desfase

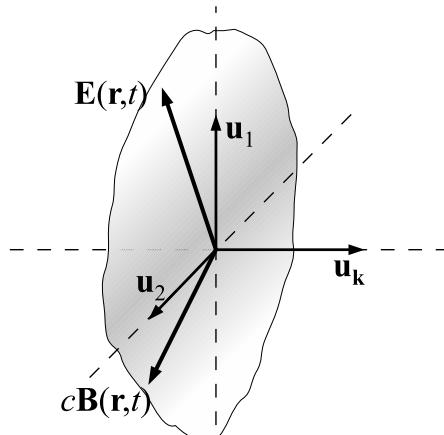


Figura 1-1. Componentes del campo electromagnético para radiación que se propaga a lo largo de la dirección \mathbf{u}_k . Fíjese que tanto los vectores unitarios \mathbf{u}_1 y \mathbf{u}_2 como el propio campo EM están contenidos en un plano perpendicular a \mathbf{u}_k .

$\delta_2 - \delta_1$ entre ambas oscilaciones. En otros términos, fijado el vector de onda \mathbf{k} hay dos grados de libertad relacionados con las orientaciones permitidas del potencial vector.

Otra ventaja de la notación compleja es la facilidad con la que se evalúan promedios temporales. Por ejemplo, el cuadrado del módulo del potencial vector físico es

$$|\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)|^2 = A_1^2 \cos^2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \delta_1) + A_2^2 \cos^2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \delta_2),$$

y como $\langle \cos^2(\omega t + \delta) \rangle_{\text{temp}} = 1/2$, donde $\langle \rangle_{\text{temp}}$ simboliza el promedio temporal sobre un periodo de oscilación, podemos escribir directamente que

$$\langle |\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)|^2 \rangle_{\text{temp}} = \frac{A_1^2 + A_2^2}{2} = \frac{1}{2} \mathbf{A}_0^* \cdot \mathbf{A}_0 = \frac{1}{2} |\mathbf{A}_0|^2. \quad (1.18)$$

En consecuencia, $|\mathbf{A}_0|^2/2$ es igual a $|\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)|^2$ salvo fluctuaciones temporales.

§ 4. El campo EM de una onda plana (radiación libre) se obtiene inmediatamente sustituyendo (1.16) en (1.9):

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\mathbf{r}, t) &= \Re \left(\mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \right) && \text{con } \mathbf{E}_0 = i\omega \mathbf{A}_0 \\ \mathcal{B}(\mathbf{r}, t) &= \Re \left(\mathbf{B}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \right) && \text{con } \mathbf{B}_0 = ik \times \mathbf{A}_0 \end{aligned} \quad (1.19)$$

por lo que \mathbf{E}_0 y \mathbf{B}_0 son también perpendiculares a \mathbf{k} . Usando la relación de dispersión tenemos a su vez que

$$\mathbf{E}_0 = c\mathbf{B}_0 \times \mathbf{u}_k ; \quad \mathbf{B}_0 = \frac{1}{c}\mathbf{u}_k \times \mathbf{E}_0 ; \quad |\mathbf{E}_0| = c|\mathbf{B}_0| \quad (1.20)$$

Los vectores \mathbf{E}_0 y \mathbf{B}_0 son complejos, pero si nos fijamos únicamente en las partes reales *físicas*, $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)$ y $\mathcal{B}(\mathbf{r}, t)$, su orientación relativa es la que muestra la **FIG. 1-1**. En consecuencia, la densidad de momento lineal $\boldsymbol{\pi}_{EM}(\mathbf{r}, t) = \epsilon_0 \mathcal{E}(\mathbf{r}, t) \times \mathcal{B}(\mathbf{r}, t)$ está orientada en la dirección de \mathbf{u}_k , que es así la de propagación de la onda.

§ 5. A partir de las expresiones (1.5) y (1.7), las densidades de energía y de momento lineal de la onda plana (1.16) son

$$u_{EM}(\mathbf{r}, t) = \frac{\epsilon_0 \omega^2 |\mathbf{A}_0|^2}{2} + \text{t.o.} ; \quad \boldsymbol{\pi}_{EM}(\mathbf{r}, t) = \frac{\epsilon_0 \omega^2 |\mathbf{A}_0|^2}{2c} \mathbf{u}_k + \text{t.o.} \quad (1.21)$$

donde “t.o.” significa términos oscilantes que evolucionan armónicamente en torno a cero, en este caso con frecuencia 2ω . Puesto que el promedio temporal de estos términos es nulo,³ sólo son físicamente relevantes los valores promediados temporalmente o *efectivos*

$$u_{EM} = \langle u_{EM}(\mathbf{r}, t) \rangle_{\text{temp}} = \frac{\epsilon_0 \omega^2 |\mathbf{A}_0|^2}{2} \quad (1.22)$$

$$\boldsymbol{\pi}_{EM} = \langle \boldsymbol{\pi}_{EM}(\mathbf{r}, t) \rangle_{\text{temp}} = \frac{\epsilon_0 \omega^2 |\mathbf{A}_0|^2}{2c} \mathbf{u}_k = \frac{u_{EM}}{c} \mathbf{u}_k.$$

Dado que \mathbf{A}_0 es un vector constante, vemos que tanto u_{EM} como $\boldsymbol{\pi}_{EM}$ son independientes de la posición. Como resultado, la onda plana se propaga en la dirección \mathbf{u}_k y, salvo fluctuaciones temporales, u_{EM} y $\boldsymbol{\pi}_{EM}$ son las densidades de energía y de momento lineal que transporta.

La introducción de estos valores promediados temporalmente nos lleva de manera natural a definir la *intensidad* o *irradiancia* de la onda como el módulo del valor efectivo del vector de Poynting:

$$I_{EM} = |c^2 \boldsymbol{\pi}_{EM}| = c u_{EM} = \frac{c \epsilon_0 \omega^2 |\mathbf{A}_0|^2}{2}, \quad (1.23)$$

que puede interpretarse como la energía transportada por la onda por unidad de tiempo (salvo fluctuaciones en tiempos del orden de T) a través de una superficie de área unidad perpendicular a su dirección de propagación.

³ Salvo que seamos capaces de discriminar experimentalmente tiempos del orden del periodo de oscilación $T = 2\pi/\omega$.

§ 6. La onda EM plana se propaga en una dirección bien definida en todos los puntos del espacio. Estamos, pues, en una situación física en la que usamos *dos* aproximaciones límite: el monocromatismo y la extensión espacial infinita. Podríamos hacer una descripción más realista *modulando* esta onda, esto es, multiplicándola por un factor dependiente de la posición de tal modo que la región del espacio en la cual el campo EM toma valores no nulos sea limitada. Sin embargo esto no es inmediato ya que hay que seguir cumpliendo las ecuaciones de Maxwell. Estos aspectos técnicos son más propios de un texto de óptica, pero lo importante es: cuando decimos que el potencial vector de la radiación libre es $\Re(\mathbf{A}_0 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t))$ implícitamente estamos considerando que es una aproximación válida sólo en una región limitada, cuyo volumen es mucho mayor que la parte del espacio donde está el sistema físico que nos interesa estudiar. En otras palabras, damos siempre por supuesto que hablamos siempre de un *pulso electromagnético* que se desplaza con velocidad c a lo largo de la dirección $\mathbf{u}_k = \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$, pero cuyo potencial vector en la zona de interés se puede aproximar por el de una onda plana.

1.3. EL ANÁLISIS DE FOURIER

§ 1. La importancia de las ondas planas quedará patente cuando apliquemos a un campo EM $\mathcal{A}(\mathbf{r}, t)$ el *análisis de Fourier*. En esta sección presentaremos los principales resultados de esta herramienta matemática, aunque omitiendo cualquier demostración. Si está interesado puede consultar los textos de métodos matemáticos que se citan en la bibliografía.

§ 2. Sea $G(\mathbf{r})$ una función, en general compleja, definida sobre el espacio \mathbb{R}^N (lo habitual es $N = 3$ pero conviene considerar el caso más general). El resultado básico del análisis de Fourier es que dicha función puede escribirse mediante una suma (continua) de funciones proporcionales a $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ a través de una *transformada de Fourier inversa*

$$G(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{N/2}} \int_{\mathbb{R}^N} \tilde{G}(\mathbf{k}) e^{+i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^N \mathbf{k} \equiv \{\mathcal{F}^{-1} \tilde{G}\}(\mathbf{r}), \quad (1.24)$$

donde la función $\tilde{G}(\mathbf{k})$ es la *transformada de Fourier* de la función $G(\mathbf{r})$:

$$\tilde{G}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{N/2}} \int_{\mathbb{R}^N} G(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^N \mathbf{r} \equiv \{\mathcal{F} G\}(\mathbf{k}). \quad (1.25)$$

Supondremos que la función $G(\mathbf{r})$ cumple aquellas condiciones de decaimiento rápido a cero cuando $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ y de acotación que garantizan que su transformada de Fourier converja. A $\tilde{G}(\mathbf{k})$ se le llama *representación en el espacio recíproco* (el espacio de los vectores de onda \mathbf{k}) o, sencillamente, representación recíproca de $G(\mathbf{r})$.⁴

Si $g(\mathbf{r})$ es una función escalar y $G(\mathbf{r})$ otra vectorial, se tiene que

$$\begin{aligned}\nabla g(\mathbf{r}) &\xrightarrow{\mathcal{F}} i\mathbf{k}\tilde{g}(\mathbf{k}) \quad ; \quad \nabla^2 g(\mathbf{r}) \xrightarrow{\mathcal{F}} -|\mathbf{k}|^2 \tilde{g}(\mathbf{k}) \\ \nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}) &\xrightarrow{\mathcal{F}} i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{k}) \quad ; \quad \nabla \times \mathbf{G}(\mathbf{r}) \xrightarrow{\mathcal{F}} i\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{k}),\end{aligned}\tag{1.26}$$

por lo que las derivadas espaciales se transforman en multiplicaciones por el vector de ondas \mathbf{k} al pasar al espacio recíproco, aunque incluyendo un factor i .

El llamado *teorema de Parseval* nos dice que dadas dos funciones cualesquiera F y G se cumple que

$$\boxed{\int_{\mathbb{R}^N} G^*(\mathbf{r})F(\mathbf{r}) d^N\mathbf{r} = \int_{\mathbb{R}^N} \tilde{G}^*(\mathbf{k})\tilde{F}(\mathbf{k}) d^N\mathbf{k}.}\tag{1.27}$$

Conviene aquí comentar que el teorema es válido también si el producto entre G^* y F (o \tilde{G}^* y \tilde{F}) es el producto escalar o vectorial (en $N = 3$) en el caso en que G y F sean funciones vectoriales.

§ 3. Definamos la *delta de Dirac* centrada en el punto \mathbf{a} , $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{a})$, como aquella “función” para la que siempre se cumple que

$$\boxed{\int_{\mathbb{R}^N} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{a})g(\mathbf{r}) d^N\mathbf{r} = g(\mathbf{a})}\tag{1.28}$$

para cualquier función $g(\mathbf{r})$ continua en $\mathbf{r} = \mathbf{a}$. De acuerdo con esta definición, la delta en N dimensiones es igual al producto de N deltas unidimensionales. Por ejemplo en $N = 3$,

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{a}) = \delta(x - a_x)\delta(y - a_y)\delta(z - a_z), \quad \text{con } \mathbf{a} = a_x\mathbf{u}_x + a_y\mathbf{u}_y + a_z\mathbf{u}_z.$$

⁴ Hemos introducido una notación operacional muy del gusto de los matemáticos: \mathcal{F} es una aplicación que transforma la función $G(\mathbf{r})$ definida en el espacio de posiciones en otra función $\tilde{G}(\mathbf{k})$ definida en el espacio de vectores de onda (espacio recíproco). \mathcal{F}^{-1} sería la aplicación inversa.

De manera poco rigurosa podemos decir que

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{a}) = \delta(\mathbf{a} - \mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \text{si } \mathbf{r} \neq \mathbf{a} \\ \infty & \text{si } \mathbf{r} = \mathbf{a} \end{cases} \quad (1.29)$$

o, con algo más de propiedad, que la delta de Dirac es el límite de una función muy concentrada en torno a $\mathbf{r} = \mathbf{a}$ cuya integral sobre todo el espacio es igual a la unidad.⁵ Por ejemplo, en $N = 1$ la delta de Dirac es igual a los siguientes límites:

$$\delta(x - a) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{e^{-(x-a)^2/\varepsilon^2}}{\sqrt{\pi}\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{\varepsilon/\pi}{(x-a)^2 + \varepsilon^2} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{\sin[(x-a)/\varepsilon]}{\pi(x-a)} \quad (1.30)$$

En efecto, estas funciones cumplen que la integral sobre todo \mathbb{R} es igual a uno, y que cuando $\varepsilon \rightarrow 0$ se anulan en todos los puntos menos en a .

La delta de Dirac está estrechamente relacionada con la transformada de Fourier, puesto que puede demostrarse que

$$\int_{\mathbb{R}^N} e^{+i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} d^N \mathbf{k} = \int_{\mathbb{R}^N} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} d^N \mathbf{k} = (2\pi)^N \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (1.31)$$

expresión que ha de entenderse en sentido formal ya que, como acabamos de decir, la delta de Dirac es un límite. Al ser (1.31) independiente de las dimensiones físicas de \mathbf{k} y \mathbf{r}_i , tras un mero intercambio de variables

$$\int_{\mathbb{R}^N} e^{+i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{r}} d^N \mathbf{r} = \int_{\mathbb{R}^N} e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{r}} d^N \mathbf{r} = (2\pi)^N \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \quad (1.32)$$

donde la delta de Dirac $\delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$ para el espacio de vectores de onda tiene análoga interpretación que para el espacio de posiciones.

§ 4. El análisis de Fourier se aplica también a la descomposición de una función dependiente del tiempo en componentes monocromáticas (muchas veces llamadas *armónicos*). En concreto, para una función $g(t)$ general, que decae a cero suficientemente rápido cuando $|t| \rightarrow \infty$, su par de transformadas temporales de Fourier⁶ es

$$g(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{g}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad \hat{g}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(t) e^{+i\omega t} dt \quad (1.33)$$

⁵ Como se señala en el **Apéndice B**, la delta de Dirac sólo tiene sentido matemático pleno como una *distribución*. Esta definición como límite es, sin embargo, suficiente para nuestros propósitos.

⁶ Usamos $\tilde{G}(\mathbf{k})$ para designar la transformada de Fourier espacial de la función $G(\mathbf{r})$, y $\hat{g}(\omega)$ para la transformada de Fourier temporal de una función $g(t)$.

(la convención de signos de las exponenciales complejas temporales es la contraria que la de las transformaciones de Fourier espaciales). Naturalmente, el teorema de Parseval se sigue cumpliendo, al igual que las relaciones equivalentes a (1.31) y (1.32) entre la transformada de Fourier y las deltas de Dirac ($\delta(t - t_0)$ en tiempos y $\delta(\omega - \omega_0)$ en frecuencias).

Si $g(t)$ es real es fácil ver que $\hat{g}(-\omega) = \hat{g}^*(\omega)$. Por consiguiente, la expresión

$$g(t) = \int_0^\infty \frac{\hat{g}(\omega)e^{-i\omega t}}{\sqrt{2\pi}} d\omega + \int_{-\infty}^0 \frac{\hat{g}(\omega)e^{-i\omega t}}{\sqrt{2\pi}} d\omega = \int_0^\infty \frac{\hat{g}(\omega)e^{-i\omega t} + \hat{g}(-\omega)e^{+i\omega t}}{\sqrt{2\pi}} d\omega$$

puede escribirse como

$$g(t) = \Re e \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty 2\hat{g}(\omega)e^{-i\omega t} d\omega \right) \equiv \Re e(G(t)). \quad (1.34)$$

Esta función $G(t)$, llamada *representación compleja* de $g(t)$, se caracteriza porque su transformada de Fourier $\hat{G}(\omega)$ en frecuencias es nula si $\omega < 0$ y cumple que $2\hat{g}(\omega) \equiv \hat{G}(\omega)$ si $\omega > 0$. La expresión (1.34) generaliza entonces la (1.11) que habíamos usado en el caso monocromático.

Definamos ahora la *frecuencia media* de la función g como

$$\langle \omega \rangle = \frac{1}{U} \int_0^\infty \omega |\hat{G}(\omega)|^2 d\omega, \quad \text{con} \quad U \equiv \int_0^\infty |\hat{G}(\omega)|^2 d\omega. \quad (1.35)$$

Usando conocimientos de estadística elemental, sabemos que una medida de la concentración de las frecuencias de los armónicos de g alrededor de esa frecuencia media $\langle \omega \rangle$ es la *dispersión cuadrática media* $\Delta\omega$ de $g(t)$, obtenida como:

$$\Delta\omega = \left[\frac{1}{U} \int_0^\infty (\omega - \langle \omega \rangle)^2 |\hat{G}(\omega)|^2 d\omega \right]^{1/2}. \quad (1.36)$$

Si $\Delta\omega \ll \omega$ diremos que la función $g(t)$ es *cuasimonocromática*. Desarrollando $(\omega - \langle \omega \rangle)^2$ en (1.36) y agrupando términos es sencillo comprobar que $\Delta\omega$ también puede evaluarse como

$$\Delta\omega = \left[\frac{1}{U} \int_0^\infty \omega^2 |\hat{G}(\omega)|^2 d\omega - \langle \omega \rangle^2 \right]^{1/2} = \sqrt{\langle \omega^2 \rangle - \langle \omega \rangle^2}, \quad (1.37)$$

donde $\langle \omega^2 \rangle$ es el valor medio del cuadrado de la frecuencia. Cualitativamente, la función $g(t)$ será la superposición de armónicos con frecuencias concentradas en el intervalo $(\langle \omega \rangle - \Delta\omega, \langle \omega \rangle + \Delta\omega)$. A la cantidad $2\Delta\omega$ la llamaremos *anchura en frecuencias* o ancho de banda.

1.4. MODOS NORMALES DE RADIACIÓN

§ 1. Consideremos ahora una onda EM libre genérica cuyo potencial vector es $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$. Por conveniencia matemática trabajaremos con su representación compleja $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ que, de acuerdo con (1.34), está definida como

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \Re(\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)) , \quad \text{con } \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, \omega) = \begin{cases} 2\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, \omega) & \text{si } \omega \geq 0 \\ 0 & \text{si } \omega < 0 \end{cases} \quad (1.38)$$

Aun siendo complejo, el potencial vector $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ también obedece las ecuaciones de Maxwell en el vacío puesto que es una mera “reordenación” de $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ a través de su transformada de Fourier.

De acuerdo con los resultados básicos del análisis de Fourier, podemos escribir

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} d^3\mathbf{k} ; \quad \text{con } \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} d^3\mathbf{r} \quad (1.39)$$

y puesto que la transformada de Fourier de $\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ es $i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t)$, las ecuaciones (1.10) resultan ser (en el espacio de posiciones y su recíproco)

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0 &\Rightarrow \mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t) = 0 \\ \left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{0} &\Rightarrow c^2 |\mathbf{k}|^2 \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t) + \frac{\partial^2 \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t)}{\partial t^2} = \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (1.40)$$

Así, la condición de transversalidad se traduce en que $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t)$ es perpendicular al vector de onda \mathbf{k} [primera ecuación (1.40)] mientras que la ecuación de onda [segunda ecuación (1.40)] se reduce a que $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t)$ siga un movimiento oscilatorio armónico simple de frecuencia $\omega_k = c|\mathbf{k}|$.

Su solución general es $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t) = \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}) \exp(-i\omega_k t)$ ya que la otra posible solución, $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t) = \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}) \exp(+i\omega_k t)$, es incompatible con la definición (1.38). Sustituyendo en (1.39) y recordando que $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \Re(\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))$,

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\Re(\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k})e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_k t)})}{(2\pi)^{3/2}} d^3\mathbf{k} \quad \text{con} \quad \begin{cases} \omega_k = c|\mathbf{k}| \\ \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{k} = 0 \end{cases} \quad (1.41)$$

Por tanto, $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ es igual a la suma (continua a través de una integral) de potenciales vectores correspondientes a ondas planas. El análisis de Fourier nos ha

permitido llegar así a un resultado básico del electromagnetismo clásico: *toda onda electromagnética libre se puede escribir de manera única como una superposición de ondas planas*, que son así las *soluciones básicas* a las ecuaciones de Maxwell en el vacío. A cada una de las ondas planas que entran en la descomposición de Fourier (1.41) se la llama modo normal de radiación o simplemente *modo de radiación*. Cada modo de vector de onda \mathbf{k} está caracterizado por su frecuencia ω_k y por la amplitud compleja $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k})$ que, por la condición de transversalidad, es perpendicular a \mathbf{k} .

§ 2. Puede demostrarse (es algo técnico) que la energía y el momento lineal totales almacenados en el campo EM son

$$U_{\text{EM}}(t) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\epsilon_0 \omega_k^2 |\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k})|^2}{2} d^3\mathbf{k}; \quad \mathbf{P}_{\text{EM}}(t) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\epsilon_0 \omega_k^2 |\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k})|^2}{2c} \mathbf{u}_k d^3\mathbf{k} \quad (1.42)$$

donde $\mathbf{u}_k = \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$. Por tanto, vemos que $U_{\text{EM}}(t)$ y $\mathbf{P}_{\text{EM}}(t)$ son constantes en el tiempo, como era de esperar de los principios de conservación de la energía y del momento lineal. Recordando las igualdades (1.22) concluimos que *la energía y el momento lineal total de una onda EM libre son iguales a la suma de las energías y los momentos de los modos que la constituyen*. Además, cada contribución de vector de onda \mathbf{k} a la energía electromagnética total tiene la forma típica de un oscilador armónico de frecuencia ω_k y amplitud $|\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k})|$. Esta asociación formal justifica plenamente el término *modo de radiación* que estamos usando.

§ 3. La descomposición en modos normales permite definir diferentes funciones que son muy útiles en el análisis pormenorizado de la energía EM. La más inmediata es la llamada densidad de energía en el espacio recíproco

$$\varepsilon_{\text{EM}}(\mathbf{k}) = \frac{\epsilon_0 \omega_k^2 |\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k})|^2}{2} \quad (1.43)$$

ya que, tal y como se infiere de (1.42), $\varepsilon_{\text{EM}}(\mathbf{k})d^3\mathbf{k}$ es la energía EM almacenada en los modos cuyo vector de onda está dentro de un entorno del espacio recíproco de volumen $d^3\mathbf{k}$ centrado en \mathbf{k} . Esta densidad tiene así un carácter equivalente al de $u_{\text{EM}}(\mathbf{r}, t)$ en el espacio real aunque, como es inmediato comprobar, $\varepsilon_{\text{EM}}(\mathbf{k})$ y $u_{\text{EM}}(\mathbf{r}, t)$ no están relacionadas entre sí a través de una transformada de Fourier.

§ 4. Usando $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t) = \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}) \exp(-i\omega_k t)$, $\partial \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t)/\partial t = -i\omega_k \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}) \exp(-i\omega_k t)$ y el teorema de Parseval, la energía del campo EM puede reescribirse como

$$U_{\text{EM}} = \frac{\epsilon_0}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \left| \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right|^2 d^3\mathbf{r}. \quad (1.44)$$

El integrando de (1.44) *no es* en general la densidad de energía que ya conocemos. Sin embargo la diferencia entre una y otra integrada sobre todo el espacio no contribuye al valor neto de U_{EM} . Esto nos permite expresar la densidad de energía en términos del potencial vector complejo $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$:

$$u_{\text{EM}}(\mathbf{r}, t) = \frac{\epsilon_0}{2} \left| \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right|^2, \quad (1.45)$$

con la ventaja de que, aplicada a una onda monocromática $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)$, nos da directamente el valor promediado temporalmente.

1.5. INTERFERENCIA ENTRE ONDAS ELECTROMAGNÉTICAS

§ 1. Consideremos dos ondas EM que coinciden en una zona del espacio y cuyos potenciales vector complejos son $\mathbf{A}_1(\mathbf{r}, t)$ y $\mathbf{A}_2(\mathbf{r}, t)$. El principio de superposición dice que el potencial vector de la radiación resultante será

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_1(\mathbf{r}, t) + \mathbf{A}_2(\mathbf{r}, t).$$

Ahora bien, tal aditividad no se aplica a la densidad de energía puesto que ésta depende cuadráticamente del campo EM. Así, aplicando (1.45),

$$u_{\text{EM}}(\mathbf{r}, t) = \frac{\epsilon_0}{2} \left| \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right|^2 = \frac{\epsilon_0}{2} \left| \frac{\partial \mathbf{A}_1(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{A}_2(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right|^2$$

y, desarrollando el cuadrado del módulo,

$$u_{\text{EM}}(\mathbf{r}, t) = u_{\text{EM}, 1}(\mathbf{r}, t) + u_{\text{EM}, 2}(\mathbf{r}, t) + \epsilon_0 \Re \left(\frac{\partial \mathbf{A}_1^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}_2(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right). \quad (1.46)$$

§ 2. Supongamos ahora que las ondas 1 y 2 son monocromáticas con distintas frecuencias ω_1 y ω_2 . Como para cada onda monocromática se tiene que

$$\mathbf{A}_i(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_i(\mathbf{r}) e^{-i\omega_i t} \Rightarrow u_{\text{EM}, i}(\mathbf{r}) = \frac{\epsilon_0}{2} \left| \frac{\partial \mathbf{A}_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right|^2 = \frac{\epsilon_0 \omega_i^2}{2} |\mathbf{A}_i(\mathbf{r})|^2 \quad (1.47)$$

la densidad total de energía (1.46) será

$$u_{\text{EM}}(\mathbf{r}, t) = u_{\text{EM}, 1}(\mathbf{r}) + u_{\text{EM}, 2}(\mathbf{r}) + \epsilon_0 \omega_1 \omega_2 \Re \left(\mathbf{A}_1^*(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}_2(\mathbf{r}) e^{i(\omega_1 - \omega_2)t} \right). \quad (1.48)$$

El tercer término es una función armónica de frecuencia $\omega_1 - \omega_2$ cuyo promedio temporal es cero. Por tanto *en la superposición de ondas monocromáticas de diferentes frecuencias las densidades efectivas de energía son aditivas*.

Sin embargo, si $\omega_1 = \omega_2 \equiv \omega$ tendremos que $u_{\text{EM}}(\mathbf{r}, t)$ no depende del tiempo y que el último término de (1.48) ya no va a ser en promedio cero:

$$u_{\text{EM}}(\mathbf{r}) = u_{\text{EM},1}(\mathbf{r}) + u_{\text{EM},2}(\mathbf{r}) + \epsilon_0 \omega^2 \Re(\mathbf{A}_1^*(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}_2(\mathbf{r})). \quad (1.49)$$

Al superponerse ondas de igual frecuencia aparecen entonces fenómenos de *interferencia*, que se traducen en la no aditividad de las densidades efectivas de energía EM. Dicha interferencia se dirá *constructiva* en un punto \mathbf{r} si se cumple que $\Re(\mathbf{A}_1^*(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}_2(\mathbf{r})) > 0$ y *destructiva* en caso contrario. Puesto que la energía *total* debe ser igual a la suma de las energías totales de las ondas EM 1 y 2, la interferencia puede verse como una redistribución de la energía electromagnética, que tiende a concentrarse en las zonas en la que la interferencia es constructiva a expensas de las regiones en las que es destructiva. La importante igualdad (1.49) permite analizar la interferencia entre dos ondas monocromáticas de igual frecuencia simplemente estudiando el producto escalar de los vectores complejos $\mathbf{A}_1^*(\mathbf{r})$ y $\mathbf{A}_2(\mathbf{r})$.

1.6. DIFRACCIÓN DE UNA ONDA ELECTROMAGNÉTICA

§ 1. Otro fenómeno característico de las ondas EM (y de todas las ondas) es la *difracción*, entendida como el cambio que sufre una onda EM al incidir sobre un objeto (que puede ser desde una pequeña esfera hasta una pared opaca con una abertura que sí permite el paso de la radiación).

El tratamiento completo del fenómeno exige conocer cómo responde el objeto a la radiación y obtener el correspondiente campo EM inducido. Alternativamente, si conocemos o presuponemos el comportamiento del campo EM en la interfase entre el objeto y el vacío (condiciones de contorno) podremos enfocar el problema desde un punto de vista macroscópico. A pesar de esta simplificación, la resolución de una ecuación con condiciones de contorno constituye un problema matemático en muchos casos formidable, que se ve complicado además por el carácter vectorial del campo EM. En particular, si la radiación incidente es monocromática y suponemos que el *esparcimiento*⁷ de la onda en la región interfacial preserva tanto

⁷ También se usa el término *dispersión*, aunque esa palabra tiene muchos posibles significados. En inglés, la palabra que se utiliza es *scattering*.

el monocromatismo como la frecuencia de la onda,⁸ el potencial vector complejo total $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)$ satisfará fuera del objeto las ecuaciones (1.14) para el potencial vector en ausencia de fuentes.

Podemos, sin embargo, hacer un análisis mucho más simple. A tal fin imaginemos una onda plana de frecuencia ω que se propaga en la dirección OY procedente desde $y = -\infty$

$$\mathbf{A}_{\text{in}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0 e^{iky} e^{-i\omega t} \quad \text{con } k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\omega}{c}, \quad (1.50)$$

donde \mathbf{A}_0 es perpendicular a la dirección de propagación \mathbf{u}_y . Dicha onda incide perpendicularmente sobre una fina lámina situada en el plano XZ que es opaca a la radiación pero que tiene una abertura de tamaño infinitesimal situada en $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ con área $d^2\mathbf{r}'$ (vea la **FIG. 1-2**). De acuerdo con el *principio de Huygens-Fresnel* esa pequeña abertura actúa como la fuente de una *onda esférica* cuya expresión genérica es

$$d\mathbf{A}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} = \beta k \frac{\mathbf{A}_0 e^{ikr}}{r} e^{-i\omega t} d^2\mathbf{r}', \quad (1.51)$$

donde β es un factor adimensional que indicaremos un poco más adelante.

Supongamos ahora que la lámina tiene una abertura \mathcal{S} (de forma genérica) cuyo centro geométrico situaremos en $\mathbf{r} = \mathbf{0}$. De acuerdo con el principio de superposición, el campo EM total en la región $y > 0$ será la suma de los campos emitidos desde los elementos diferenciales en los que podemos dividir \mathcal{S} . Teniendo en cuenta que ahora cada uno de los elementos diferenciales está situado en \mathbf{r}' , la radiación total difractada será la suma sobre esos elementos diferenciales

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} = \beta k \mathbf{A}_0 e^{-i\omega t} \int_{\mathcal{S}} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^2\mathbf{r}' \quad (1.52)$$

Sin embargo puede probarse que esta expresión sólo es válida (es decir, obedece las ecuaciones de Maxwell) si el punto \mathbf{r} está muy cerca del eje OY ($\mathbf{r} \simeq r\mathbf{u}_y$ ó $\theta \simeq \pi/2$ en la **FIG. 1-2**) y si la distancia desde el punto \mathbf{r} a la abertura es mucho mayor que λ . En caso contrario la expresión del campo difractado será mucho más complicada.

En el límite de abertura infinitamente grande, $\mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R}^2$, la radiación atravesará la abertura sin verse perturbada. El campo (1.52) deberá tender entonces en

⁸ En esencia, estamos diciendo que la interacción entre la onda y el objeto es similar a una colisión elástica.

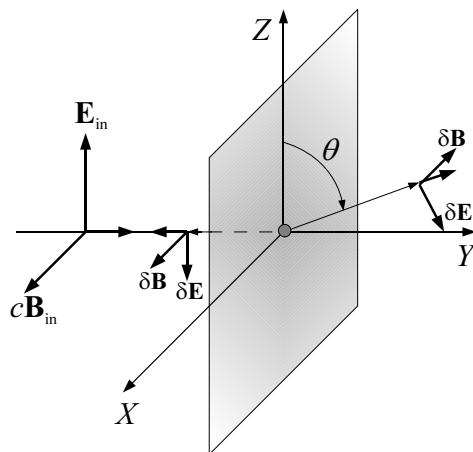


Figura 1-2. Esquema de la difracción de una onda EM plana a través de una pequeña abertura efectuada en una lámina opaca dispuesta en el plano XZ

la región $y > 0$ al potencial vector $\mathbf{A}_{\text{in}}(\mathbf{r}, t)$. Puede probarse que eso ocurre si $\beta = 1/(2\pi i)$. En suma, la radiación difractada por una abertura finita es:

$$\boxed{\mathbf{A}(\mathbf{r})e^{-i\omega t} = \left[\frac{k}{2\pi i} \int_{\mathcal{S}} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^2\mathbf{r}' \right] \mathbf{A}_0 e^{-i\omega t} \quad \text{si } r \simeq y \gg \lambda.} \quad (1.53)$$

Como ya hemos comentado, $\mathbf{A}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)$ es igual a la superposición de ondas esféricas de igual frecuencia ω emitidas desde cada punto de la abertura. Cada una de estas ondas, que se suelen denominar *secundarias*, recorrerá un camino óptico diferente hasta llegar al punto \mathbf{r} lo que implica distintos valores del factor $\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$. Esto se traducirá en interferencias entre las ondas secundarias, que se pueden observar en los característicos patrones de difracción que se aprecian al estudiar la luz difractada por la abertura \mathcal{S} sobre una pantalla situada tras la lámina.

§ 2. Consideremos ahora la *difracción por una rendija* centrada en $\mathbf{r} = \mathbf{0}$, orientada en la dirección OX , de anchura muy pequeña b y longitud $L \gg y$ (vea la FIG. 1-3). Dividiendo la rendija en pequeños elementos diferenciales de área $b dx'$, el campo difractado en un punto $\mathbf{r} = (x, y, z)$ con $y \simeq r$ se obtendrá a partir de la integral entre paréntesis cuadrados que aparece en (1.53):

$$\mathfrak{I}(\mathbf{r}) \equiv \frac{k}{2\pi i} \int_{\mathcal{S}} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^2\mathbf{r}' \simeq \frac{kb}{2\pi i} \int_{-L/2}^{+L/2} \frac{\exp\left(ik\sqrt{(x-x')^2 + y^2 + z^2}\right)}{\sqrt{(x-x')^2 + y^2 + z^2}} dx'$$

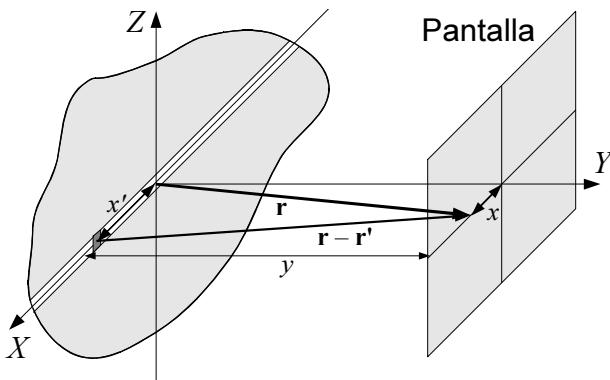


Figura 1-3. Geometría para el estudio de la difracción por una rendija muy estrecha.

Como $L \gg y$ podemos extender esta integral a $(-\infty, +\infty)$ y, por simetría, el resultado no dependerá de la coordenada x , bastando evaluarla para $x = 0$. La integral resultante se expresa en términos de funciones de Bessel, pero en el límite $r \gg \lambda$ relevante para nosotros se tiene que

$$\mathfrak{J}(\mathbf{r}) \simeq \frac{e^{-i\pi/4}kb}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{ikr}}{\sqrt{kr}} \quad \text{si } kr \gg 1.$$

Entonces, el potencial vector de la radiación difractada es

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} \simeq \frac{e^{-i\pi/4}kb}{\sqrt{2\pi}} \frac{\mathbf{A}_0 e^{i(kr - \omega t)}}{\sqrt{kr}} \quad \text{si} \quad \begin{cases} L \gg y \simeq r \gg \lambda \\ y \text{ y } b \text{ es despreciable} \\ \text{frente a } y \end{cases} \quad (1.54)$$

Esta es la forma de una *onda cilíndrica* en la que la amplitud decae como la raíz cuadrada de la distancia r entre el punto y y la fuente (en este caso, el eje X). Por consiguiente, el principio de Huygens-Fresnel también es aplicable: *una rendija estrecha y muy larga actúa como fuente de una onda cilíndrica*.

§ 3. Partiendo del resultado (1.54) estudiemos ahora la difracción de una onda plana por *dos* rendijas de anchura b despreciable, paralelas y muy largas separadas una distancia D . Este es el célebre *dispositivo interferométrico de Thomas Young*, representado esquemáticamente en la **FIG. 1-4**, que tendrá una importancia central en el establecimiento de las bases teóricas de la física cuántica.⁹

⁹ **Thomas Young** (1773-1829) es uno de los últimos representantes del saber realmente pluridisciplinar: además de físico fue músico, pintor, médico y lingüista. Especializado en lenguas clásicas

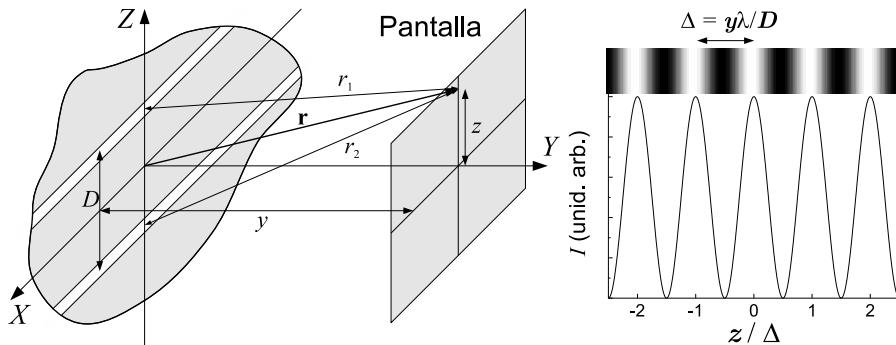


Figura 1-4. Esquema del dispositivo interferométrico de Young. La condición $y \gg D$ no se aprecia en la figura para facilitar la representación).

El campo en cada punto de una pantalla a una distancia y será la superposición de los campos difractados por cada rendija. Si $y \gg D$ no hay problema alguno en usar (1.54) para los campos difractados por cada rendija, pero hemos de tener en cuenta las diferentes distancias r_1 y r_2 entre el punto \mathbf{r} y cada rendija:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) \simeq \frac{e^{-i\pi/4}kb}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{e^{ikr_1}}{\sqrt{kr_1}} + \frac{e^{ikr_2}}{\sqrt{kr_2}} \right) \mathbf{A}_0 \quad \text{si } y \gg \lambda, |z|, D$$

$$r_1 = \sqrt{y^2 + \left(z - \frac{D}{2}\right)^2} \simeq \sqrt{r^2 - zD} \quad ; \quad r_2 = \sqrt{y^2 + \left(z + \frac{D}{2}\right)^2} \simeq \sqrt{r^2 + zD}.$$

Nótese que hemos despreciado D^2 frente a y^2 , y que $r \equiv (z^2 + y^2)^{1/2} \simeq y$ es la distancia entre el punto en el que estamos calculando el campo y el eje OX . Podemos sustituir r_1 y r_2 por r en los denominadores de $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, pero en la exponencial compleja hemos de ser más cuidadosos. Dado que $kDz/(2r)$ puede tomar valores del orden de π , lo que implicaría una diferencia de fase que no podemos despreciar, conviene hacer un desarrollo en serie de las raíces cuadradas

$$kr_{1,2} \simeq k\sqrt{r^2 \pm zD} = kr\sqrt{1 + \frac{zD}{r^2}} \simeq kr \pm \frac{kD}{2r}z + \dots$$

y orientales, su trabajo en este campo fue esencial para que Champollion pudiese descifrar la piedra Rosetta que, curiosamente, había sido encontrada siendo Fourier gobernador de Egipto. Como dato añadido, Young aprendió a leer correctamente ¡a los dos años de edad!

Con todo ello llegamos a que

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) \simeq \frac{2e^{-i\pi/4}kb}{\sqrt{2\pi}} \cos\left(\frac{kDz}{2r}\right) \frac{e^{ikr}}{\sqrt{kr}} \mathbf{A}_0 \quad \text{si } y \gg \lambda, |z|, D. \quad (1.55)$$

La intensidad $I_{\text{EM}} = cu_{\text{EM}}$ en un punto con coordenada z de la pantalla y no muy alejado de su centro será

$$I_{\text{EM}}(\mathbf{r}) = \frac{\epsilon_0 \omega^2 c}{2} |\mathbf{A}(\mathbf{r})|^2 \simeq 4 \frac{\epsilon_0 b^2 \omega^3 |\mathbf{A}_0|^2}{4\pi r} \cos^2\left(\frac{kDz}{2r}\right). \quad (1.56)$$

La radiación difractada da entonces lugar a franjas muy bien definidas sobre la pantalla (vea el panel derecho de la **FIG. 1-4**) resultado de interferencias constructivas y destructivas entre los campos procedentes de cada rendija. Los centros de dos franjas sucesivas (en la coordenada z) están separados una distancia

$$\Delta = \frac{2\pi r}{kD} \simeq \frac{2\pi y}{kD} = \frac{y\lambda}{D}. \quad (1.57)$$

1.7. COHERENCIA

§ 1. En la sección anterior hemos visto que sólo hay interferencias entre ondas EM monocromáticas con igual frecuencia. Por el contrario, y tal como muestra la experiencia diaria, no apreciamos interferencias entre dos ondas EM si cada una es resultado de la superposición de *muchas* ondas de frecuencias diferentes. Esto es fácilmente explicable si tenemos en cuenta que las interferencias entre las componentes monocromáticas con igual frecuencia de cada onda pueden ser constructivas o destructivas y, en promedio, tenderán a compensarse. Ahora bien, tal compensación debe estudiarse cuantitativamente lo que hace necesario introducir el concepto de **coherencia**, entendido como la capacidad de dos ondas EM para crear interferencias cuando se superponen en una región del espacio.

§ 2. Consideremos dos ondas EM cuyos potenciales vector complejos en un punto \mathbf{r} son $\mathbf{A}_1(t)$ y $\mathbf{A}_2(t)$, respectivamente (omitiremos la variable espacial \mathbf{r} puesto que es irrelevante para la siguiente discusión). Para que se produzca una interferencia efectiva las ondas deben oscilar con la misma frecuencia pero, además, la orientación relativa entre sus campos ha de ser constante, al igual que la diferencia de fase entre sus oscilaciones. En caso contrario las interferencias serán alternativamente constructivas y destructivas y, en promedio, se cancelarán. A la vista de esto, dos ondas perfectamente monocromáticas con igual frecuencia son

coherentes mientras que dos pulsos con distinta frecuencia no lo son. La cuestión está en ver hasta qué punto hay coherencia entre dos pulsos cuasimonocromáticos *con la misma frecuencia media*.

Para simplificar la discusión supongamos que la orientación de los dos pulsos es siempre la misma, que el pulso $\mathbf{A}_1(t)$ es a todos los efectos monocromático con frecuencia ω , mientras que el segundo es cuasimonocromático con igual frecuencia. Esto se traduce en que

$$\mathbf{A}_1(t) = \mathbf{A}_1 e^{-i\omega t} ; \quad \mathbf{A}_2(t) = \mathbf{A}_2 \alpha(t) e^{-i\omega t} = \mathbf{A}_2 |\alpha(t)| e^{i\Delta(t)} e^{-i\omega t} \quad (1.58)$$

donde $\alpha(t) = |\alpha(t)| \exp[i\Delta(t)]$ es una función compleja que prácticamente no cambia en un periodo de oscilación $T = 2\pi/\omega$. Como $|\alpha(t)|$ es un factor multiplicativo que apenas varía, la coherencia entre los pulsos estará determinada por el factor de fase dependiente del tiempo $\Delta(t)$.

Como vimos en la ecuación (1.46), el término de interferencia entre los dos pulsos es

$$\epsilon_0 \Re \left(\frac{\partial \mathbf{A}_1^*(t)}{\partial t} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}_2(t)}{\partial t} \right).$$

Supongamos que las funciones $\alpha(t)$ y $\Delta(t)$ varían lentamente, por lo que podemos despreciar sus derivadas en la evaluación de $\partial \mathbf{A}_2(t)/\partial t$, para obtener aproximadamente

$$\epsilon_0 \omega^2 \Re \left(\mathbf{A}_1^* \cdot \mathbf{A}_2 |\alpha(t)| e^{i\Delta(t)} \right).$$

Fijado un instante inicial t_0 , cuando haya transcurrido un intervalo en el que $\Delta(t)$ haya cambiado en un valor del orden de π , el término de interferencia pasará de positivo a negativo (o viceversa). Esto implica que la interferencia habrá tornado de constructiva a destructiva (o al revés) y diremos que las dos ondas han perdido su coherencia mutua.

Esto puede observarse en la **FIG. 1-5**. Los pulsos $A_2(t)$ y $A_3(t)$ son cuasimonocromáticos de frecuencia ω y, a primera vista, bastante similares entre sí. Sin embargo para el primero la función de fase $\Delta(t)$ se mantiene prácticamente constante mientras que para el segundo $\Delta(t)$ cambia de manera apreciable transcurridos aproximadamente 50 ciclos. Si superponemos cada una de estas ondas con un pulso monocromático $A_1(t) = A \exp(-i\omega t)$ se producirá una clara interferencia entre $A_2(t)$ y $A_1(t)$, en este caso constructiva (véase la figura superior del panel derecho). Por el contrario, la interferencia entre $A_3(t)$ y $A_1(t)$ es alternativamente constructiva y destructiva y, en promedio, se tiene que

$$\langle |A_1(t) + A_3(t)|^2 \rangle_{\text{temp}} = \langle |A_1(t)|^2 \rangle_{\text{temp}} + \langle |A_3(t)|^2 \rangle_{\text{temp}}. \quad (1.59)$$

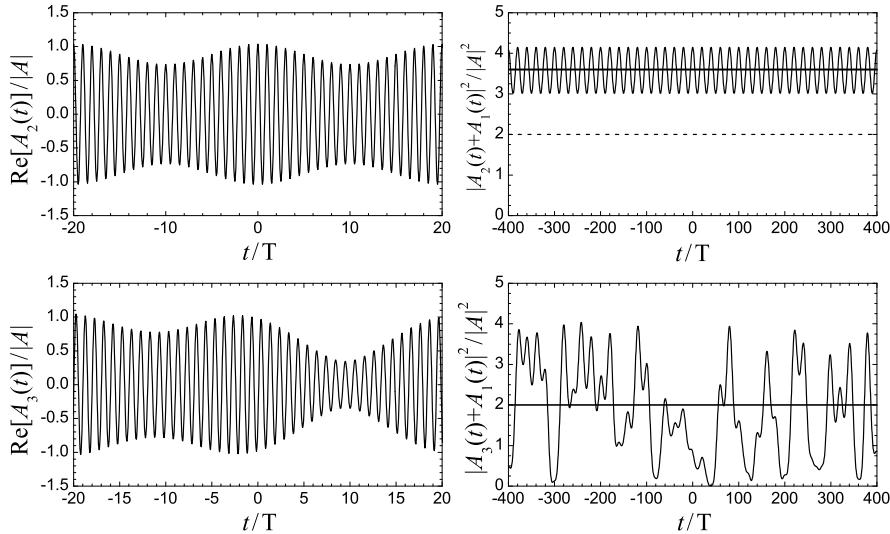


Figura 1-5. Panel de la izquierda: dos pulsos cuasimonocromáticos $A_2(t)$ y $A_3(t)$. Panel de la derecha: superposición de los pulsos $A_2(t)$ y $A_3(t)$ con un pulso monocromático $A_1(t)$. Para el primero hay una interferencia claramente constructiva para todo t (figura superior, panel derecho), pero para el segundo la superposición es incoherente y la interferencia cambia su carácter constructivo o destructivo cada 50 ciclos aproximadamente (figura inferior del panel derecho).

Por tanto, de acuerdo con lo ya expuesto en la sección 1.5, *en una superposición incoherente la densidad efectiva de energía EM es aditiva* aunque las ondas sean cuasimonocromáticas con igual frecuencia. No podremos observar entonces fenómenos de interferencia pudiéndose hablar en este caso de una *mezcla* de las diferentes ondas.

Por ejemplo, en el experimento de Young las rendijas actúan como fuentes de dos ondas EM que se superponen coherentemente en la región $y > 0$, lo que conduce a los fenómenos de interferencia que ya conocemos. Por el contrario, en la mayoría de las situaciones cotidianas los pulsos cuasimonocromáticos que se superponen en una región del espacio no son coherentes o pierden su coherencia transcurrido un intervalo de tiempo pequeño.

PROBLEMAS PROPUESTOS

PROBLEMA 1.1. *El momento angular del oscilador armónico*

La representación compleja de un vector no es exclusiva de la radiación EM. Por ejemplo, la posición de una partícula de masa M que describe un movimiento oscilatorio armónico en tres dimensiones estaría dada por $\mathbf{R}(t) = \Re[\mathcal{R}_0\zeta \exp(-i\omega t)]$, donde \mathcal{R}_0 es real y positivo y ζ un vector de componentes complejas tal que $\zeta^* \cdot \zeta = 1$. Evalúe el momento angular o cinético $\mathbf{L}(t)$ de la partícula escribiéndolo en función de M , \mathcal{R}_0 , ω y ζ . Discuta el resultado.

PROBLEMA 1.2. *Algunas propiedades de la delta de Dirac*

A partir de la definición de la delta de Dirac como el límite

$$\delta(x - a) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{\pi^{-1}\varepsilon}{(x - a)^2 + \varepsilon^2}$$

demuestre las siguientes igualdades:

i) $\delta(x - a) = \delta(a - x)$; ii) $\delta(bx - a) = \frac{1}{|b|}\delta(x - \frac{a}{b})$; iii) $\psi(x)\delta(x - a) = \psi(a)\delta(x - a)$

PROBLEMA 1.3. *Propiedades de la transformada de Fourier*

Consideremos una función $g(\mathbf{r})$ lo suficientemente regular para que su representación recíproca $\tilde{g}(\mathbf{k})$ esté bien definida.

- a) Demuestre que si $g(\mathbf{r})$ es real, entonces $\tilde{g}(\mathbf{k}) = \tilde{g}^*(-\mathbf{k})$.
- b) Obtenga la representación recíproca de la función $h(\mathbf{r}) = g(\alpha\mathbf{r})$, con $\alpha \in \mathbb{R}^+$, en términos de $\tilde{g}(\mathbf{k})$
- c) Pruebe que la transformada de Fourier de $\partial^n g(\mathbf{r})/\partial x^n$ es $(ik_x)^n \tilde{g}(\mathbf{k})$.
- d) Halle la representación recíproca de $\nabla^2 g(\mathbf{r})$ y de $\nabla g(\mathbf{r})$.
- e) Si $\mathbf{G}(\mathbf{r})$ es un campo vectorial cuya transformada de Fourier es $\tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{k})$, evalúe la representación en el espacio recíproco de los campos $\nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r})$ y $\nabla \times \mathbf{G}(\mathbf{r})$.

PROBLEMA 1.4. *El producto de convolución*

Sean dos funciones $g(\mathbf{r})$ y $h(\mathbf{r})$. Definimos su *producto de convolución* como

$$C(\mathbf{r}) = (g * h)(\mathbf{r}) \equiv \int_{\mathbb{R}^N} g^*(\mathbf{s} - \mathbf{r})h(\mathbf{s})d^N\mathbf{s} \quad (1.60)$$

Demuestre que su transformada de Fourier es

$$\tilde{C}(\mathbf{k}) = (2\pi)^{N/2} \tilde{g}^*(\mathbf{k}) \tilde{h}(\mathbf{k}), \quad (1.61)$$

esto es, esencialmente el producto de las funciones transformadas. Este resultado es conocido como *teorema de convolución*.

TEMA 2

PROPIEDADES CORPUSCULARES DE LA RADIACIÓN

Lo que hoy conocemos como física cuántica empieza a gestarse a finales del siglo XIX cuando se comprueba que las leyes clásicas de la Física Estadística y de las ecuaciones de Maxwell, que unifican todo el electromagnetismo en una formulación teórica conceptualmente simple y consistente, eran incapaces de explicar unos pocos fenómenos relacionados con la radiación electromagnética. Aunque Max Planck fue el primero en proponer una *ley de cuantización* en su búsqueda de una solución al llamado *problema de la cavidad radiante*, fue la hipótesis de los *quanta de energía* de Albert Einstein en su explicación del efecto fotoeléctrico la que abrió el desarrollo de una *nueva física* que, tímidamente en sus inicios y radicalmente en los años veinte del siglo pasado, cambió completamente la manera de entender los fenómenos físicos y de describir y predecir sus propiedades.

Tras introducir el *fotón* como la partícula constitutiva de la radiación electromagnética, caracterizaremos sus propiedades físicas. Acto seguido hallaremos la energía de un campo electromagnético confinado en equilibrio térmico (el mencionado problema de la cavidad radiante) y estudiaremos el *efecto Compton*, la dispersión de la radiación por partículas puntuales, que constituye la prueba definitiva del carácter corpuscular de la radiación. A continuación analizaremos la presión de radiación, pero desde una perspectiva diferente a la del electromagnetismo clásico. Cerraremos el capítulo con una breve discusión de los órdenes de magnitud típicos en procesos microscópicos, e introduciremos el sistema de unidades atómicas.

Orientaciones generales al plan de trabajo

No es el objetivo de este capítulo desarrollar con detalle fenómenos de interacción radiación-materia. Los contenidos *conceptuales* son aquí más importantes, ya que desde el principio empezamos a enfatizar las “peculiaridades” de la física cuántica. Por tanto, sugerimos **8 horas** de trabajo personal, con el fin de que comprenda perfectamente las ideas que vamos a transmitir antes de abordar los siguientes capítulos.

Objetivos del capítulo

- Comprender por qué el electromagnetismo clásico no puede explicar una serie de fenómenos que, sin embargo, son perfectamente justificables acudiendo a la naturaleza corpuscular de la radiación.
- Conocer la caracterización del estado físico de un fotón a través de su energía y momento lineal.
- Saber interpretar desde la perspectiva de la física cuántica fenómenos de interferencia y difracción de un haz de fotones.
- Ser capaz de describir fenómenos simples de interacción entre luz y materia como el resultado de interacciones mecánicas entre fotones y partículas puntuales. Entender las diferencias esenciales con el tratamiento clásico (interacción entre una onda electromagnética y una carga puntual).
- Familiarizarse con órdenes de magnitud típicos de la escala microscópica.

2.1. CUANTIZACIÓN DE LA RADIACIÓN. FOTONES

§ 1. Varios estudios iniciados por Heinrich Hertz en 1887 mostraron que cuando un haz de luz incidía sobre un metal se podían observar fenómenos eléctricos en su superficie. Unos años después, Joseph John Thomson realizó sus propias experiencias y, usando sus conocimientos previos sobre la naturaleza corpuscular de los rayos catódicos, propuso que lo que se producía era una emisión de electrones resultado de la absorción de la radiación por el metal. Esto explica la denominación actual de *efecto fotoeléctrico* o *fotoemisión* que se da a este fenómeno.

El efecto fotoeléctrico no tiene nada de extraño en sí mismo: la radiación incidente comunica energía al metal, siendo absorbida por los electrones menos ligados que al ver incrementada su energía cinética pueden escapar al exterior del metal. Lo que resultó realmente sorprendente fue una serie de medidas realizadas por Philipp von Lenard en 1902, que mostraron que al hacer incidir radiación monocromática sobre un metal se tenía que: **i)** por debajo de una frecuencia umbral del haz de luz incidente, cuyo valor dependía del material, no se producía emisión de electrones por muy intensa que fuese la radiación; **ii)** la velocidad con la que salían los electrones emitidos no dependía de la intensidad de la radiación incidente, sino de su frecuencia y de la composición del metal; **iii)** el número de electrones emitidos por unidad de tiempo era proporcional a la intensidad de la luz; **iv)** la emisión, de producirse, era instantánea aunque la radiación fuese muy poco intensa.

Estos resultados no pueden explicarse con las leyes de la física clásica ya que ésta presupone que la transferencia de energía entre un campo electromagnético y un medio material se produce de manera continua. Así, al aumentar la intensidad del campo EM los electrones absorberían más energía por unidad de tiempo y se favorecería su salida del metal sin que la frecuencia de la radiación juegue un papel primordial en el proceso.

§ 2. La solución al enigma la presentó Albert Einstein en 1905. El entonces empleado de la oficina de patentes de Berna sugirió que la energía de un campo electromagnético monocromático estaba *cuantizada* en paquetes individuales de energía cuyo valor es

$$E_\gamma = h\nu = h\frac{\omega}{2\pi} \equiv \hbar\omega, \quad (2.1)$$

siendo ν la frecuencia de la radiación y h la hoy llamada *constante de Planck* ($h \simeq 6,63 \times 10^{-34}$ J s). En (2.1) hemos reescrito $h\nu$ en términos de la frecuencia angular ω , lo que define la *constante de Planck racionalizada* $\hbar \equiv h/(2\pi)$.

Como resultado, parece razonable afirmar que una radiación monocromática de frecuencia ω está compuesta de partículas, que años después de la sugerencia de Einstein se llamaron *fotones*, cuya energía es precisamente $E_\gamma = \hbar\omega$. Por otro lado, ya que la radiación electromagnética viaja a la velocidad de la luz $c \simeq 3 \times 10^8$ m/s, el fotón ha de tener masa nula (una partícula con masa no puede viajar a la velocidad de la luz). Si la radiación se propaga en una dirección \mathbf{u} , de acuerdo con la relación energía-momento de la teoría de la relatividad especial del propio Einstein, el momento lineal del fotón será

$$\boxed{\mathbf{p}_\gamma = \frac{1}{c} E_\gamma \mathbf{u} = \frac{\hbar\omega}{c} \mathbf{u} = \hbar \mathbf{k} = \frac{h}{\lambda} \mathbf{u},} \quad (2.2)$$

donde $\mathbf{k} = k\mathbf{u} = (\omega/c)\mathbf{u}$ es el vector de onda de la radiación electromagnética (EM) y $\lambda = 2\pi/k$ su longitud de onda. Finalmente, si la intensidad de la onda es I_{EM} , el número de fotones que forman la onda EM por unidad de volumen es

$$\boxed{\rho_\gamma = \frac{u_{\text{EM}}}{\hbar\omega} = \frac{I_{\text{EM}}}{\hbar\omega c}} \quad (2.3)$$

dado que la energía media por unidad de volumen del haz es $u_{\text{EM}} = I_{\text{EM}}/c$. Estas expresiones son especialmente importantes puesto que relacionan las propiedades de los fotones (número por unidad de volumen, momento¹ y energía) con las de la radiación (intensidad, vector de onda y frecuencia). Tiene así sentido hablar de fotones con vector de onda $\mathbf{k} = \mathbf{p}_\gamma/\hbar$ y frecuencia $\omega = E_\gamma/\hbar = kc$.

Es sencillo ver cómo la hipótesis de paquetes de energía o *quanta de luz* explica perfectamente los resultados experimentales de Lenard punto por punto.² Si la frecuencia del haz radiativo incidente es pequeña, la energía $\hbar\omega = h\nu$ absorbida por un electrón será insuficiente para que éste escape del metal (a no ser que el electrón absorba la energía de dos o más fotones que impacten casi simultáneamente contra el mismo, proceso que es muy improbable que ocurra

¹ Cuando nos refiramos al momento lineal y siempre que no exista riesgo de confusión con el momento angular, utilizaremos únicamente la palabra momento.

² Si usamos el término derivado originalmente del latín, el singular es *quantum* y el plural es *quanta*. La castellanización de la palabra da lugar a la forma singular *cuanto* y a la plural *cuantos* y expresiones como *quantum de energía* o *teoría de los quanta* apenas se usan hoy en día.

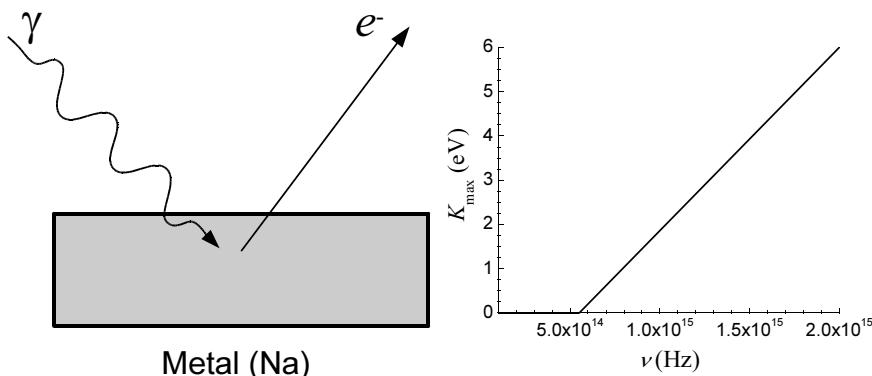


Figura 2-1. Esquema del efecto fotoeléctrico (izquierda) y dependencia de la energía cinética máxima K_{\max} de los fotoelectrones frente a la frecuencia ν de la radiación incidente en el sodio (derecha). La frecuencia a la que comienzan a aparecer los fotoelectrones define la función de trabajo W del material.

antes de que el electrón pierda su energía cinética como resultado de los procesos que ocurren dentro del metal, como la interacción con los iones del metal o con otros electrones): sólo habrá emisión de electrones si la energía del fotón es mayor que la energía de ligadura mínima W de los electrones en el metal (energía llamada *función de trabajo* y que es característica de cada material). A su vez, la energía cinética con la que salen los electrones más débilmente ligados será $K_{\max} = h\nu - W$ (vea la FIG. 2-1) siendo posible también que electrones más ligados al metal salgan emitidos pero necesariamente con energía menor que K_{\max} . Al incrementar la intensidad de la radiación pero manteniendo su frecuencia, crece el número de fotones por unidad de tiempo que impactan contra el metal incrementándose así el número de electrones emitidos, pero no su energía cinética. Finalmente, el electrón absorbe la energía del fotón de manera prácticamente instantánea puesto que el proceso puede verse como una colisión entre dos corpúsculos (el electrón y el fotón).

Veamos un sencillo ejemplo.

EJEMPLO 2.a. Ilustración del efecto fotoeléctrico

Sobre una lámina de sodio de 1 cm^2 de superficie incide perpendicularmente un haz de radiación monocromática cuya intensidad es de 200 W/m^2 .

- a) Sabiendo que la función de trabajo W del sodio es $2,3 \text{ eV}$, calcule la frecuencia mínima ν_{\min} que ha de tener la radiación para que se observe efecto fotoeléctrico.

- b)** Si la frecuencia del haz es $2\nu_{\min}$, obtenga el número de fotones que impactan contra la superficie del metal por unidad de tiempo, así como la energía cinética máxima de los electrones emitidos.

Solución:

- a)** Para que haya efecto fotoeléctrico la frecuencia ν del haz incidente debe ser mayor que $\nu_{\min} = W/h$. El valor de esta frecuencia umbral es

$$\nu_{\min} = \frac{W}{h} = \frac{2,3 \cdot 1,6 \times 10^{-19} \text{ J}}{6,63 \times 10^{-34} \text{ J s}} = 5,5 \times 10^{14} \text{ s}^{-1},$$

que está dentro del rango del visible.

- b)** Ya que el haz de intensidad I_{EM} incide perpendicularmente sobre la lámina de superficie S , la potencia absorbida es $I_{EM}S$. De esta manera, el número de fotones que impactan por unidad de tiempo es

$$N = \frac{I_{EM}S}{h\nu} = \frac{I_{EM}S}{h(2\nu_{\min})} = \frac{I_{EM}S}{2W} = \frac{200 \text{ J m}^{-2} \text{ s}^{-1} \cdot 10^{-4} \text{ m}^2}{2 \cdot 2,3 \cdot 1,6 \times 10^{-19} \text{ J}} = 2,7 \times 10^{16} \text{ fot/s.}$$

En cuanto a la energía cinética máxima de los electrones emitidos, ésta es

$$K_{\max} = h\nu - W = 2h\nu_{\min} - W = 2W - W = 2,3 \text{ eV}$$

que es mucho menor que la energía en reposo del electrón $m_e c^2 \simeq 0,511 \text{ MeV}$.

2.2. INTERPRETACIÓN PROBABILÍSTICA PARA EL FOTÓN

§ 1. La hipótesis de Einstein sobre la naturaleza corpuscular de la radiación soluciona de manera sencilla y elegante un problema pero abre aparentemente otro: ¿cómo compatibilizar esta naturaleza corpuscular con el bien conocido comportamiento ondulatorio de la radiación que hemos visto en el capítulo anterior? Por ejemplo, si admitimos que la radiación electromagnética no es otra cosa que un haz de fotones ¿cómo explicar fenómenos tales como la difracción o la interferencia? Una solución simple es suponer que los campos EM son herramientas que representan las propiedades colectivas de un gran número de fotones. Así, los fotones considerados individualmente son partículas, pero si pensamos en un conjunto muy grande de ellos se pueden apreciar los comportamientos ondulatorios predichos por las ecuaciones de Maxwell para los campos. La situación sería análoga a la de un fluido que está compuesto de moléculas (corpúsculos) pero cuyo comportamiento macroscópico presenta propiedades ondulatorias (el sonido). Esta idea parece razonable puesto que un haz de radiación EM moderadamente intenso está formado por miles de billones

de fotones, como acabamos de ver en el ejemplo anterior. Sin embargo, un punto débil de este argumento es que contradice la observación experimental de que los patrones de interferencia no dependen de la intensidad, es decir, del número de fotones que forman el haz: *los fenómenos ondulatorios de la radiación EM no desaparecen si la intensidad de la radiación (esto es, la densidad media de fotones) es muy pequeña*. De hecho se pueden observar fenómenos de interferencia con haces formados por muy pocos fotones, experimentos que ya eran posibles a principios del siglo XX. Cabría entonces concluir que la radiación posee una “naturaleza” dual, ondulatoria y corpuscular, y que la manifestación de una o de la otra depende de las circunstancias.

Esta última afirmación es muy vaga y debemos matizarla. Imaginemos un dispositivo de doble rendija de Young sobre el que incide una radiación electromagnética tan poco intensa que la interacción entre los fotones y el dispositivo se hace *fotón a fotón*. Tras atravesar alguna de las rendijas, cada fotón choca contra una pantalla en la que podemos observar *impactos individuales*. Al principio dichos impactos parecen distribuirse al azar pero si esperamos suficiente tiempo (y hay experimentos que permiten extender la recolección de datos durante días) veremos que la distribución de impactos responde exactamente a lo que cabría esperarse del tratamiento ondulatorio de la radiación. Por tanto, *el campo EM en un punto no está relacionado con la densidad real de fotones sino más bien con la probabilidad de encontrar un fotón en el mencionado punto*. Así, la observación de fenómenos de interferencia se infiere como resultado de las medidas de las posiciones del fotón y es la mencionada probabilidad (descrita por una función espacio-temporal) la que es susceptible de tener un comportamiento ondulatorio. El fotón es una partícula (como así prueban el choque contra la pantalla del experimento de Young o el efecto fotoeléctrico) pero *la probabilidad de detectar al fotón en un punto de la pantalla obedece ecuaciones típicamente ondulatorias*. Por tanto, y tal como afirmó muy agudamente P. A. M. Dirac, los fotones no interfieren entre sí sino que un fotón *interfiere consigo mismo*.

Esta *interpretación probabilística* concilia la evidencia experimental y la naturaleza corpuscular de la radiación EM. Sin embargo, el precio que hemos de pagar es enorme, ya que sólo es posible explicar los hechos experimentales de forma consistente usando una *probabilidad de ocurrencia* como elemento central de la teoría. Como veremos en el siguiente capítulo, los haces de partículas materiales *también exhiben comportamientos ondulatorios* y la anterior conclusión es extensible a cualquier partícula. Esta es la esencia de la física cuántica, en la que *los sistemas no se caracterizan por los valores que toman las magnitudes*

físicas sino por las probabilidades de que se obtengan tales valores en una medida experimental.

§ 2. Lo que acabamos de decir es capital para entender qué ocurre en una onda EM libre arbitraria. Ya sabemos que todo haz radiativo libre es igual a la superposición de ondas planas, cada una de ellas caracterizada por un vector de onda \mathbf{k} y un potencial vector $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k})$. La función densidad de energía $\varepsilon_{\text{EM}}(\mathbf{k})$ definida en el epígrafe §1.4.3 sugiere que la onda EM está formada por fotones con diferentes momentos lineales y energías. En efecto, si definimos la distribución

$$n_\gamma(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar\omega_k} \varepsilon_{\text{EM}}(\mathbf{k}) = \frac{\epsilon_0 \omega_k}{2\hbar} |\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k})|^2 \quad (2.4)$$

es inmediato comprobar que la energía y el momento totales de la onda EM son

$$U_{\text{EM}} = \int_{\mathbb{R}^3} \hbar\omega_k n_\gamma(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k} \quad \mathbf{P}_{\text{EM}} = \int_{\mathbb{R}^3} \hbar\mathbf{k} n_\gamma(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k} \quad (2.5)$$

por lo que $n_\gamma(\mathbf{k})d^3\mathbf{k}$ podría entenderse como el número de fotones del pulso EM cuyo vector de onda toma un valor dentro de un entorno de volumen $d^3\mathbf{k}$ alrededor de \mathbf{k} . De acuerdo con esto el número total de fotones que forman la onda EM será

$$N_\gamma = \int_{\mathbb{R}^3} n_\gamma(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k}. \quad (2.6)$$

Esta *interpretación estadística* es impecable desde un razonamiento clásico: cada fotón tiene un momento lineal con un valor definido y explica sin problema las propiedades energéticas de la onda EM en su conjunto. Sin embargo *no se sostiene* si nos fijamos en las propiedades locales de la radiación. En efecto, la densidad media de energía de una onda plana de vector de onda \mathbf{k} es uniforme: la *probabilidad* de encontrar un fotón es la misma en todos los puntos del espacio. Admitiendo que todos los fotones de la onda plana están en el mismo estado dinámico debemos concluir que *dicha equiprobabilidad es una propiedad del fotón con momento $\mathbf{p}_\gamma = \hbar\mathbf{k}$* . Como consecuencia, si considerásemos que un pulso no monocromático está formado por una *mezcla* de fotones con diferentes momentos \mathbf{p}_γ , la probabilidad de detectar uno cualquiera de ellos sería la misma en todos los puntos del espacio. Esto obviamente contradice el hecho de que un pulso EM está concentrado en una zona finita del espacio.

A la vista de lo anterior es más adecuado pensar que el pulso está formado por N_γ fotones *en un mismo estado dinámico* pero que, a diferencia de los estados de

los fotones de una onda plana, se caracterizan porque su momento lineal no está bien definido. Si se midiese el momento lineal de un fotón, la cantidad

$$d\Pr(\hbar\mathbf{k}) \equiv \frac{1}{N_\gamma} n_\gamma(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k} = \frac{1}{N_\gamma} \frac{\epsilon_0 \omega_k}{2\hbar} |\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k})|^2 d^3\mathbf{k} \quad (2.7)$$

sería la *probabilidad* de encontrar un valor en un entorno de volumen recíproco $\hbar^3 d^3\mathbf{k}$ alrededor de $\hbar\mathbf{k}$.³ Esto es, la función $n_\gamma(\mathbf{k})$ no debe interpretarse como una *distribución estadística de valores bien definidos* (sobre los que se hacen cálculos estadísticos) sino como una *distribución continua de probabilidad*.

Esto puede parecer una discusión meramente semántica, pero es esencial que se percate de las profundas implicaciones que hay al escoger una interpretación probabilística en lugar de una estadística. El valor del momento lineal de una partícula “clásica” es siempre una cantidad bien definida dentro de unos pequeños márgenes de error que son consecuencia del carácter continuo de cada una de las tres componentes de \mathbf{p} . Sin embargo ahora estamos diciendo que hay estados físicos del fotón que exhiben una indeterminación *intrínseca* de su momento lineal o, en otras palabras, que tan válidos son estados dinámicos del fotón en los que su momento lineal está prácticamente bien definido como otros en los que no.

Note la estrecha relación entre esta última afirmación y el hecho comentado en el epígrafe anterior sobre la imposibilidad de predecir dónde va a impactar un fotón contra una pantalla en un dispositivo interferométrico. En un experimento de Young todos los fotones incidentes tienen un momento lineal prácticamente bien definido, pero aquellos que hayan atravesado las rendijas estarán en un estado dinámico distinto en el que su momento ya no tomará un valor bien definido, y esto es lo que en última instancia explica la dispersión de impactos contra la pantalla.

§ 3. Como ilustración de lo que acabamos de decir, consideremos dos ondas planas que son prácticamente monocromáticas (con igual frecuencia pero diferentes vectores de onda), cuyos potenciales vectores complejos son $\mathbf{A}_1(\mathbf{r}, t) \simeq \mathbf{A}_{0,1} \exp[i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r} - \omega t)]$ y $\mathbf{A}_2(\mathbf{r}, t) \simeq \mathbf{A}_{0,2} \exp[i(\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r} - \omega t)]$. En la *superposición coherente* de las dos ondas EM tendremos que el potencial vector es

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_1(\mathbf{r}, t) + \mathbf{A}_2(\mathbf{r}, t) = \left(\mathbf{A}_{0,1} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}} + \mathbf{A}_{0,2} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}} \right) e^{-i\omega t}$$

³ Note que los vectores de onda permitidos \mathbf{k} están dados por la ecuación en (2.10), de manera que cada valor de \mathbf{k} “ocupa” un volumen π^3/\mathcal{V} del espacio recíproco (espacio de vectores de onda) en el octante $k_{x,y,z} \geq 0$.

y que la densidad media de energía (cfr. el epígrafe §1.5.2) es

$$u_{\text{EM}}^{(\text{coh})}(\mathbf{r}) = \frac{\epsilon_0 \omega^2}{2} \left[|\mathbf{A}_{0,1}|^2 + |\mathbf{A}_{0,2}|^2 + 2\Re e \left(\mathbf{A}_{0,1} \cdot \mathbf{A}_{0,2}^* e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{r}} \right) \right].$$

Llevando hasta el extremo la correspondencia entre propiedades medibles de la radiación y estado de los fotones que la constituyen, diremos que el estado de *cada fotón del sistema* es la *superposición de los estados* con momentos lineales $\hbar\mathbf{k}_1$ y $\hbar\mathbf{k}_2$. En este estado, las probabilidades de que al medir el momento lineal se obtengan los valores $\hbar\mathbf{k}_1$ y $\hbar\mathbf{k}_2$ serán proporcionales a $|\mathbf{A}_{0,1}|^2$ y $|\mathbf{A}_{0,2}|^2$, respectivamente, por lo que el valor de \mathbf{p}_γ no está bien definido. Decimos, como ya hemos comentado antes, que los fotones del sistema están en un estado dinámico con \mathbf{p}_γ no definido.

Por el contrario, la interpretación estadística es correcta en el caso en que consideremos una **mezcla incoherente** de los dos campos EM, ya que oscilan con una fase relativa impredecible y los efectos de interferencia son inapreciables. En este caso la densidad media de energía es

$$u_{\text{EM}}^{(\text{inc})}(\mathbf{r}) = \frac{\epsilon_0 \omega^2}{2} (|\mathbf{A}_{0,1}|^2 + |\mathbf{A}_{0,2}|^2).$$

Esta densidad, a diferencia de $u_{\text{EM}}^{(\text{coh})}(\mathbf{r})$, es completamente uniforme en el espacio. Esto es lo que caracteriza a un haz formado por fotones con momentos lineales bien definidos, por lo que la radiación está formada por una *mezcla de fotones*. En esta mezcla unos fotones están en un estado con momento lineal $\hbar\mathbf{k}_1$ y el resto en otro estado con momento lineal $\hbar\mathbf{k}_2$, siendo su número proporcional a $|\mathbf{A}_{0,1}|^2$ y $|\mathbf{A}_{0,2}|^2$, respectivamente.

Nótese que las radiaciones resultantes (y en consecuencia los estados de los fotones) son distintas en cada caso y observaríamos claros patrones de interferencia en la densidad de impactos de los fotones contra una pantalla para la superposición coherente, mientras que la densidad de impactos sería uniforme para la mezcla incoherente.

§ 4. Apenas hemos hablado de la posición del fotón, excepto para indicar que está completamente indeterminada para un fotón con momento lineal bien definido. No entraremos en más detalles puesto que no estamos en disposición de hacer un tratamiento cuántico completo de la radiación electromagnética. A pesar de esto es muy importante que se dé cuenta de una segunda peculiaridad de los fotones: mientras que en física clásica la descripción dinámica de una partícula exige definir su posición y su momento lineal, *en la física cuántica podemos*

caracterizar el estado dinámico de un fotón apelando únicamente a propiedades relacionadas con el momento lineal. Siendo sorprendente, esto resulta consistente con el hecho de una onda EM arbitraria queda únicamente caracterizada por su descomposición en ondas planas, cada una de ellas con un vector de onda \mathbf{k} que está asociado al momento lineal del fotón. Dicha descomposición determina entonces el potencial vector $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ y, por tanto, la densidad de energía $u_{\text{EM}}(\mathbf{r}, t)$ a partir de la cual podemos inferir cuál es la región del espacio en la que el pulso EM es apreciable para cualquier instante de tiempo, esto es, la región donde podríamos detectar fotones.

Ahora bien, una onda plana $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t)$ no queda únicamente determinada por el momento del fotón \mathbf{p}_γ y la densidad de fotones ρ_γ . A partir de estos datos podemos obtener $|\mathbf{A}_0|$ y \mathbf{k} , pero no la orientación de \mathbf{A}_0 , esto es, la *polarización* de la onda plana. Si admitimos como principio que *todas* las propiedades de la radiación se obtienen indistintamente a partir del campo EM o a partir de las propiedades dinámicas de los fotones que la constituyen, debemos contemplar otra propiedad física del fotón que guarde correspondencia directa con la polarización de la onda EM. Esta propiedad será un *momento angular intrínseco*, al que denominaremos *espín* del fotón, y que se estudiará en la asignatura *Física Cuántica II*. El estado de un fotón debe quedar pues definido por su momento lineal y su espín, aunque bajo la luz de la interpretación probabilística que hemos introducido en esta sección.

2.3. EL PROBLEMA DE LA CAVIDAD RADIANTE

§ 1. Una *cavidad radiante* es un recinto aislado del exterior, en cuyo seno únicamente hay radiación EM. Las paredes interiores de la cavidad son capaces de emitir y absorber radiación, pero una vez alcanzado el equilibrio termodinámico ya no hay intercambio neto de energía entre paredes y radiación. En ese sentido, las paredes son el instrumento necesario para que la radiación alcance el equilibrio termodinámico, momento en el cual se puede considerar que la radiación no es más que una superposición incoherente de ondas monocromáticas. Cada una ha de satisfacer las ecuaciones de Maxwell en el vacío

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \mathcal{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{0} \quad ; \quad \nabla \cdot \mathcal{A}(\mathbf{r}, t) = 0,$$

con la *condición de contorno* de que las componentes de $\mathcal{A}(\mathbf{r}, t)$ perpendiculares a las paredes de la cavidad se anulen en las mismas. Puesto que cada onda es

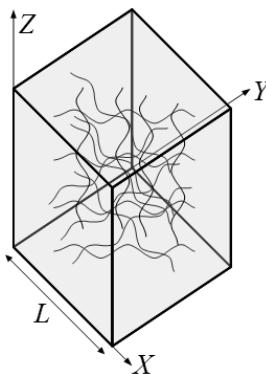


Figura 2-2. Geometría para el cálculo del campo EM en el seno de una cavidad radiante monocromática su potencial vector será

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \Re e (\mathbf{A}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}),$$

donde el vector $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ de componentes complejas obedece las ecuaciones

$$\nabla^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{A}(\mathbf{r}) ; \quad \nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.8)$$

con las mencionadas condiciones de contorno.

Para simplificar, consideremos que nuestra cavidad es un cubo de lado L , y situamos el origen de coordenadas en uno de sus vértices tal y como se puede apreciar en la **FIG. 2-2**. Como se puede comprobar por sustitución directa, una solución a (2.8) es

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}_0 \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z), \quad \text{con } \begin{cases} ck = \omega \\ \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_0 = 0 \end{cases} \quad (2.9)$$

donde $\mathbf{k} = k_x \mathbf{u}_x + k_y \mathbf{u}_y + k_z \mathbf{u}_z$ (con $k_{x,y,z} \geq 0$) es el vector de onda que define a este modo de radiación, $k \equiv |\mathbf{k}|$ y \mathbf{A}_0 un vector de componentes complejas que, debido a la condición de transversalidad del potencial vector, es perpendicular a \mathbf{k} . Las condiciones de contorno exigen que $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ se anule en las paredes de la cavidad, cuando una (o varias) de las coordenadas de la posición toman los valores 0 o L , lo que implica que las componentes de \mathbf{k} han de ser necesariamente como

$$k_x = \frac{\pi}{L} n_x , \quad k_y = \frac{\pi}{L} n_y , \quad k_z = \frac{\pi}{L} n_z ; \quad \text{con } n_{x,y,z} \in \mathbb{N} \quad (2.10)$$

Como \mathbf{A}_0 es perpendicular a \mathbf{k} , para cada valor permitido del vector de onda hay dos posibles orientaciones independientes del potencial vector, esto es, dos modos normales de radiación en la cavidad, de acuerdo con lo ya dicho en el epígrafe 2.2.2.⁴ Fíjese también que mientras para la radiación libre los modos normales son ondas planas viajeras, aquí son *ondas estacionarias* debido al confinamiento dentro de la cavidad.

§ 2. Puesto que la radiación es la superposición incoherente de modos normales independientes entre sí, se pueden aplicar las leyes de la mecánica estadística. Alcanzado el equilibrio a temperatura absoluta T , la probabilidad de que un modo radiativo escogido al azar tenga una energía en un intervalo $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$ está dada por la *distribución clásica de Maxwell-Boltzmann*

$$n^{\text{MB}}(\varepsilon, T) d\varepsilon = \frac{e^{-\varepsilon/(k_B T)}}{Z(T)} d\varepsilon \quad \text{siendo} \quad Z(T) = \int_0^\infty e^{-\varepsilon/(k_B T)} d\varepsilon \quad (2.11)$$

una constante de normalización llamada *función de partición* y donde $k_B \simeq 1,38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ es la llamada *constante de Boltzmann*. La energía media $\bar{\varepsilon}$ (clásica) de un modo normal de frecuencia $\omega_k = ck$ se expresa entonces en términos de la función de partición ya que, haciendo uso de la distribución $n^{\text{MB}}(\varepsilon, T)$, la podemos escribir como

$$\bar{\varepsilon}(\omega_k, T) = \frac{1}{Z(T)} \int_0^\infty \varepsilon e^{-\varepsilon/(k_B T)} d\varepsilon = -\frac{1}{Z(T)} \frac{\partial Z(T)}{\partial [(k_B T)^{-1}]}, \quad (2.12)$$

donde en el último paso hemos usado que

$$\varepsilon \exp\left(-\frac{\varepsilon}{k_B T}\right) = -\frac{\partial}{\partial [(k_B T)^{-1}]} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{k_B T}\right).$$

Efectuando la integral que aparece en (2.11) tenemos inmediatamente que $Z(T) = k_B T$ y, por tanto, que⁵

$$\bar{\varepsilon}(\omega_k, T) = k_B T.$$

⁴ Por ese motivo, hemos restringido las componentes de \mathbf{k} a valores positivos ya que, por ejemplo, cambiar k_x por $-k_x$ equivale a mantener el valor de k_x pero cambiar \mathbf{A}_0 por $-\mathbf{A}_0$.

⁵ Este resultado, conocido como *teorema de equipartición de Boltzmann*, es únicamente válido en el “límite termodinámico” en el que los sistemas son tan grandes que la estadística subyacente es perfectamente aplicable. En nuestro caso esto se traduce en que el volumen de la cavidad $\mathcal{V} = L^3$ ha de ser suficientemente grande.

La energía almacenada en el campo EM es entonces

$$U_{\text{EM}}(T) = 2 \sum_{\mathbf{k}} \bar{\varepsilon}(\omega_k, T),$$

donde la suma está extendida a todos los vectores \mathbf{k} de la forma (2.10) y el factor 2 procede de los dos grados de libertad asociados a la orientación del potencial vector. Como hay infinitos vectores de onda admisibles, y la energía media de cada modo es $k_B T$, se tiene inmediatamente que $U_{\text{EM}}(T) = \infty$, resultado que es absurdo y que indica que la mecánica estadística clásica no es aplicable a la radiación EM. Éste es el llamado *problema de la cavidad radiante*, el cual no es baladí ya que la mecánica estadística y el electromagnetismo de Maxwell son dos de los pilares de la física clásica.

§ 3. Para entender con más detalle qué ocurre vamos a hallar cómo se distribuye la energía entre los modos de radiación. Los vectores de onda \mathbf{k} están dados en (2.10) por lo que cada valor de \mathbf{k} “ocupa” un volumen π^3/\mathcal{V} del espacio recíproco (espacio de vectores de onda) en el octante $k_{x,y,z} \geq 0$. En el límite termodinámico ($\mathcal{V} \gg 0$) los valores permitidos de \mathbf{k} están tan juntos que podremos transformar cualquier sumatorio sobre \mathbf{k} en una integral sobre el octante $k_{x,y,z} \geq 0$ mediante la transformación

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{\mathcal{V}}{\pi^3} \int_{k_{x,y,z} \geq 0} d^3\mathbf{k}.$$

En concreto, la energía del campo EM por unidad de volumen es

$$\frac{U_{\text{EM}}(T)}{\mathcal{V}} = \frac{2}{\pi^3} \int_{k_{x,y,z} \geq 0} \bar{\varepsilon}(\omega_k, T) d^3\mathbf{k}.$$

Si expresamos la integral en coordenadas esféricas, y tenemos en cuenta que el área de un octante de una superficie esférica de radio k es $\pi k^2/2$,

$$\frac{U_{\text{EM}}(T)}{\mathcal{V}} = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty \bar{\varepsilon}(\omega_k, T) k^2 dk = \int_0^\infty \left[\frac{1}{\pi^2} \frac{\bar{\varepsilon}(\omega, T)}{c^3} \omega^2 \right] d\omega,$$

donde en el último paso hemos hecho el cambio de variable $k \rightarrow \omega = ck$. El término entre corchetes, conocido como *densidad espectral de energía*, una vez multiplicado por $d\omega$, es igual a la energía EM por unidad de volumen almacenada en modos cuya frecuencia está contenida en un intervalo de anchura $d\omega$ centrada en ω . Así, la densidad espectral de energía EM dentro de la cavidad radiante es

$$\rho_{\text{EM}}(\omega, T) = \frac{1}{\pi^2} \frac{\bar{\varepsilon}(\omega, T)}{c^3} \omega^2 \quad \text{y} \quad \frac{U_{\text{EM}}(T)}{\mathcal{V}} = \int_0^\infty \rho_{\text{EM}}(\omega, T) d\omega. \quad (2.13)$$

Usando el teorema de equipartición para $\bar{\varepsilon}$ llegamos a que

$$\rho_{\text{EM}}(\omega, T) = \frac{1}{\pi^2} \frac{k_{\text{B}}T}{c^3} \omega^2 \quad (\text{clásico}). \quad (2.14)$$

Esta expresión, deducida por Lord Rayleigh a finales del siglo XIX, muestra claramente que el problema es que la densidad espectral $\rho_{\text{EM}}(\omega, T)$ crece indefinidamente al hacerlo el valor de ω

Si nos tomásemos en serio el resultado clásico habría dos consecuencias. La primera es que la radiación EM de la cavidad radiante nunca puede alcanzar el equilibrio puesto que necesitaría absorber energía de manera continua para “alimentar” los modos radiativos de alta frecuencia. Sin embargo la tendencia al equilibrio es una característica natural de la termodinámica de los sistemas, lo que da lugar a la segunda consecuencia. Imaginemos que en un recinto cerrado hay radiación que está inicialmente en el rango del visible. El sistema espontáneamente evolucionará hacia el equilibrio para lo cual se iniciaría un proceso de intercambio de energía entre la radiación y las paredes del recinto que favorece la aparición de modos de alta frecuencia empezando por el ultravioleta, siguiendo por el ultravioleta lejano, rayos X, etc. Si transcurrido algo de tiempo se practicase un orificio en la pared de la cavidad, saldría un haz de radiación en el rango de altas frecuencias. Huelga decir que este fenómeno, denominado de manera bastante dramática como *catástrofe del ultravioleta*, jamás se ha observado.

§ 4. Para el tratamiento correcto del problema de la cavidad radiante debemos incorporar la naturaleza corpuscular de la radiación electromagnética, algo que evidentemente no se hace en la derivación de Rayleigh de la densidad espectral de energía. En efecto, de acuerdo con la hipótesis de Einstein, cada modo normal de frecuencia $\omega = ck$ está formado por un número entero de fotones con energía $\hbar\omega$. Por tanto, la energía que aparece en la distribución de Maxwell-Boltzmann (2.11) está *cuantizada*, pudiendo únicamente tomar los valores

$$\varepsilon_n = n\hbar\omega \quad \text{con} \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

La función de partición (2.11) no es entonces una integral sobre los valores de la energía, sino la suma de la exponencial $\exp[-\varepsilon_n/(k_{\text{B}}T)]$ sobre los valores permitidos para la energía. Esto lleva a que $Z(T)$ dependa de la frecuencia ω del modo que estamos considerando:

$$Z_{\omega}(T) = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{\varepsilon_n}{k_{\text{B}}T}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{n\hbar\omega}{k_{\text{B}}T}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_{\text{B}}T}\right)\right]^n.$$

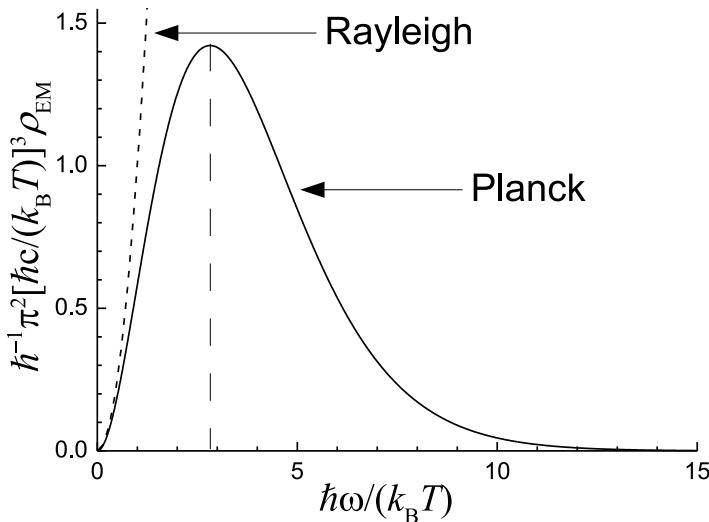


Figura 2-3. La densidad espectral de energía clásica (Rayleigh) y cuántica (Planck) para una cavidad radiante en equilibrio térmico a temperatura T .

El sumatorio es igual a la suma de todos los términos de una progresión geométrica de razón $\exp[-\hbar\omega/(k_BT)]$. Entonces, $Z_\omega(T) = 1 / (1 - \exp(-\hbar\omega/k_BT))$ y la energía media del modo de radiación es

$$\bar{\varepsilon}(\omega, T) = -\frac{1}{Z_\omega(T)} \frac{\partial Z_\omega(T)}{\partial[(k_BT)^{-1}]} = \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right) - 1}. \quad (2.15)$$

Para frecuencias pequeñas, en el sentido $\omega \ll k_BT/\hbar$, recuperamos el teorema de equipartición clásico $\bar{\varepsilon}(\omega, T) = k_BT$. Pero ahora las energías medias de los modos de alta frecuencia decaen a cero.

Si sustituimos (2.15) en (2.13) tenemos inmediatamente que la densidad espectral de energía de la cavidad radiante es

$$\rho_{EM}(\omega, T) = \frac{1}{\pi^2 \hbar^2 c^3} \frac{(\hbar\omega)^3}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right) - 1} \quad (\text{cuántico.}) \quad (2.16)$$

Esta función tiende a cero rápidamente para frecuencias altas y ya no exhibe los problemas del resultado clásico de Rayleigh dado por la ecuación (2.14), resultado sólo válido para frecuencias pequeñas (vea la FIG. 2-3). Este resultado

2.3. EL PROBLEMA DE LA CAVIDAD RADIANTE

fue presentado por Max Planck en una reunión de la Academia de Berlín el 14 de diciembre de 1900, fecha que se toma convencionalmente como la del nacimiento de la física cuántica, aunque hemos de mencionar que la deducción original de Planck fue muy diferente a la aquí presentada.⁶

⁶ **Max Planck** (1858-1947) fue uno de los físicos teóricos más prominentes de su época (Premio Nobel en 1918) y, además, eficiente gestor. La actual institución de investigación científica alemana *Instituto Max Planck* lleva su nombre puesto que fue director durante los años treinta del siglo pasado de la sociedad equivalente, cuya denominación oficial entonces era Kaiser-Wilhelm-Gesellschaft.

EJEMPLO 2.b. Las leyes de Stefan y de Wien

Consideremos una cavidad radiante en equilibrio térmico a temperatura T .

- Halle la energía de la cavidad por unidad de volumen.
- Si ω_{\max} es la frecuencia para la cual $\rho_{\text{EM}}(\omega, T)$ alcanza su máximo, ¿cómo depende ω_{\max} de la temperatura?.

Ayuda: $\int_0^{+\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$

Solución:

a) A partir del resultado de Planck (2.16), la energía electromagnética por unidad de volumen en la cavidad a temperatura T es

$$\frac{U_{\text{EM}}(T)}{V} = \int_0^{+\infty} \rho_{\text{EM}}(\omega, T) d\omega = \frac{(k_B T)^3}{\pi^2 \hbar^2 c^3} \int_0^{+\infty} \frac{[\hbar\omega/(k_B T)]^3}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1} d\omega.$$

Haciendo el cambio $\omega \rightarrow x = \hbar\omega/(k_B T)$ y usando la ayuda

$$\frac{U_{\text{EM}}(T)}{V} = \frac{(k_B T)^4}{\pi^2 \hbar^3 c^3} \int_0^{+\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^2 k_B^4}{15 \hbar^3 c^3} T^4 \equiv \sigma_{\text{St}} T^4 \quad (2.17)$$

con $\sigma_{\text{St}} \simeq 7,5 \times 10^{-16} \text{ J m}^{-3} \text{K}^{-4}$. La energía EM por unidad de volumen es así proporcional a la cuarta potencia de la temperatura, relación conocida como ley de Stefan. Es interesante comentar que la ley de Stefan se puede deducir mediante argumentos termodinámicos muy generales sin necesidad de utilizar la distribución estadística de Maxwell-Boltzmann, véase el **problema propuesto 2.6**).

b) Para hallar ω_{\max} basta derivar $\rho_{\text{EM}}(\omega, T)$ respecto de ω , $\partial \rho_{\text{EM}}(\omega, T) / \partial \omega|_{\omega=\omega_{\max}} = 0$, e igualar a cero para obtener:

$$\frac{1}{1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega_{\max}}{k_B T}\right)} \left(\frac{\hbar\omega_{\max}}{k_B T}\right) = 3 \quad \Rightarrow \quad \omega_{\max} = \frac{k_B T}{\hbar} \zeta \quad \text{con} \quad \frac{\zeta}{1 - e^{-\zeta}} = 3. \quad (2.18)$$

Vemos que ω_{\max} es proporcional a la temperatura absoluta de la cavidad. Esta es la denominada ley del desplazamiento de Wien. La ecuación trascendente que nos proporciona el valor de la constante adimensional ζ se puede resolver numéricamente, dando como resultado $\zeta \simeq 2,821$ (por ejemplo, represente las funciones $\zeta/3$ y $1 - e^{-\zeta}$ y la abcisa del punto de intersección nos dará la solución a tal ecuación).

2.4. EL EFECTO COMPTON

§ 1. En el tratamiento clásico de la *interacción radiación–materia* se parte de una aproximación inicial de “grano grueso” en la que la primera se describe mediante el campo EM y la segunda a través de distribuciones de carga y corriente. Es evidente que tal aproximación no es adecuada si deseamos estudiar esta interacción a escala microscópica. En su lugar, deberemos analizar este problema abordándolo directamente como una interacción entre fotones y partículas elementales materiales.

El primer escollo con el que nos encontramos es que, al igual que el electromagnetismo maxwelliano deja de ser estrictamente válido a escala microscópica, la mecánica clásica tampoco es correcta. Ésta debe ser sustituida por una *mecánica cuántica*, que empezaremos a estudiar en el capítulo siguiente. El segundo es que desconocemos cómo tratar la propia interacción entre un fotón y una partícula material.

La denominada *electrodinámica cuántica* es la herramienta que debe utilizarse para estudiar este tipo de fenómenos. A este nivel de la teoría, tanto los fotones como las partículas materiales son tratados cuánticamente. La interacción electromagnética entre partículas elementales se plantea como una transferencia de momento mediada por fotones que, por otra parte, pueden ser creados y destruidos. Finalmente, a energías suficientemente altas, las propias partículas materiales también se pueden crear o destruir.

Esto nos da una pista de la dificultad del tratamiento mecanocuántico completo de la interacción radiación-materia. Afortunadamente, en muchas ocasiones bastará con realizar un análisis aproximado para obtener resultados con capacidad predictiva e interpretativa.

Por ejemplo, en la gran mayoría de los problemas de interés que trataremos a lo largo de este libro abordaremos la dinámica de las partículas materiales mediante las leyes de la mecánica cuántica. Sin embargo, despreciaremos los aspectos cuánticos del acoplamiento de la materia con el campo EM, considerando que éste actúa clásicamente sobre las partículas.

En otros casos se considera que tanto el fotón como las partículas materiales obedecen las leyes de la mecánica clásica relativista. Las interacciones se tratarán como colisiones entre partículas, procesos en los que ha de conservarse el momento lineal y la energía, pero sin entrar en detalles sobre los mecanismos de interacción. Es justamente esta última aproximación la que vamos a seguir en esta sección y la siguiente.

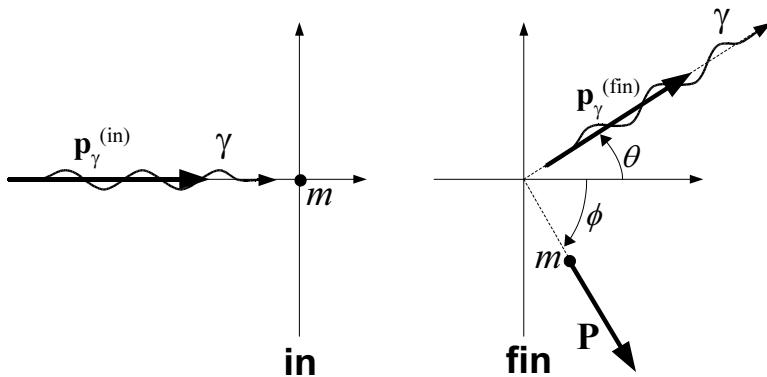


Figura 2-4. Esquema de la dispersión Compton

§ 2. Pensemos en una situación bastante sencilla: sobre una partícula material en reposo de masa M y carga q incide una onda monocromática de vector de onda \mathbf{k}_{in} . Si tratamos clásicamente la radiación, y si no hay fuerzas de ligadura actuando sobre la partícula, la radiación incidente se dispersa o esparce sin producirse cambio alguno en su frecuencia.⁷ Este es el llamado régimen de *esparcimiento de Thomson*, cuya descripción puede encontrarse en cualquiera de los textos de electromagnetismo clásico que citamos en la bibliografía.

Sin embargo los resultados van a ser muy diferentes si admitimos que la onda electromagnética plana equivale a un haz de fotones con momento lineal

$$\mathbf{p}_\gamma^{(\text{in})} = \hbar \mathbf{k}_{\text{in}}.$$

Entonces la interacción entre el campo electromagnético y la partícula libre puede verse como un choque elástico entre ésta y un fotón γ , tras el cual el segundo ha cedido parte de su energía y de su momento lineal a la partícula. Como la partícula estaba inicialmente en reposo, terminará adquiriendo un cierto momento lineal \mathbf{P} y una energía cinética K . Imponiendo la conservación de la energía y el momento lineal tendremos que

$$\begin{aligned} K &= E_\gamma^{(\text{in})} - E_\gamma^{(\text{fin})} = c \left(|\mathbf{p}_\gamma^{(\text{in})}| - |\mathbf{p}_\gamma^{(\text{fin})}| \right) \\ \mathbf{P} &= \mathbf{p}_\gamma^{(\text{in})} - \mathbf{p}_\gamma^{(\text{fin})}, \end{aligned} \tag{2.19}$$

⁷ Es la “colisión elástica” a la que hacíamos referencia en la sección 1.6.

donde el subíndice γ nos dice que nos referimos al fotón y los (in, fin) indican los valores inicial y final para el fotón. Ahora bien, por dinámica relativista elemental, K y \mathbf{P} están relacionados mediante la igualdad

$$c^2|\mathbf{P}|^2 + (Mc^2)^2 = (Mc^2 + K)^2.$$

Sustituyendo en ésta las ecuaciones de conservación (2.19) llegamos a la siguiente relación entre los momentos lineales inicial y final del fotón:

$$c^2|\mathbf{p}_\gamma^{(\text{in})} - \mathbf{p}_\gamma^{(\text{fin})}|^2 + (Mc^2)^2 = \left(Mc^2 + c|\mathbf{p}_\gamma^{(\text{in})}| - c|\mathbf{p}_\gamma^{(\text{fin})}| \right)^2.$$

Si ahora desarrollamos los cuadrados de la anterior igualdad y simplificamos, obtenemos que

$$\frac{\mathbf{p}_\gamma^{(\text{in})} \cdot \mathbf{p}_\gamma^{(\text{fin})}}{|\mathbf{p}_\gamma^{(\text{in})}| |\mathbf{p}_\gamma^{(\text{fin})}|} = 1 - Mc \left(\frac{1}{|\mathbf{p}_\gamma^{(\text{fin})}|} - \frac{1}{|\mathbf{p}_\gamma^{(\text{in})}|} \right)$$

El primer miembro es el coseno del ángulo θ que forman las direcciones del fotón incidente y del fotón dispersado (vea la **FIG. 2-4**), por lo que

$$\cos \theta = 1 - Mc \left(\frac{1}{|\mathbf{p}_\gamma^{(\text{fin})}|} - \frac{1}{|\mathbf{p}_\gamma^{(\text{in})}|} \right) = 1 - \frac{Mc}{2\pi\hbar} (\lambda_{\text{fin}} - \lambda_{\text{in}}),$$

donde hemos introducido las longitudes de onda del fotón antes y después de la colisión usando la relación (2.2). En definitiva,

$$\lambda_{\text{fin}} - \lambda_{\text{in}} = \frac{2\pi\hbar}{Mc} (1 - \cos \theta) \equiv \lambda_C (1 - \cos \theta)$$

(2.20)

siendo

$$\lambda_C = \frac{2\pi\hbar}{Mc} = \frac{h}{Mc}$$

(2.21)

la denominada *longitud de onda Compton* de la partícula material.

La relación (2.20) nos dice que el esparcimiento de radiación monocromática por partículas materiales implica una cierta disminución de su longitud de onda, disminución que depende del ángulo de dispersión. Este fenómeno fue observado experimentalmente por primera vez por Arthur Holly Compton en 1922 y recibe en su honor el nombre de *efecto Compton*. En concreto, Compton hizo incidir un haz de rayos X (cuya longitud de onda es del orden de Å) sobre un blanco de grafito

de manera que su esparcimiento se producía tras choques de los fotones contra los núcleos de carbono, pero también contra los electrones libres del material. Para los primeros la longitud de onda Compton (2.21) es

$$\lambda_C^{(\text{nuc})} \simeq \frac{h}{12m_p c} \simeq \frac{6,63 \times 10^{-34}}{12 \cdot 1,67 \times 10^{-27} \cdot 3 \times 10^8} \text{ m} \simeq 1,1 \times 10^{-6} \text{ Å}$$

(hemos tenido en cuenta que el núcleo de carbono típico está formado por seis protones y seis neutrones, cuya masa es muy similar). Sin embargo, la longitud de onda Compton del electrón es

$$\lambda_C^{(e)} \simeq \frac{h}{m_e c} \simeq \frac{6,63 \times 10^{-34}}{9,11 \times 10^{-31} \cdot 3 \times 10^8} \text{ m} \simeq 0,0243 \text{ Å}. \quad (2.22)$$

De esta manera, los fotones dispersados por los núcleos atómicos sufren una variación imperceptible de su longitud de onda (de una parte entre un millón, aproximadamente) pero los fotones dispersados por los electrones aumentan su longitud de onda apreciablemente (del orden de una parte entre cien). De hecho, para cada ángulo de dispersión θ Compton detectó radiación con dos longitudes de onda bastante bien definidas: una igual a λ_{in} y otra con una longitud de onda desplazada una cantidad $\lambda_C^{(e)}(1 - \cos \theta)$.

Si a partir de ahora denotamos por λ_C a la longitud de onda Compton del electrón, acabamos de ver que para que se produzca un cambio apreciable en la longitud de onda de un fotón tras impactar contra un electrón es necesario que dicha longitud de onda no sea mucho mayor que λ_C , lo que restringe la observación del efecto Compton a fotones en el rango de los rayos X. En caso contrario el fotón se desviaría pero no cambiaría su longitud de onda, tal y como ocurre en el esparcimiento clásico de la radiación por una partícula material. Puesto que estamos admitiendo que el electrón es libre, la dispersión Compton se reduce al régimen de Thomson cuando $\lambda_{\text{in}} \gg \lambda_C$. El cambio relativo en la longitud de onda del fotón es entonces (choque elástico) $\Delta\lambda/\lambda_{\text{in}} \simeq 0$, lo que implica que en la escala natural del problema $h \simeq 0$ y puede afirmarse entonces que *el esparcimiento Thomson (sin cambio en la frecuencia del fotón) es el límite clásico (no cuántico) de la dispersión Compton*.

§ 3. Nuestro análisis del efecto Compton no es predictivo en el sentido de que el conocimiento de la longitud de onda inicial del fotón no nos anticipa cuál será su ángulo de dispersión θ : hay infinitos estados finales posibles, todos con la misma energía y momento lineal que el inicial. Lo que sí es cierto es que si conocemos la longitud de onda inicial del fotón y su ángulo de dispersión θ podemos evaluar su longitud de onda final, y también la energía cinética y el momento lineal

de la partícula, usando para ello las relaciones de conservación (2.19). Sólo la electrodinámica cuántica nos permitiría obtener la *probabilidad* de que el fotón se disperse un ángulo θ (en rigor la distribución de probabilidad ya que θ es una variable continua), pero este tratamiento va mucho más allá de los objetivos del presente libro.

EJEMPLO 2.c. Detalles adicionales del efecto Compton

En el experimento de Compton se usaron fotones con una longitud de onda $\lambda_{\text{in}} = 0,72 \text{ \AA}$.

- Represente en función del ángulo de dispersión θ la longitud de onda final de los fotones dispersados por electrones libres.
- Obtenga, en función de θ y de λ_{in} la energía cinética final y el ángulo de dispersión ϕ de los electrones.

Solución:

- Usando la ecuación central del efecto Compton (2.20) tenemos que

$$\lambda_{\text{fin}} = \lambda_{\text{in}} + \lambda_C(1 - \cos \theta) = [0,72 + 0,024(1 - \cos \theta)] \text{ \AA},$$

que está representada en el panel izquierdo de la FIG. 2-5. Observe que para $\theta = \pi$, que es cuando el fotón “rebota” contra el electrón, la variación de su longitud de onda es máxima alcanzando el valor $\lambda_{\text{fin}} = \lambda_{\text{in}} + 2\lambda_C = 0,768 \text{ \AA}$.

- A partir de la conservación de la energía vemos que

$$K = E_{\gamma}^{(\text{in})} - E_{\gamma}^{(\text{fin})} = \frac{hc}{\lambda_{\text{in}}} - \frac{hc}{\lambda_{\text{fin}}} = \frac{hc}{\lambda_{\text{in}}} - \frac{hc}{\lambda_{\text{in}} + \lambda_C(1 - \cos \theta)}.$$

Conviene reescribir un poco el resultado anterior usando que $\lambda_C = h/(m_e c)$, donde m_e es la masa en reposo del electrón:

$$K = m_e c^2 \left[\frac{\lambda_C}{\lambda_{\text{in}}} - \frac{\lambda_C}{\lambda_{\text{in}} + \lambda_C(1 - \cos \theta)} \right] = m_e c^2 \left[\frac{1}{\lambda_{\text{in}}/\lambda_C} - \frac{1}{\lambda_{\text{in}}/\lambda_C + 1 - \cos \theta} \right]$$

y como $\lambda_{\text{in}}/\lambda_C = 30$ y $m_e c^2 \simeq 0,511 \text{ MeV} = 511 \text{ KeV}$, nos queda

$$K \simeq 511 \times \left[\frac{1}{30} - \frac{1}{31 - \cos \theta} \right] \text{ KeV}$$

resultado que representamos en el panel derecho de la FIG. 2-5. Observe que la energía cinética de los electrones es del orden de 1000 eV, mucho mayor que la energía de ligadura típica de los mismos (del orden de 1 eV). Por tanto, los electrones escaparán del material sobre el que han impactado los fotones y, además, este resultado confirma a posteriori el haber considerado al electrón como una partícula libre en el análisis teórico del efecto Compton.

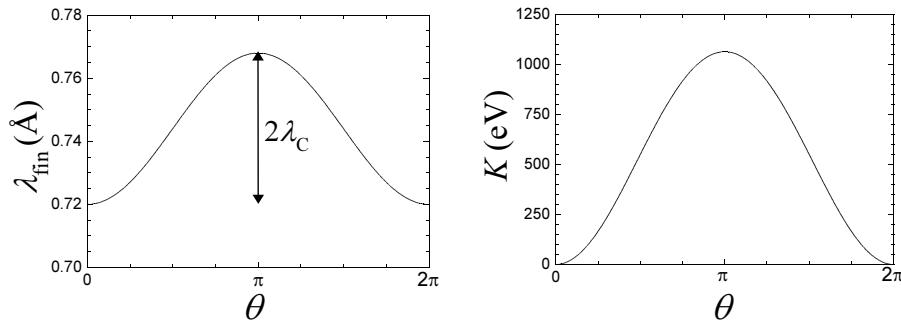


Figura 2-5. Longitud de onda del fotón dispersado (izquierda) y energía cinética del electrón (derecha) en función del ángulo de dispersión θ del fotón en un efecto Compton

Consideremos que la dispersión representada en la FIG. 2-4 se produce en el plano XY y sea OX la dirección del fotón incidente. Imponiendo la conservación del momento lineal componente a componente tenemos que

$$\left. \begin{aligned} |\mathbf{p}_\gamma^{(\text{in})}| &= |\mathbf{p}_\gamma^{(\text{fin})}| \cos \theta + |\mathbf{P}| \cos \phi \\ 0 &= |\mathbf{p}_\gamma^{(\text{fin})}| \sin \theta - |\mathbf{P}| \sin \phi \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left. \begin{aligned} |\mathbf{p}_\gamma^{(\text{in})}| - |\mathbf{p}_\gamma^{(\text{fin})}| \cos \theta &= |\mathbf{P}| \cos \phi \\ |\mathbf{p}_\gamma^{(\text{fin})}| \sin \theta &= |\mathbf{P}| \sin \phi \end{aligned} \right\}$$

y si ahora dividimos miembro a miembro

$$\tan \phi = \frac{|\mathbf{p}_\gamma^{(\text{fin})}| \sin \theta}{|\mathbf{p}_\gamma^{(\text{in})}| - |\mathbf{p}_\gamma^{(\text{fin})}| \cos \theta} = \frac{\lambda_{\text{fin}}^{-1} \sin \theta}{\lambda_{\text{in}}^{-1} - \lambda_{\text{fin}}^{-1} \cos \theta} = \frac{\lambda_{\text{in}} \sin \theta}{\lambda_{\text{fin}} - \lambda_{\text{in}} \cos \theta}$$

Usando (2.20) nos queda que

$$\tan \phi = \frac{\lambda_{\text{in}}}{\lambda_{\text{C}} + \lambda_{\text{in}}} \frac{\sin \theta}{1 - \cos \theta}$$

y utilizando la relación trigonométrica $\sin \theta / (1 - \cos \theta) = \cot(\theta/2)$,

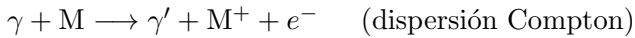
$$\tan \phi = \frac{\lambda_{\text{in}}}{\lambda_{\text{C}} + \lambda_{\text{in}}} \cot \frac{\theta}{2}.$$

Ya sólo falta despejar el ángulo ϕ para llegar a

$$\phi = \arctan \left(\frac{\lambda_{\text{in}}}{\lambda_{\text{C}} + \lambda_{\text{in}}} \cot \frac{\theta}{2} \right) \quad (2.23)$$

que es la relación que se pedía.

§ 4. Cerremos esta sección con un comentario. Es evidente que hay ciertas similitudes entre los efectos Compton y fotoeléctrico ya que en ambos casos se produce la emisión de electrones como resultado del impacto de fotones contra un material. Sin embargo las diferencias son muy importantes, empezando por el hecho de que en el efecto Compton el fotón es dispersado mientras que en el fotoeléctrico es absorbido, desapareciendo y cediendo toda su energía al electrón. Además, en el efecto Compton la energía cinética del electrón después de la colisión es muy grande en comparación con la energía de ligadura al material, mientras que en el efecto fotoeléctrico ambas son del mismo orden de magnitud. Esto último es fundamental ya que no podemos tratar al electrón del efecto fotoeléctrico como una partícula libre. Específicamente, las reacciones que tienen lugar en estos dos experimentos serán



donde M y M^+ designan genéricamente al material antes y después de perder el electrón.

Como ya hemos visto, en el efecto Compton es irrelevante el que el electrón esté inicialmente ligado al material, pero el papel que juega éste es esencial en el fotoeléctrico. En efecto, ya que el fotón cede *toda* su energía al electrón, la energía cinética de este último será $K = \hbar\omega - W$, donde ω es la frecuencia del fotón incidente y W la energía de ligadura del electrón al metal. Como K es típicamente mucho menor que la energía en reposo del electrón $m_e c^2$, su momento lineal será

$$\mathbf{P} = \sqrt{2m_e K} \mathbf{u} = \sqrt{2m_e (\hbar\omega - W)} \mathbf{u} = \sqrt{2m_e (cp_\gamma - W)} \mathbf{u},$$

siendo p_γ el módulo del momento del fotón incidente y \mathbf{u} el vector unitario que indica la dirección en la que sale emitido el electrón. Por tanto, la relación entre el momento lineal final del electrón, \mathbf{P} , y el inicial del fotón, \mathbf{p}_γ , es sustancialmente diferente en un proceso de fotoemisión que en uno de dispersión Compton. En la colección de problemas propondremos un análisis algo más detallado.

2.5. FOTONES Y PRESIÓN DE RADIACIÓN

§ 1. En las secciones anteriores hemos visto que la naturaleza corpuscular de la radiación es necesaria para explicar fenómenos simples de interacción luz-materia (como los efectos fotoeléctrico y Compton), y también para el correcto tratamiento

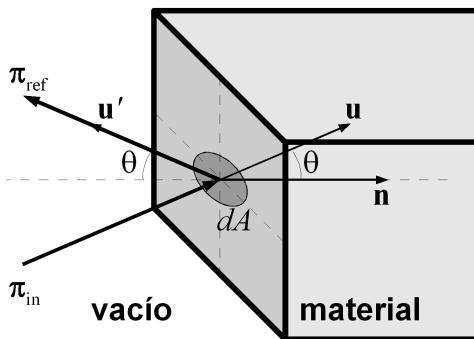


Figura 2-6. Esquema de la reflexión de una onda sobre la superficie de un metal perfectamente reflectante

estadístico de la radiación. Analicemos ahora un fenómeno cuya explicación no exige acudir al fotón pero que mostrará la consistencia entre los resultados clásicos de Maxwell y los cuánticos de Einstein.

Consideremos una pequeña porción de la superficie de un material situada en un punto genérico \mathbf{r} , de área dA y siendo \mathbf{n} el vector unitario perpendicular a la superficie (véase la FIG. 2-6). Sobre el material incide radiación libre monocromática tal que $\boldsymbol{\pi}_{\text{in}} = |\boldsymbol{\pi}_{\text{in}}| \mathbf{u}$ es su densidad efectiva de momento lineal en el punto \mathbf{r} y \mathbf{u} la dirección de propagación de la onda.⁸ Lo que a nosotros nos va a interesar es que si $\boldsymbol{\pi}_{\text{ref}} = |\boldsymbol{\pi}_{\text{ref}}| \mathbf{u}'$ es la densidad media de momento lineal de la radiación reflejada, entonces se cumple que

$$\boldsymbol{\pi}_{\text{in}}^\perp + \boldsymbol{\pi}_{\text{ref}}^\perp = 0 \quad ; \quad \boldsymbol{\pi}_{\text{in}}^{\parallel} = \boldsymbol{\pi}_{\text{ref}}^{\parallel}, \quad (2.24)$$

donde los superíndices \perp y \parallel designan, respectivamente, las componentes perpendicular y tangencial a la superficie dA .⁹

⁸ Si el material *refleja* perfectamente la radiación, lo que ocurre es que el material emite un campo EM como respuesta a la radiación incidente. Este campo EM *inducido* compensa al incidente en el interior del material y se superpone en el exterior. Los detalles sobre la relación entre campo EM incidente (“in”) y el reflejado (“ref”) tanto para un ángulo arbitrario de incidencia como para cualquier polarización pueden encontrarse en cualquier texto de óptica o de electromagnetismo.

⁹ La ecuación (2.24) puede obtenerse considerando que la reflexión de la onda sobre la superficie no es otra cosa que la colisión de un haz de fotones que se mueven en la dirección \mathbf{u} contra un blanco de masa M muy grande. En efecto, si despreciamos cualquier efecto debido a una dispersión tipo Compton contra los electrones libres del material o a la absorción de fotones, en la colisión se ha de conservar la componente del momento lineal tangencial a la superficie. A su vez, al despreciar cualquier transferencia neta de energía del haz al material, el módulo del momento lineal de los fotones también se conserva. En suma, tendríamos que $\mathbf{p}_{\gamma,\text{in}}^\perp + \mathbf{p}_{\gamma,\text{ref}}^\perp = 0$ y $\mathbf{p}_{\gamma,\text{in}}^{\parallel} = \mathbf{p}_{\gamma,\text{ref}}^{\parallel}$ y multiplicando por la densidad de fotones obtenemos directamente (2.24).

Como la radiación viaja a la velocidad de la luz c , el momento lineal que la onda incidente comunica al material a través de la superficie dA en un lapso de tiempo dt es

$$d\mathbf{P}_{\text{in}} = (c\boldsymbol{\pi}_{\text{in}} dA dt) \cos \theta,$$

donde el factor $\cos \theta$ tiene en cuenta la orientación relativa entre la superficie y la dirección de la onda incidente. Análoga expresión tiene el momento lineal $d\mathbf{P}_{\text{ref}}$ que el material cede al exterior en el tiempo dt a través de la superficie dA mediante la emisión de la onda reflejada. En consecuencia, la contribución de la reflexión de la onda en la superficie dA a la variación neta del momento lineal del material es

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \frac{d\mathbf{P}_{\text{in}} - d\mathbf{P}_{\text{ref}}}{dt} = c \cos \theta (\boldsymbol{\pi}_{\text{in}} - \boldsymbol{\pi}_{\text{ref}}) dA = 2c \cos \theta \boldsymbol{\pi}_{\text{in}}^\perp dA.$$

Dicha variación es, naturalmente, la fuerza $d\mathbf{F}_{\text{rad}}$ que ejerce la radiación sobre la superficie dA del material. Teniendo en cuenta que $\boldsymbol{\pi}_{\text{in}}^\perp = (|\boldsymbol{\pi}_{\text{in}}| \cos \theta) \mathbf{n} = (c^{-2} I_{\text{in}} \cos \theta) \mathbf{n}$, donde I_{in} es la intensidad del haz incidente, llegamos a

$$d\mathbf{F}_{\text{rad}} = \frac{d\mathbf{P}}{dt} = \left[\frac{2I_{\text{in}} \cos^2 \theta}{c} dA \right] \mathbf{n}.$$

Observe que $d\mathbf{F}_{\text{rad}}$ es perpendicular a la superficie. Por tanto, la *presión que ejerce la radiación* sobre el material al reflejarse será

$$\boxed{\mathcal{P}_{\text{EM}}^{(\text{ref})} = \frac{d\mathbf{F}_{\text{rad}} \cdot \mathbf{n}}{dA} = \frac{2I_{\text{in}} \cos^2 \theta}{c}} \quad (2.25)$$

(recordemos que θ es el ángulo que forma la normal a la superficie con la dirección de la onda incidente o, equivalentemente, con la dirección de propagación de los fotones incidentes).

Si el material *absorbe* toda la radiación, cada fotón transfiere todo su momento lineal al objeto por lo que $\mathbf{p}_{\text{ref}} = \mathbf{0}$. La presión de radiación sería en este caso

$$\boxed{\mathcal{P}_{\text{EM}}^{(\text{abs})} = \frac{d\mathbf{F}_{\text{rad}} \cdot \mathbf{n}}{dA} = \frac{I_{\text{in}} \cos^2 \theta}{c}} \quad (2.26)$$

es decir, justo la mitad que en el caso de reflexión.

EJEMPLO 2.d. *El viento del Sol*

El velamen del “Diana”, participante en la (ficticia) primera regata de veleros solares Tierra-Luna, tiene una superficie de 1 km^2 de material prácticamente reflectante. Si sobre las velas incide perpendicularmente radiación solar con una intensidad de 1500 W/m^2 , ¿cuál es la fuerza que ejerce dicha radiación sobre el velero? Estime la masa que habría de tener el Diana para recorrer una distancia de 400.000 km en dos meses si parte del reposo y despreciamos las fuerzas gravitatorias que actúan sobre la nave.

Solución:

Si A es el área de las velas (reflectantes) y puesto que la radiación incide normalmente, la fuerza (módulo) que ejerce la radiación es

$$F = \mathcal{P}_{\text{EM}}^{(\text{ref})} A = \frac{2IA}{c} = \frac{2 \cdot 1500 \text{ W m}^{-2} \cdot 10^6 \text{ m}^2}{3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}} = 10 \text{ N},$$

que es muy pequeña. Para que la nave tarde dos meses ($t \simeq 5,2 \times 10^6 \text{ s}$) en recorrer una distancia $s = 4 \times 10^8 \text{ m}$ (aproximadamente la distancia entre la Tierra y la Luna), su aceleración ha de ser

$$a = \frac{2s}{t^2} = \frac{2 \cdot 4 \times 10^8 \text{ m}}{(5,2 \times 10^6 \text{ s})^2} \simeq 2,96 \times 10^{-5} \text{ m s}^{-2},$$

lo que implica una masa del velero

$$m = \frac{F}{a} \simeq \frac{10 \text{ N}}{2,96 \times 10^{-5} \text{ m s}^{-2}} \simeq 3,38 \times 10^5 \text{ kg} \simeq 340 \text{ Tm}.$$

No es éste un mal resultado. Usando una fina lámina de aluminio la masa de las velas del Diana sería del orden de 250 Tm , disponiendo de unas 100 toneladas para el habitáculo y el aparejo. Sin embargo, si hace un análisis algo más crítico verá que la atracción gravitatoria no puede despreciarse en absoluto. Más aún, como la intensidad de la radiación procedente del sol disminuye con el cuadrado de la distancia, la dependencia de la fuerza debida al “viento del Sol” con la distancia es la misma (pero de signo opuesto) a la atracción gravitatoria de nuestra estrella. Esto hace que la estimación de la masa del velero que hemos obtenido sea francamente optimista.

A pesar de lo anterior, y aunque la aceleración debida a la presión de radiación sea minúscula, la ausencia de rozamiento en el espacio hace que la idea de construir “veleros interplanetarios” no sea en absoluto descabellada, sobre todo si se complementa con mecanismos de impulsión más convencionales. De hecho, la agencia espacial japonesa ha lanzado en mayo de 2010 un prototipo (IKAROS), aunque naturalmente la superficie de sus velas no es tan grande como la de las naves que aparecen recurrentemente en la ficción. Puede encontrar más información en la URL <http://www.jspec.jaxa.jp/e/activity/ikaros.html>.

2.6. ÓRDENES DE MAGNITUD Y UNIDADES ATÓMICAS

§ 1. En el estudio cuantitativo de procesos a escala microscópica es conveniente usar unidades adecuadas. Una posibilidad es medir las energías en electrón-voltios ($1 \text{ eV} \simeq 1,602 \times 10^{-19} \text{ J}$) y sus múltiplos, las velocidades en múltiplos de la velocidad de la luz c , las masas en unidades de eV/c^2 , las longitudes en Å ($1 \text{ \AA} = 0,1 \text{ nm}$), y las cargas en múltiplos de la carga del electrón en valor absoluto ($e \simeq 1,602 \times 10^{-19} \text{ C}$). A este respecto, para estimar rápidamente resultados numéricos es una buena idea el memorizar la relación $\lambda_C = h/(m_e c) \simeq 0,0243 \text{ \AA}$ de la que se deduce que

$$hc = \lambda_C m_e c^2 \simeq 0,0243 \text{ \AA} \cdot 0,511 \text{ MeV} \simeq 12400 \text{ eV \AA} \quad (2.27)$$

o, equivalentemente, que

$$\hbar c \simeq 2000 \text{ eV \AA} = 200 \text{ eV nm.}$$

§ 2. Es así evidente que el sistema internacional de unidades (SI) es realmente incómodo en el estudio de los problemas en los que estaremos interesados en este libro. Es mucho mejor usar un sistema adecuado, aunque debemos anticipar que en física cuántica los sistemas de unidades se utilizan con bastante liberalidad. En particular, el llamado *sistema de unidades atómicas (u.a.)* se construye de la siguiente manera:

1. La unidad de acción (energía×tiempo) es la constante de Planck racionalizada ($\hbar = 1,054572 \times 10^{-34} \text{ J s}$).
2. La unidad de masa es la masa del electrón ($m_e = 9,109382 \times 10^{-31} \text{ kg}$).
3. La unidad de carga es la carga del electrón *en valor absoluto*¹⁰ ($e = 1,602176 \times 10^{-19} \text{ C}$).
4. La unidad de energía×longitud es $e^2/(4\pi\epsilon_0)$, siendo $\epsilon_0 = 8,854188 \times 10^{-12} \text{ F/m}$.
5. La unidad de energía/temperatura es la constante de Boltzmann ($k_B = 1,380650 \times 10^{-23} \text{ J/K}$).

A partir de estas cinco unidades podremos expresar cualquier otra, tal y como ilustramos en el siguiente ejemplo.

¹⁰ Muchos autores designan por e a la carga del electrón, que sería entonces negativa.

EJEMPLO 2.e. (!) El sistema de unidades atómicas

- Obtenga el valor en unidades del SI de las unidades atómicas de tiempo, longitud, velocidad y momento angular.
- Halle la unidad atómica de energía y exprésela en i) J, ii) eV, iii) kcal/mol.
- Evalúe la unidad atómica de temperatura (en K).

Datos: Número de Avogadro: $N_A = 6,022142 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$; 1 kcal = 4184 J.

Solución:

a) Simbolicemos por $\{M, L, T\}$ las dimensiones de masa, longitud y tiempo. Las unidades atómicas se construyen con las magnitudes ML^2T^{-1} (energía × tiempo), M (masa) y ML^3T^{-2} (energía × longitud), siendo esta última

$$\Lambda_{\text{u.a.}} \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \simeq \frac{(1,602176 \times 10^{-19})^2}{4\pi \cdot 8,854188 \times 10^{-12}} \text{ J m} \simeq 2,307077 \times 10^{-28} \text{ J m}$$

Como dimensionalmente

$$T = \frac{1}{M} \frac{(ML^2T^{-1})^3}{(ML^3T^{-2})^2}$$

tenemos que la unidad de tiempo $t_{\text{u.a.}}$ es

$$t_{\text{u.a.}} = \frac{1}{m_e} \frac{\hbar^3}{\Lambda_{\text{au}}^2} = 2,418884 \times 10^{-17} \text{ s.}$$

Por otro lado,

$$L = \frac{1}{M} \frac{(ML^2T^{-1})^2}{ML^3T^{-2}}$$

por lo que la unidad atómica de longitud a_0 , llamada [radio de] Bohr, es

$$a_0 = \frac{1}{m_e} \frac{\hbar^2}{\Lambda_{\text{u.a.}}} = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 5,291772 \times 10^{-11} \text{ m.}$$

De manera directa, la unidad de velocidad es

$$v_{\text{u.a.}} = \frac{a_0}{t_{\text{u.a.}}} = \frac{\hbar}{m_e a_0} = 2,187691 \times 10^6 \text{ m s}^{-1}.$$

Dado que el momento angular es una acción, su unidad es \hbar .

b) Como

$$E = ML^2T^{-2} = \frac{ML^3T^{-2}}{L}$$

la unidad de energía es

$$E_H = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{a_0} = 4,359744 \times 10^{-18} \text{ J} \simeq 27,211 \text{ eV},$$

2.6. ÓRDENES DE MAGNITUD Y UNIDADES ATÓMICAS

ya que $1 \text{ eV} = 1,602176 \times 10^{-19} \text{ J}$. Este valor E_{H} se denomina Hartree. Introduciendo el número de Avogadro

$$E_{\text{H}} = \frac{\hbar N_A}{t_{\text{au}}} \frac{1}{N_A} \simeq 2,626 \times 10^6 \frac{\text{J}}{\text{mol}} \simeq 627,5 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}}.$$

c) Directamente, la unidad de temperatura en unidades atómicas es (usamos esta notación para no confundirla con la T que estamos usando para el tiempo)

$$\Theta_{\text{au}} = \frac{E_{\text{H}}}{k_B} = \frac{4,359744 \times 10^{-18}}{1,380650 \times 10^{-23}} \text{ K} \simeq 3,157747 \times 10^5 \text{ K}.$$

Conviene dar los resultados en términos de a_0 , E_{H} , \hbar , E_{H}/k_B , e , que son cinco cantidades físicas independientes entre sí cuyo valor es 1 en el sistema de unidades atómicas, aunque puede usarse también la masa del electrón m_e . Sin embargo, no es extraño encontrar expresiones en las que la velocidad de la luz c aparezca explícitamente, usar el eV en lugar del Hartree, o el nm como unidad de longitud.

Magnitud	Símbolo	Valor (SI)	Valor (otras unid.)
longitud (L)	a_0	$5,292772 \times 10^{-11} \text{ m}$	0,529 Å
masa (M)	m_e	$9,109382 \times 10^{-31} \text{ kg}$	0,511 MeV/c ²
energía (E)	E_{H}	$4,359744 \times 10^{-18} \text{ J}$	27,211 eV
acción (E T)	\hbar	$1,054572 \times 10^{-34} \text{ J s}$	1973 eV Å/c
carga (Q)	e	$1,602176 \times 10^{-19} \text{ C}$	–
temp. (Θ)	E_{h}/k_B	$3,157747 \times 10^5 \text{ K}$	27,211 eV/k _B

TABLA 2-1 Unidades atómicas y su equivalencia en el SI.

PROBLEMAS PROPUESTOS

PROBLEMA 2.1. Número de fotones en una cavidad radiante

Consideremos una cavidad radiante en equilibrio a temperatura absoluta T . Demuestre que el número de fotones por unidad de volumen de la cavidad es proporcional a la tercera potencia de la temperatura.

PROBLEMA 2.2. Otro enunciado de la ley de Wien

Demuestre que, en una cavidad radiante en equilibrio térmico a temperatura T , la frecuencia media de la radiación $\bar{\omega}$ obtenida a partir de la densidad espectral de energía $\rho_{\text{EM}}(\omega, T)$ es proporcional a la temperatura. Compare $\bar{\omega}$ con la frecuencia $\omega_{\text{máx}}$ para la que $\rho_{\text{EM}}(\omega, T)$ es máxima.

Ayudas: $\int_0^{+\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx \simeq 6.494$; $\int_0^{+\infty} \frac{x^4}{e^x - 1} dx \simeq 24,886$

PROBLEMA 2.3. Estudio detallado de la fotoemisión

En un proceso de fotoemisión, un electrón absorbe un fotón de frecuencia ω y adquiere una energía cinética K_{out} que le permite escapar del metal. En dicho proceso la energía y el momento lineal deben conservarse.

- Demuestre que el proceso $\gamma + e^- \rightarrow e^-$ es imposible, esto es, que un electrón *libre* no puede absorber un fotón.
- Suponga, sin embargo, que estando el electrón en reposo en el seno del metal su energía potencial de ligadura es $-W_{\text{in}}$. Compruebe entonces que el proceso de fotoemisión *sí* es posible. Para ello tenga en cuenta que la energía potencial del electrón una vez ha escapado del metal es igual a cero.

Nota: En el apartado b) es legítimo tratar la dinámica del electrón de manera no relativista, ya que su energía cinética típica va a ser mucho menor que $m_e c^2$.

PROBLEMA 2.4. (!!) El “radiómetro” de Crookes

El hecho de que la radiación EM ejerce una presión al incidir sobre la superficie de un material inspiró a Sir William Crookes a inventar en 1873 un aparato llamado familiarmente “molino de luz” y que hoy en día se puede adquirir por pocos euros en tiendas de cachivaches y objetos curiosos. El dispositivo, que aparece en la fotografía, consta de cuatro aspas unidas a un fino tubo hueco de vidrio. Un eje metálico vertical está encastrado dentro del tubo de modo que las aspas pueden girar en torno a dicho eje sin apenas rozamiento. Todo el sistema está dentro de una ampolla en la que se ha hecho parcialmente el vacío para minimizar la resistencia del aire. Una de las caras de cada aspa está pintada de negro absorbiendo así la radiación incidente, mientras que la otra está pulida y actúa como una superficie reflectante. Al iluminar este “radiómetro”

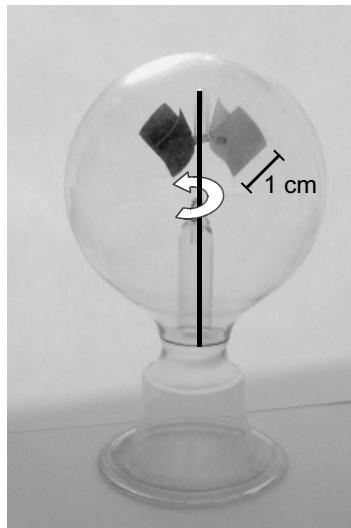


Figura 2-7. Molino de luz adquirido por uno de los autores en el Rastro de Madrid

la radiación EM ejercerá un par de fuerzas sobre el molino, que empezaría a girar en el sentido indicado en la figura ya que la presión electromagnética es mayor sobre las caras pulidas que sobre las tintadas de negro. Experimentalmente se observa que, en efecto, al exponer el molino a la luz solar (cuya intensidad es del orden de 1000 watt/m²) aquél adquiere muy rápidamente una velocidad de rotación de unas 5 revoluciones por segundo. Esta velocidad no puede aumentar más debido a los inevitables efectos de fricción pero, aparentemente, se tiene una evidencia clara de que la radiación EM transporta energía y momento lineal. De hecho, el propio Maxwell fue el evaluador del artículo original de Crookes y aceptó con entusiasmo que el molino giraba por efecto de la presión EM.

Si cada aspa tiene un área de 1 cm², una masa de 0,5 gr y la distancia entre su centro y el eje de giro es de 1 cm, estime la aceleración angular media de las aspas del molino al incidir la luz solar.

Si tiene alguna duda del resultado que ha obtenido, debemos decirle que el molino gira realmente *en sentido contrario al indicado en la figura*. La explicación correcta del fenómeno fue dada por Osborne Reynolds unos pocos años después, en 1879. Si tiene curiosidad puede consultar la URL (en inglés)

<http://math.ucr.edu/home/baez/physics/General/LightMill/light-mill.html>

y verá que ni el bueno de Maxwell ni la Enciclopedia Británica salen bien parados.

PROBLEMA 2.5. (**) *La ecuación de estado de la radiación*

Consideraremos una cavidad radiante de volumen $\mathcal{V} \gg 0$ en equilibrio térmico a temperatura T .

- a) Demuestre que independientemente del valor que tome la energía media $\bar{\epsilon}(\omega, T)$ de un modo de radiación de frecuencia ω , la *ecuación de estado de la radiación* es

$$\mathcal{P}_{\text{EM}} = \frac{1}{3V} U_{\text{EM}} \quad (2.28)$$

donde U_{EM} es la energía de la radiación EM y \mathcal{P}_{EM} es la presión que ejerce sobre las paredes de la cavidad.

- b) A partir de este resultado demuestre la ley de Stefan. Para ello utilice la relación termodinámica general

$$\left(\frac{\partial U_{\text{EM}}}{\partial V} \right)_T = T \left(\frac{\partial \mathcal{P}_{\text{EM}}}{\partial T} \right)_V - \mathcal{P}_{\text{EM}}, \quad (2.29)$$

donde $()_T$ y $()_V$ simbolizan derivadas manteniendo la temperatura y el volumen constante, respectivamente.

PROBLEMA 2.6. *Cantidades de interés en unidades atómicas*

- a) Obtenga los valores (en SI) de las unidades atómicas de campo eléctrico y de campo magnético.
- b) Halle el valor en unidades atómicas de: i) la velocidad de la luz c , ii) la constante de gravitación universal, iii) la energía en reposo $m_e c^2$ del electrón.
- c) Estime la energía térmica en unidades atómicas correspondiente a 1 K y a la temperatura en la superficie del sol (unos 6000 K).
- d) Definimos la *constante de estructura fina* α como $\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c)$. ¿Cuáles son sus dimensiones físicas? ¿Cuál es su valor? Relacione α con el cociente entre E_H y $m_e c^2$.

Datos: $c = 299792458 \text{ m/s}$; $G_N \simeq 6,674 \times 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2}$.

PROBLEMA 2.7. *Análisis dimensional*

Muchos sistemas físicos están caracterizados por una serie de magnitudes que definen las escalas naturales de los procesos que en ellos tienen lugar. Si nos ceñimos a propiedades mecánicas, el valor de tres de esas magnitudes dimensionalmente independientes permitiría obtener la escala característica de cualquier magnitud mecánica. Añadiendo una carga y una temperatura característica podremos también abordar fenómenos eléctricos y térmicos. Esta técnica, llamada *análisis dimensional*, permitirá predecir en muchas ocasiones el valor en orden de magnitud de ciertas propiedades. A su vez, usando argumentos de consistencia dimensional podremos “deducir” algunas leyes físicas.

Usando análisis dimensional:

- a) “Deduzca” la ley de Stefan.
- b) Halle la escala natural de longitudes y la de temperaturas que son relevantes en gravitación cuántica. (*Nota:* la gravitación cuántica es relativista)

TEMA 3

ONDAS DE MATERIA. PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE

En este capítulo analizaremos cómo se representa el estado cuántico de una partícula puntual. Aunque podríamos *postular* los resultados básicos, procederemos poco a poco introduciendo argumentos de plausibilidad que conduzcan de una manera razonable a la *necesidad* y a la *metodología* de tal descripción del estado de la partícula.

En primer lugar explicaremos qué es el estado cuántico de una partícula, remarcando las diferencias fundamentales que hay entre las descripciones *clásica* y *cuántica* de un sistema físico. Veremos a continuación que el estado cuántico de una partícula se representa mediante una *función de onda*, que puede expresarse tanto en el espacio de posiciones como en el espacio recíproco.

Una vez que hemos establecido cómo se representa el estado cuántico, explicaremos cómo a partir de esa representación se pueden obtener las probabilidades de ocurrencia de medidas de la posición y del momento lineal.

Acto seguido, ilustraremos las propiedades ondulatorias de las partículas mediante el análisis detallado de algunos experimentos de difracción de haces de partículas. El capítulo se cerrará con el enunciado completo del principio de incertidumbre de Heisenberg. Comprobaremos que la descripción del estado cuántico basada en funciones de onda responde a las imposiciones de este principio.

Orientaciones generales al plan de trabajo

Los contenidos de este importante capítulo son principalmente conceptuales. Por ello nos extenderemos con cierto profundidad en algunos puntos claves. Por el contrario, las técnicas matemáticas que utilizaremos no son excesivamente difíciles. No obstante, los desarrollos matemáticos estarán bastante detallados para ayudarle en el trabajo autónomo, por lo que pueden parecer prolijos a primera vista. Con todo ello, sugerimos para su estudio unas **15 horas** de trabajo personal.

Objetivos del capítulo

- Conocer la descripción que hace la física cuántica del estado de una partícula puntual en términos de su función de onda; saber interpretarla como continente de información físicamente medible.
- Comprender la naturaleza probabilística de la información contenida en la función de onda.
- Saber distinguir y relacionar las representaciones en posiciones y en momentos de la función de onda de una partícula.
- Analizar sencillos fenómenos de difracción de haces de partículas a partir de la interpretación probabilística subyacente a la función de onda.
- Comprender la íntima relación entre la interpretación probabilística y el principio de incertidumbre de Heisenberg.

3.1. EL ESTADO CUÁNTICO DE UNA PARTÍCULA

§ 1. Pensemos en un sistema físico muy sencillo: una partícula puntual de masa M que se mueve como resultado de la acción de una fuerza \mathbf{F} conocida.¹ De acuerdo con la *física clásica*, el valor de cualquier propiedad mecánica de la partícula se obtiene a partir de los valores que toman su posición \mathbf{r} y su momento lineal \mathbf{p} . Estas dos magnitudes definen entonces el *estado clásico* de la partícula, que simbolizaremos como (\mathbf{r}, \mathbf{p}) .² En otras palabras, el estado clásico proporciona *toda la información* relativa a la mecánica de la partícula.

Imaginemos que en un instante inicial, por convenio $t = 0$, su estado es $(\mathbf{r}(0), \mathbf{p}(0))$. En mecánica clásica, damos por supuesto que este estado es físicamente posible (a menudo diremos que el estado es *realizable*), es decir, que es el resultado de un cierto proceso físico al que llamaremos genéricamente *preparación*.³ Una vez que la partícula ha sido “preparada”, el estado empieza a cambiar en el tiempo como consecuencia de la acción de la fuerza \mathbf{F} . La evolución dinámica del estado se describe mediante unas *ecuaciones del movimiento*, que nos permiten saber cuál es el estado $(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t))$ en un instante de tiempo t posterior. Como la fuerza \mathbf{F} es conocida, esta evolución dinámica es *determinista*: $(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t))$ queda únicamente determinado por el estado inicial $(\mathbf{r}(0), \mathbf{p}(0))$ o, como se suele decir, por las *condiciones iniciales* del problema.

Finalmente, para conocer alguna propiedad mecánica de la partícula en un cierto instante t interactuamos con ella mediante la realización de una medida experimental. Tal interacción es un proceso físico en sí mismo, por lo que:

- i) una medida puede perturbar el estado del sistema que estamos estudiando;
- ii) toda medida ha de obedecer las leyes generales de la física.

Aún así, la física clásica presupone que existen medidas ideales en las que:

- i) se desprecia la perturbación que sufre la partícula;
- ii) se pueden medir con precisión arbitraria una o varias magnitudes a la vez.

¹ En rigor, el sistema estaría formado por la partícula y la fuente que produce la fuerza, que es así la de interacción entre partícula y fuente. Ahora bien, si despreciamos los efectos de la fuerza (de reacción) que ejerce la partícula sobre la fuente, podemos reducir la dinámica del sistema a la de la partícula.

² Esto es, por un punto del llamado *espacio de las fases* de la partícula.

³ No entraremos en absoluto a discutir si el proceso de preparación es tecnológicamente factible. La única exigencia es que no viole ninguna ley física.

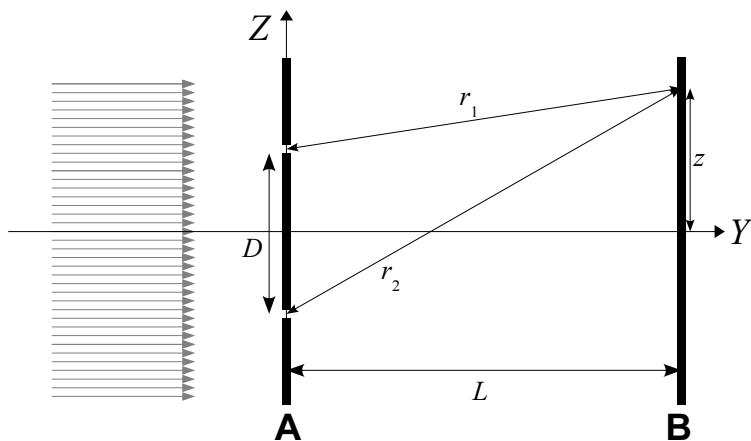


Figura 3-1. Esquema del dispositivo interferométrico de Young para un haz de partículas. La distancia entre las rendijas en la lámina A es D , mientras que la separación entre las rendijas y la pantalla B es L . Las partículas inciden uniformemente sobre la lámina A. El eje OX es perpendicular al plano de la figura

Como consecuencia, la física clásica no impone ninguna restricción si deseamos medir una (o varias) magnitud(es) física(s) con toda la precisión experimental que deseemos. El resultado de una medida ideal clásica es entonces completamente predecible a partir de los valores de $\mathbf{r}(t)$ y $\mathbf{p}(t)$.

Podemos concluir que *la mecánica clásica es completamente determinista*. Ello es así no sólo porque la evolución del estado lo sea, sino también porque ese determinismo se aplica a los valores, medibles experimentalmente, de ***todas*** las magnitudes dinámicas de la partícula.

§ 2. Debemos ahora preguntarnos si las hipótesis anteriores siguen siendo válidas al estudiar *sistemas físicos a escala microscópica*. La respuesta categórica es *no*. Ni es posible preparar a la partícula en un estado en el que podamos afirmar que los valores de la posición y el momento lineal toman valores completamente predeterminados, ni pueden realizarse medidas ideales tal y como las entiende la física clásica.

Para ilustrar esa imposibilidad, consideremos un dispositivo interferométrico de Young (cfr. la **sección 1.6**) en el que, en lugar utilizar radiación electromagnética, empleamos un haz de partículas. El dispositivo está formado por una lámina A dispuesta sobre el plano XZ en la que se han practicado dos rendijas estrechas paralelas separadas una distancia D (vea la **FIG. 3-1**). Sobre la lámina incide perpendicularmente un haz uniforme de partículas con momento

lineal $\mathbf{p}_{\text{in}} = p_0 \mathbf{u}_y$, procedentes de un emisor lejano. A la derecha de la lámina A hay una pantalla paralela B situada en el plano $y = L$. Esta pantalla registra el impacto de las pocas partículas que han sido capaces de atravesar alguna de las rendijas. Tal y como se ha dispuesto el experimento, el número de partículas que atraviesan la rendija superior habrá de ser igual al de las que lo hacen por la inferior.

En la cara izquierda de la lámina A se pueden detectar los impactos individuales de las partículas. Si el comportamiento de las partículas fuese clásico, la distribución de impactos en la pantalla B habría de ser similar a la de la **FIG. 3-2**. Al atravesar una rendija, las partículas interaccionarían elásticamente con sus bordes sufriendo una cierta dispersión y, naturalmente, la distribución de impactos sería la suma de las distribuciones de impactos de las partículas que han atravesado la rendija superior más la de las partículas que han atravesado la inferior. Sin embargo, lo que se observa experimentalmente es lo que aparece en la **FIG. 3-3**: un claro patrón de interferencia, típicamente ondulatorio.

Cabría pensar que esta interferencia es resultado de algún tipo de interacción entre las partículas del haz. Sin embargo el emisor es capaz de emitir partículas una a una, siendo así posible *contar* los impactos. Reduciendo mucho el ritmo de emisión se ve que al principio los impactos parecen distribuirse aleatoriamente (véase la fig. **FIG. 3-3**), pero transcurrido cierto tiempo la distribución de impactos tiende a reproducir el patrón de interferencia, que resulta así ser independiente de la intensidad del haz incidente. Al ser el ritmo de emisión muy lento no hay correlación alguna entre los sucesos individuales asociados al movimiento de cada partícula y, entonces, la densidad de impactos es proporcional a la *probabilidad* de detectar *una* partícula en un punto de la pantalla B. Esto es precisamente lo que ocurriría para un haz de fotones (cfr. el epígrafe **§2.2.1**).

Repitamos el experimento pero determinando la rendija por la que pasa la partícula. Como las partículas se emiten una a una, la forma más sencilla de proceder es la siguiente: antes de que se emita una partícula tapamos una de las rendijas, así que si la partícula termina impactando en la pantalla B es que ha pasado por la otra rendija. Vamos repitiendo el proceso para cada emisión *individual* pero cambiando aleatoriamente la rendija tapada⁴ Para nuestra sorpresa la distribución de impactos es ahora ¡la de la **FIG. 3-2**! y el resultado es, de nuevo, independiente de la intensidad del haz. La única diferencia respecto al caso anterior es que ahora *sabemos* a través de qué rendija ha pasado cada una

⁴ De esta forma, el único efecto esperable es que tendríamos que multiplicar por dos el tiempo de recolección de datos para conseguir la misma densidad de impactos.

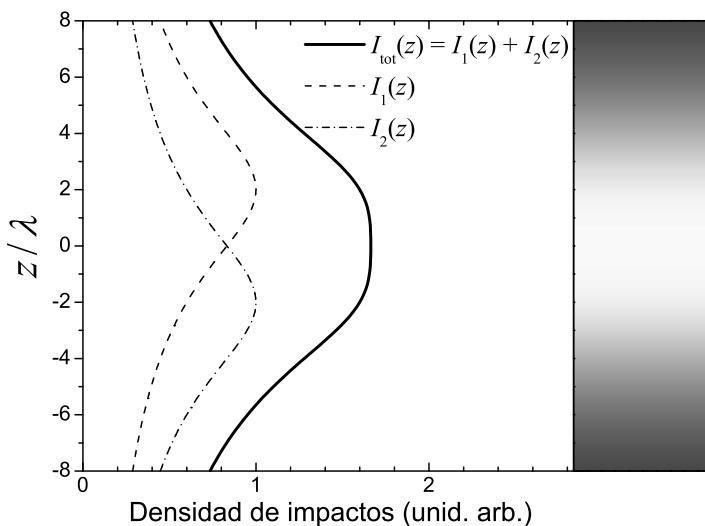


Figura 3-2. Resultado esperable de un experimento de doble rendija suponiendo que las partículas tuvieran un comportamiento clásico. Panel izquierdo: densidad total de impactos (línea continua) y contribuciones parciales debidas a partículas que pasarían por la rendija superior (línea de trazos) y por la inferior (línea de puntos y trazos). Panel derecho: imagen de los impactos contra la pantalla B (más claridad cuantos más impactos)

de las partículas que impacta sobre la pantalla B, mientras que antes sabíamos que había pasado por *alguna rendija*, pero no por cuál de ellas.

§ 3. El experimento de la doble rendija es un ejemplo de entre los muchos fenómenos ondulatorios que aparecen al hacer interactuar un haz de partículas materiales con dispositivos adecuados (por ejemplo, con estructuras periódicas que actúan como una red difracción). Su importancia radica en que, dentro de su simplicidad, muestra claramente cuáles son las diferencias esenciales entre la física clásica y la física cuántica. Veámoslas punto por punto.

- Las interferencias que aparecen cuando teníamos las dos rendijas abiertas son imposibles de predecir bajo un análisis clásico. ***La dinámica de una partícula no puede así describirse en términos de los valores de su posición y de su momento lineal.*** En consecuencia, el estado mecánico de la partícula habrá de definirse de un modo radicalmente diferente, al que llamaremos ***estado cuántico***. Siendo la interferencia un fenómeno ondulatorio, es razonable afirmar que:

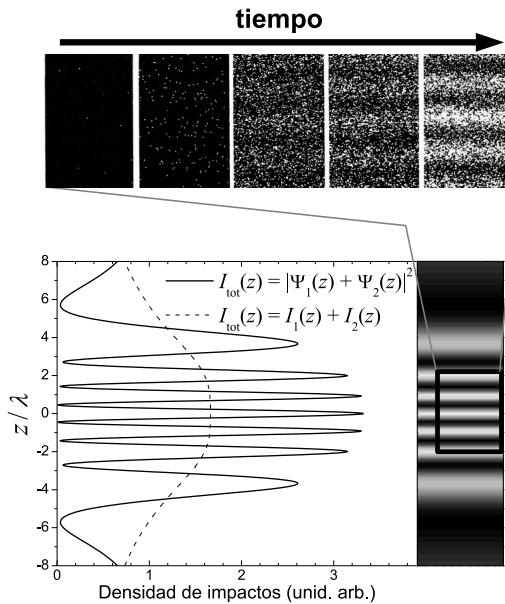


Figura 3-3. Resultado real del experimento de la doble rendija, donde se incluye el resultado esperable de un comportamiento clásico (curva a trazos). El panel inferior derecho muestra la imagen de los impactos contra la pantalla B (más claridad cuantos más impactos). En los paneles superiores se presenta la evolución temporal del patrón de interferencia a medida que impactan más y más partículas. Esta última figura está tomada de un trabajo de Tonomura *et al* (Am. J. Phys. **57**, 117 (1989)) en el que el experimento se realizó con electrones en un microscopio electrónico. El papel de la doble rendija lo juega lo que se denomina un biprisma de Möllenstedt

- a) El estado cuántico de una partícula puede describirse mediante una onda que, para distinguirla de las electromagnéticas, denominaremos *onda de materia*.⁵
 - b) Es posible representar matemáticamente la onda de materia (o el estado cuántico) mediante un campo dependiente del tiempo al que llamaremos *función de onda*.
- A su vez, en un dispositivo de Young, el lugar de la pantalla B en el que impactará *una* partícula en concreto es impredecible. Sin embargo, el análisis de un gran número de sucesos muestra que los impactos siguen una pauta probabilística bien definida. Por tanto:

⁵ El término *onda de materia* apenas se usa en la actualidad, pero hemos preferido mantenerlo al menos en este capítulo.

- c) La interpretación de la función de onda ha de hacerse en clave probabilística. En particular, *el conocimiento del estado cuántico de la partícula no permite saber a priori “el” resultado de una determinada medida experimental, pero sí conocer la probabilidad (de ocurrencia) de que se obtenga un cierto valor.*⁶
- Por otra parte, la lámina A con su doble rendija puede verse como un dispositivo que *prepara* las partículas que terminan impactando contra la pantalla B mediante un procedimiento conocido como *medida filtrante*.
 - (i) Cuando las dos rendijas están abiertas, la lámina A actúa como un aparato que mide el *valor absoluto* de la componente z de la posición de las partículas que llegan a la lámina A procedentes desde el emisor. Si el resultado de tal medida es $|z| \sim D/2$, entonces las partículas pasan a la región $y > 0$; en caso contrario son detenidas.
 - (ii) Cuando una de las rendijas está tapada (o si situamos un detector que indique por qué rendija pasa la partícula), la lámina realiza una medida filtrante de la componente z , dejando pasar las partículas que llegan a la lámina A con o bien $z \sim +D/2$ o bien $z \sim -D/2$.

Analicemos ahora cada uno de los casos. Empecemos por el caso (ii). Simbolicemos por $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$ y por $\Psi_2(\mathbf{r}, t)$ a las funciones de onda en la región $y > 0$ que corresponden a una partícula de la que sabemos que ha atravesado o la rendija superior o la rendija inferior, respectivamente. Todavía no sabemos cuál es la forma específica de estas funciones de onda, pero podemos admitir⁷ que son ondas cilíndricas cuyos focos respectivos son la rendija superior o la rendija inferior. Admitamos igualmente que la probabilidad de detectar a la partícula en un punto \mathbf{r} es igual a la *intensidad* de la onda. Así, cuando en el experimento preparamos a la partícula mediante una medida filtrante de z , como su estado cuántico es $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$ ó $\Psi_2(\mathbf{r}, t)$, la densidad de impactos acumulada en un punto de la pantalla de observación B será proporcional la suma $I_{\text{tot}}(\mathbf{r}, t)$ de las intensidades respectivas $I_1(\mathbf{r}, t)$ e $I_2(\mathbf{r}, t)$:

$$I_{\text{tot}}(\mathbf{r}, t) = I_1(\mathbf{r}, t) + I_2(\mathbf{r}, t)$$

Este es el resultado que representamos en la **FIG. 3-2**, en el que no se apreciaba ningún patrón de interferencia. La onda de materia sería entonces la *mezcla incoherente* de las ondas $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$ y $\Psi_2(\mathbf{r}, t)$.

⁶ Esto no excluye la posibilidad de que existan estados cuánticos en los que el resultado de la medida de alguna magnitud esté “bien definido”. En este caso, la probabilidad de ocurrencia sería uno para un valor (aquel que “toma” la magnitud en el estado cuántico) y cero para todos los restantes.

⁷ Siguiendo, por tanto, la discusión que se hizo en §1.6.3.

La situación es muy distinta cuando las dos rendijas están abiertas. Ahora la partícula ha sido preparada en un estado en el que el valor absoluto de la componente z de la posición toma el valor $|D/2|$ a la salida de la lámina A, pero sin saber si $z \sim +D/2$ o si $z \sim -D/2$. En este caso sí observamos interferencias en la densidad de impactos, lo que puede explicarse suponiendo que la onda de materia en la región $y > 0$ es la *superposición coherente* de las ondas correspondientes a una preparación en la que $z \sim +D/2$ y a otra en la que $z \sim -D/2$. Esto es, la función de onda total será

$$\Psi_{\text{tot}}(\mathbf{r}, t) = \Psi_1(\mathbf{r}, t) + \Psi_2(\mathbf{r}, t)$$

y la densidad de impactos en la pantalla B , que mostramos en la **FIG. 3-3**, no será ahora proporcional a la suma de las intensidades, sino a la intensidad correspondiente a la suma de las funciones de onda. Esto lo podemos expresar como:

- d) El *principio de superposición* es aplicable a las ondas de materia, al igual que se hizo en el caso de las ondas EM (y, como vimos en el **capítulo 2**, de los estados de los fotones).
- Finalmente, tal y como se ha montado el dispositivo, las partículas que proceden desde el emisor lejano están en un estado en el que su momento lineal toma el valor $\mathbf{p}_{\text{in}} = p_0 \mathbf{u}_y$, en el que la componente z del momento lineal p_z es igual a cero. Tras realizar una medida relativa a la componente z de su posición (la medida filtrante), el estado cuántico es diferente puesto que la dispersión medida de los impactos sobre la pantalla B únicamente puede explicarse si p_z puede tomar valores no nulos. Más aún, como el lugar de impacto no es predecible, el valor de p_z tras la medida (o tras la preparación) *no está bien definido* en el estado cuántico, esto es, el resultado de una medida ulterior de p_z no es predecible. Esto nos lleva a que:

- e) *En física cuántica no existen medidas clásicamente ideales*⁸ ya que la medida puede afectar al estado cuántico de la partícula. Más aún, la medida de una cierta magnitud física puede cambiar los valores de las probabilidades de ocurrencia de otra magnitud.

§ 4. Como acabamos de ver, la descripción cuántica de los fenómenos a escala microscópica ha de ser radicalmente diferente a la que hace la física

⁸ Una medida ideal es aquella en la que la interacción entre el aparato de medida \mathcal{M} y la partícula es despreciable

clásica. Debemos renunciar a muchas hipótesis que se daban por supuestas en mecánica clásica. Como primera condición, *únicamente consideraremos estados que puedan realmente ser preparados experimentalmente*. Esto excluye taxativamente los estados clásicos (\mathbf{r}, \mathbf{p}) en los que tanto la posición como el momento toman simultáneamente valores completamente definidos (esto es, en los que los resultados de una medida de la posición y el momento lineal son predecibles).⁹ Esta limitación a los procesos de preparación constituye el enunciado cualitativo del *principio de incertidumbre de Heisenberg*, que examinaremos con más detalle al final de este capítulo.

Como consecuencia, no podremos efectuar una medida simultánea y arbitrariamente precisa de la posición *y* del momento lineal de la partícula. De ser así sabríamos que la partícula está en un estado en el que \mathbf{r} y \mathbf{p} toman valores completamente definidos, en clara contradicción con la afirmación de que este tipo de estados son imposibles de preparar. En general, medidas simultáneas y arbitrariamente precisas de dos o más magnitudes físicas que son posibles en física clásica no pueden realizarse en sistemas microscópicos. De este modo, la información sobre la mecánica de la partícula que contiene el estado cuántico es incompleta si la comparamos con la que proporciona el estado clásico. No obstante, *el estado cuántico debe contener toda la información sobre la partícula que sea experimentalmente accesible*, aunque insistimos en que tal información se expresará mediante probabilidades de ocurrencia.

§ 5. Independientemente de lo anterior, una vez que la partícula ha sido preparada en un estado cuántico inicial, éste evolucionará en el tiempo como consecuencia de la acción de una fuerza \mathbf{F} . Al igual que ocurre en física clásica, *dicha evolución será determinista siempre y cuando \mathbf{F} sea estrictamente la única fuerza que actúe sobre la partícula*. Esta precaución es necesaria porque no podemos despreciar sin más (como se hacía en física clásica) la posible interacción entre la partícula y un hipotético dispositivo de medida.

La evolución del estado cuántico de una partícula es determinista siempre que durante la misma no se efectúen medidas experimentales de ninguna de sus propiedades.

En suma, si sabemos el estado cuántico inicial de una partícula (resultado de una preparación) y su evolución temporal, entonces seremos capaces de predecir las probabilidades de ocurrencia en una medida de una magnitud arbitraria (siempre y cuando, claro está, tal medida sea posible). Es entonces incorrecto

⁹ Como ya se ha dicho en 3.1.3, la dinámica de una partícula no puede describirse en términos de los valores de su posición y de su momento.

afirmar que la física cuántica no es determinista. Sí lo es, aunque ese determinismo está limitado ya que las propias leyes de la física impiden conocer todos los detalles de un sistema microscópico.

§ 6. En este capítulo veremos cómo se describe el estado cuántico de una partícula puntual mediante la función de onda correspondiente a su onda de materia. Con ello estableceremos las bases de la *mecánica cuántica ondulatoria* de una partícula, cuyo desarrollo ocupará la segunda parte de este texto.

El procedimiento que seguiremos será sencillo porque, tal y como ilustra el experimento de la doble rendija, *los mismos fenómenos de interferencia y difracción que se observan para la radiación electromagnética, aparecen también si en lugar de un haz de fotones (la radiación) tenemos un haz de partículas materiales (electrones, neutrones, etc.).* Así, la interpretación que hicimos del estado de un fotón en el capítulo anterior podrá aplicarse, con pocas variaciones, al estado de una partícula material.

3.2. EL POSTULADO DE DE BROGLIE

§ 1. Recordemos que los fotones que forman una onda plana de vector de onda $\mathbf{k} = k\mathbf{u}$ tienen un momento lineal y una energía dados respectivamente por

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_\gamma &= \hbar\mathbf{k} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}\mathbf{u} \\ E_\gamma &= c|\mathbf{p}_\gamma| = \hbar\omega,\end{aligned}\tag{3.1}$$

donde \mathbf{u} es la dirección de propagación de la onda y $\omega = c|\mathbf{k}|$ es su frecuencia angular (recuerde que la frecuencia angular ω está relacionada con la frecuencia ν —inversa del periodo— mediante $\omega = 2\pi\nu$).¹⁰

No olvide que la onda plana es una situación límite ideal. A pesar de ello, y mediante las técnicas del análisis de Fourier, sabemos que toda onda EM libre se puede descomponer como una superposición de ondas planas de vector de onda \mathbf{k} y frecuencia $\omega_k = c|\mathbf{k}|$. Como vimos en el epígrafe §2.2.2, la aportación de cada modo normal de vector de onda \mathbf{k} a una onda EM libre nos permite

¹⁰ Por abuso del lenguaje diremos que el fotón que se propaga a la velocidad de la luz en la dirección \mathbf{u} *tiene* una longitud de onda λ y una frecuencia ω , cuando realmente lo que queremos decir es que está en un estado con un momento lineal \mathbf{p}_γ y una energía E_γ con valores bien definidos. Sobreentendidas las relaciones (3.1), la utilización liberal del lenguaje al hablar de magnitudes que definen el estado de la partícula es perfectamente admisible.

conocer la *probabilidad* de que al medir el momento lineal de uno de los fotones que constituyen la onda EM se obtenga el valor $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ (en rigor, puesto que el vector de onda puede tomar valores continuos, conoceremos la probabilidad de que al medir el momento lineal se obtenga un valor en un entorno de \mathbf{p}). Según la ecuación (2.7), esta probabilidad de ocurrencia puede inferirse de la representación del potencial vector complejo $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t)$ de la onda en el espacio recíproco. Así, el campo electromagnético está relacionado de alguna forma con una “función de onda del fotón” que informa de los posibles resultados de las magnitudes físicas propias de esta partícula y cuyas propiedades son consistentes con los fenómenos ondulatorios propios de la radiación EM estudiados en el **capítulo 1**.

§ 2. Impongamos ahora que la relación (3.1) para los fotones también es válida para una partícula material, lo que históricamente se conoce como el **postulado de De Broglie**.¹¹ En concreto, si una partícula libre de masa M está en un estado con momento lineal \mathbf{p} y energía cinética E , entonces tiene asociada a su movimiento una onda, denominada *de materia*, cuyo vector de onda es

$$\boxed{\mathbf{k} = \frac{1}{\hbar} \mathbf{p}} \quad (3.2)$$

y su frecuencia está dada por

$$\boxed{\omega = \frac{1}{\hbar} E.} \quad (3.3)$$

De esta manera, la longitud de onda de tal onda de materia (la llamada *longitud de onda De Broglie*) es

$$\lambda = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}|} = \frac{h}{|\mathbf{p}|}. \quad (3.4)$$

Algunas preguntas surgen casi inmediatamente. Por ejemplo:

- ¿Está la onda de materia representada por una función escalar o, como ocurre con el fotón, por un vector?
- A su vez, fijado un sistema de referencia inercial el valor clásico del momento lineal está definido únicamente pero no así el de la energía: ¿debe incluirse la masa en reposo? ¿cómo afecta el origen arbitrario de energías a la frecuencia ω ?
- Por otro lado, la *velocidad de fase* de la onda de materia es

$$\mathbf{v}_f = \frac{\omega}{|\mathbf{k}|} \mathbf{u}_k = \frac{E}{|\mathbf{p}|} \mathbf{u}_k, \quad \text{con } \mathbf{u}_k = \frac{1}{|\mathbf{k}|} \mathbf{k}$$

¹¹ Propuesto originalmente por Louis De Broglie en 1924, aunque los argumentos que él usó fueron muy diferentes a los que estamos aquí siguiendo.

pero, excepto para el fotón, $E/|\mathbf{p}|$ no es la velocidad de la partícula.

- Finalmente, salvo para una partícula libre, el momento lineal evoluciona con el tiempo por lo que ¿cómo sería la onda de materia asociada a una partícula sometida a una fuerza externa?

Responderemos poco a poco a estas preguntas, pero reteniendo la idea principal: la onda de materia se justifica por la aparición de fenómenos ondulatorios en la interacción de un haz de partículas con dispositivos adecuados, y tales fenómenos ondulatorios están relacionados con que las medidas de las magnitudes físicas están determinadas por probabilidades de ocurrencia.¹²

§ 3. Es muy importante que se percate de que lo relevante *no es tanto la onda de materia sino la información física que se pueda extraer a partir de dicha onda*. La **función de onda** $\Psi(\mathbf{r}, t)$, entendida como un campo dependiente del tiempo que describe a la onda de materia, es entonces *una manera*, no necesariamente la única posible, de expresar matemáticamente el estado cuántico de la partícula.

Lo esencial será establecer una “receta” para representar cada estado cuántico mediante una función de onda y que, conocida ésta, seamos capaces de obtener la probabilidad de que una medida dé un cierto valor. En otras palabras, *la función de onda no representa directamente propiedad física alguna de la partícula, sino que es una herramienta para obtener las propiedades de la partícula*. Las preguntas que nos hemos hecho al final del epígrafe anterior deben entonces entenderse desde una perspectiva pragmática: ¿cómo debe ser el objeto matemático $\Psi(\mathbf{r}, t)$ para que sirva a nuestros propósitos?

Puesto que toda la información experimentalmente accesible debe extraerse de $\Psi(\mathbf{r}, t)$, si la partícula tuviese un *grado de libertad interno*, entonces $\Psi(\mathbf{r}, t)$ debería también describirlo. Como se sabe de cursos introductorios de física, muchas partículas tienen un momento angular intrínseco (el espín) y en el capítulo anterior hemos sugerido que el espín del fotón está relacionado con que el potencial $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ sea un vector. No hay a priori ninguna razón que nos impida extender esta conclusión a otras partículas, por lo que es razonable suponer que si la partícula tiene espín u otro grado interno de libertad *la función de onda debe tener varias componentes y, formalmente, será un vector*. Ahora bien, el número de componentes de la función de onda dependerá de cómo sea ese (o esos)

¹² Podría pensar si la masa en reposo M y la carga q de una partícula, al ser magnitudes físicas, también están afectadas por esta naturaleza probabilística de la teoría cuántica. Al nivel en el que nos vamos a mover la respuesta es *no*, y consideraremos a m y q propiedades intrínsecas de las partículas. Por otro lado, el tiempo t no es una magnitud en sí misma sino un parámetro asociado a la evolución temporal de los sistemas físicos.

hipotético(s) grado(s) de libertad. Recíprocamente, *si la partícula no tiene espín la función de onda debe ser escalar*. Dado que de momento vamos a estar interesados primordialmente en describir propiedades dinámicas *espaciales*, supondremos que la función de onda es escalar. Dejaremos para más adelante la descripción de la función de onda para una partícula con espín.

A su vez, *la función de onda de la partícula ha de ser compleja*¹³ En efecto, *admitamos* que la información relevante se va a obtener de la *intensidad* de la onda de materia, que para el caso complejo se define salvo constante multiplicativa como $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$. La forma general de una onda escalar monocromática plana con vector de onda \mathbf{k} y frecuencia ω es

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \quad (3.5)$$

donde Ψ_0 es una amplitud compleja. Conforme al postulado de De Broglie, esta función de onda corresponde a una partícula de momento lineal $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ y energía $E = \hbar\omega$. Como el origen de energías es arbitrario, si añadimos una constante E_0 a tal origen la nueva frecuencia sería $\omega + \omega_0$, donde $\omega_0 = E_0/\hbar$. El cambio que sufriría la función de onda es

$$\Psi_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \longrightarrow \Psi_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} e^{-i\omega_0 t} = \Psi_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} e^{-iE_0 t/\hbar}$$

y el *factor de fase* $\exp(-iE_0 t/\hbar)$ aparecerá siempre, independientemente de cuál sea la energía de la partícula, aunque sin afectar a la intensidad ya que $|\exp(-iE_0 t/\hbar)|^2 = 1$ y la intensidad sigue siendo $|\Psi_0|^2$. Como consecuencias adicionales tenemos que es irrelevante incluir o no la energía en reposo al evaluar la frecuencia y que la velocidad de fase $E/|\mathbf{p}|$ de la onda de materia no va a tener un significado físico directo, ya que su valor dependerá del origen arbitrario de energías.

§ 4. Con todo esto ya podemos reformular el postulado de De Broglie, y afirmar que el estado físico correspondiente a una partícula sin espín que se mueve libremente con momento lineal \mathbf{p} y energía E está representado por la función de onda compleja (que llamaremos *onda de De Broglie*)

$$\theta_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \theta_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \quad \text{con} \quad \begin{cases} \mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar \\ \omega = E/\hbar \end{cases} \quad (3.6)$$

¹³ Observe que lo que era una opción, conveniente pero no obligatoria, en el campo EM clásico aquí se convierte en una necesidad.

donde θ_0 es una cierta amplitud compleja.

La energía de la partícula libre es exclusivamente cinética, por lo que si nos restringimos a una dinámica no relativista se cumple que $E = K = |\mathbf{p}|^2/(2M)$. Entonces,

$$\boxed{\omega = \frac{\hbar|\mathbf{k}|^2}{2M}} \quad (3.7)$$

que no es otra cosa que una *relación de dispersión* entre la frecuencia y el vector de onda.¹⁴

§ 5. Sólo quedaría ver cómo es la función de onda de una partícula sometida a una fuerza exterior. Ahora bien, si por un principio de economía conceptual admitimos que la *manera* en la que se extrae la información física a partir de la función de onda es la misma para una partícula libre que para otra acelerada, la diferencia entre un caso y otro radicará únicamente en cómo evoluciona temporalmente la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$. Por tanto, si en un instante dado t_0 la función de onda de una partícula *no necesariamente libre* exhibe la misma dependencia *espacial* de una onda plana De Broglie (3.6), esto es si $\Psi(\mathbf{r}, t_0) \propto \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$, podremos decir que en ese instante t_0 el momento lineal de la partícula está bien definido y es igual a $\hbar\mathbf{k}$. Una hipotética fuerza *cambiaría* el estado físico de la partícula y por tanto la función de onda, y la evolución dinámica se reflejará pues en la dependencia temporal de $\Psi(\mathbf{r}, t)$.

EJEMPLO 3.a. *Longitudes de onda De Broglie características*

Obtenga la longitud de onda De Broglie de las ondas de materia asociadas a:

- a) Un electrón acelerado por una diferencia de potencial de 10 eV.
- b) Una molécula de O₂ en el aire a temperatura ambiente.
- c) Un protón en un acelerador de partículas con velocidad 0,99c.

Datos: $m_e c^2 \simeq 511$ KeV, $m_p c^2 \simeq 938$ MeV, $k_B \simeq 8,617 \times 10^{-5}$ eV/K

Solución:

- a) La energía cinética del electrón es $K = 10$ eV, valor mucho menor que la energía en

¹⁴ Si esta partícula libre fuese relativista (situación que apenas abordaremos en este texto), y teniendo en cuenta que, como se ha indicado en el párrafo anterior, ω está asociada a la energía cinética (no a la total) de la partícula, dicha relación sería $\omega = \sqrt{c^2|\mathbf{k}|^2 + \omega_0^2} - \omega_0$ con $\omega_0 = M_0 c^2 / \hbar$ y siendo M_0 la masa en reposo de la partícula.

reposo $m_e c^2 \simeq 511 \times 10^3$ eV. Podemos así usar dinámica no relativista obteniendo que

$$\lambda = \frac{h}{|\mathbf{p}|} = \frac{h}{\sqrt{2m_e K}} = \frac{hc}{\sqrt{2m_e c^2 K}} \simeq \frac{12400 \text{ eV } \text{\AA}}{\sqrt{2 \cdot 511 \times 10^3 \cdot 10 \text{ eV}}} \simeq 3,88 \text{ \AA}.$$

b) La energía cinética típica de una molécula en una muestra gaseosa a temperatura T es

$$K = \frac{3}{2} k_B T$$

Como la masa de la molécula de O_2 es aproximadamente $m_{\text{O}_2} \simeq 32m_p$, con m_p la masa del protón, si tomamos $T \simeq 300$ K la longitud de onda De Broglie es

$$\lambda \simeq \frac{h}{\sqrt{2m_{\text{O}_2} K}} \simeq \frac{h}{\sqrt{96m_p k_B T}} = \frac{hc}{\sqrt{96m_p c^2 k_B T}} \simeq 0,257 \text{ \AA}$$

c) Ahora debemos usar mecánica relativista ya que la velocidad v del protón es del orden de c . Entonces

$$|\mathbf{p}| = \frac{m_p v}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}$$

y teniendo en cuenta que $v = 0,99c$

$$\lambda = \frac{h}{|\mathbf{p}|} = \frac{h\sqrt{1 - 0,99^2}}{0,99m_p c} = \frac{\sqrt{1 - 0,99^2}}{0,99} \frac{hc}{m_p c^2} \simeq 0,1425 \frac{12400 \text{ eV } \text{\AA}}{938 \times 10^6 \text{ eV}} \simeq 1,88 \times 10^{-6} \text{ \AA}$$

es decir, de unos 0,19 fm.

Todos estos resultados merecen un breve comentario. La longitud de onda De Broglie define la escala en la que los fenómenos cuánticos van a ser importantes. Para sistemas cuya longitud característica sea mucho mayor que λ las oscilaciones de la onda de materia van a ser imperceptibles y los fenómenos ondulatorios asociados serán irrelevantes. Por el contrario, si λ es del mismo orden de magnitud que la mencionada longitud característica es de esperar que la interferencia o la difracción sean apreciables. En el caso **(a)**, si el electrón impacta contra un sólido en el que la escala natural de longitudes es del orden de \AA (la separación típica entre átomos) es esperable la aparición de fenómenos "no clásicos". En el caso **(b)** la distancia media entre moléculas del gas determina la escala de longitudes del sistema que, como es fácil comprobar, es mucho mayor que λ . Compare con la distancia media entre partículas en un gas típico. Finalmente, el protón del apartado **(c)** tendrá una dinámica esencialmente clásica siempre y cuando no exploremos longitudes menores que 1 fm (que son las distancias características de la física nuclear y subnuclear).

3.3. INTERPRETACIÓN FÍSICA DE LA FUNCIÓN DE ONDA

§ 1. Veamos ahora cómo ha de interpretarse la función de onda de una partícula que en todo lo que sigue supondremos no relativista. Para ello empecemos

imponiendo que las ondas de materia obedecen el **principio de superposición**: si $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$ es la función de onda correspondiente a *un* posible estado de la partícula en un instante t y $\Psi_2(\mathbf{r}, t)$ es la asociada a *otro* estado de la misma partícula, la función de onda

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \alpha_1 \Psi_1(\mathbf{r}, t) + \alpha_2 \Psi_2(\mathbf{r}, t), \quad \text{con } \alpha_{1,2} \in \mathbb{C}, \quad (3.8)$$

representa un tercer posible estado de dicha partícula.

Este principio *es esencial* en física cuántica, ya que permite utilizar el *análisis de Fourier* para escribir la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ de una partícula cualquiera (no necesariamente libre) como

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\tilde{\Psi}(\mathbf{k}, t) e^{+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} d^3\mathbf{k} \quad \text{siendo } \tilde{\Psi}(\mathbf{k}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\Psi(\mathbf{r}, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} d^3\mathbf{r}. \quad (3.9)$$

Dado que el postulado de De Broglie nos relaciona el vector de onda \mathbf{k} con el valor del momento lineal \mathbf{p} mediante $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, es muy conveniente hacer el cambio de variable $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{p}/\hbar$ en (3.9) y trabajar exclusivamente con la variable \mathbf{p} . Definamos entonces la *representación en [el espacio de] momentos* de la función de onda como

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi(\mathbf{r}, t) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} d^3\mathbf{r} \quad (3.10)$$

con lo que se cumple

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) e^{+i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} d^3\mathbf{p}. \quad (3.11)$$

Aunque usemos el mismo símbolo $\tilde{\Psi}$ para la representación recíproca (cuando la variable es \mathbf{k}) y para la representación en momentos (cuando la variable es \mathbf{p}), a partir de ahora daremos por supuesto que $\tilde{\Psi}$ se refiere a la representación en momentos. Es muy sencillo comprobar que, a pesar del cambio de variable, el *teorema de Parseval* toma la forma habitual

$$\int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} = \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\Psi}^*(\mathbf{p}, t) \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) d^3\mathbf{p}. \quad (3.12)$$

Generalmente se sobreentiende que la función de onda es $\Psi(\mathbf{r}, t)$, pero en rigor las funciones $\Psi(\mathbf{r}, t)$ y $\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)$ son representaciones *equivalentes* de la misma

entidad, el estado de la partícula. Por ello, podemos utilizar tanto una como otra para obtener las propiedades de la partícula. La función $\Psi(\mathbf{r}, t)$ recibe entonces el nombre de *representación directa o representación en [el espacio de] posiciones* de la función de onda.

§ 2. Como hemos anticipado, además del principio de superposición admitamos que la *interpretación probabilística* de las medidas del momento lineal de un fotón se aplica a una partícula material cualquiera. *Fijado* un instante de tiempo t , la ecuación (3.11) nos dice que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ es una superposición de funciones $\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) \exp(+i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar)$ cuya dependencia espacial es la de una onda De Broglie. Esto sugiere que $|\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)|^2 d^3\mathbf{p}$ ha de ser proporcional a la probabilidad de que al medir el momento lineal de la partícula en el instante t obtengamos un valor dentro de un entorno de “volumen” $d^3\mathbf{p}$ centrado en \mathbf{p} .

Si $\rho_{\text{mom}}(\mathbf{p}, t) \propto |\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)|^2$ es la correspondiente *densidad de probabilidad* asociada a una medida del momento lineal, la probabilidad de obtener un valor del momento dentro de una región $\tilde{\mathcal{V}}$ del *espacio de momentos* es

$$\Pr(\mathbf{p} \in \tilde{\mathcal{V}}) = \int_{\tilde{\mathcal{V}}} \rho_{\text{mom}}(\mathbf{p}, t) d^3\mathbf{p}. \quad (3.13)$$

Como sucede con toda densidad de probabilidad, $\rho_{\text{mom}}(\mathbf{p}, t)$ ha de estar normalizada,

$$\Pr(\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3) = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \int_{\mathbb{R}^3} \rho_{\text{mom}}(\mathbf{p}, t) d^3\mathbf{p} = 1, \quad (3.14)$$

por lo que obtenemos

$$\rho_{\text{mom}}(\mathbf{p}, t) = \frac{|\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)|^2}{\int_{\mathbb{R}^3} |\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t)|^2 d^3\mathbf{q}}. \quad (3.15)$$

§ 3. Debido a la relación directa entre $\Psi(\mathbf{r}, t)$ y $\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)$ a través de la transformada de Fourier, es de esperar que $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ tenga un significado similar para medidas de la posición de la partícula. Esto sería así no sólo por una mera correspondencia matemática sino porque es razonable que en aquellos lugares donde el módulo de la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ tome valores apreciables sea más probable encontrar a la partícula. Por tanto, siguiendo el mismo razonamiento que

nos ha llevado a (3.15), tenemos que la *densidad de probabilidad* correspondiente a la posición es

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2}{\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi(\mathbf{a}, t)|^2 d^3\mathbf{a}} \quad (3.16)$$

y así $\rho(\mathbf{r}, t)d^3\mathbf{r}$ es la probabilidad de que al medir la posición de la partícula en un instante t la encontremos en un entorno de volumen $d^3\mathbf{r}$ centrado en el punto \mathbf{r} . En consecuencia, la probabilidad de detectar a la partícula en una cierta región \mathcal{V} del espacio es

$$\Pr(\mathbf{r} \in \mathcal{V}) = \int_{\mathcal{V}} \rho(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r}. \quad (3.17)$$

§ 4. Definamos la *norma* de la función de onda en un instante t como la cantidad real y no negativa

$$\|\Psi(t)\| \equiv \left[\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r} \right]^{1/2} = \left[\int_{\mathbb{R}^3} |\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)|^2 d^3\mathbf{p} \right]^{1/2} \quad (3.18)$$

donde hemos usado el teorema de Parseval (3.12). En consecuencia, podemos evaluar $\|\Psi(t)\|$ bien en la representación en posiciones bien en la de momentos. Es evidente que para que las expresiones (3.15) y (3.16) tengan sentido la norma de la función de onda ha de ser finita, ya que de lo contrario las funciones $\rho(\mathbf{r}, t)$ y $\rho_{\text{mom}}(\mathbf{p}, t)$ serían cero. Esto es, **todo estado realizable de una partícula está representado por una función de onda de norma finita** (recuerde que *estado realizable* es sinónimo de estado físicamente posible). A este tipo de funciones se las denomina *normalizables* o también de *cuadrado integrable*.

Si tenemos dos funciones de onda que difieren en un factor multiplicativo *que no depende de la posición* $\Psi(\mathbf{r}, t) = \alpha(t)\Phi(\mathbf{r}, t)$ el factor $\alpha(t)$ va a ser irrelevante en esta interpretación probabilística porque se cancelará en la evaluación de $\rho(\mathbf{r}, t)$ y $\rho_{\text{mom}}(\mathbf{p}, t)$. Podemos anticipar que lo mismo ocurrirá para cualquier otra cantidad con interpretación física directa y así **dos funciones de onda que difieran en un factor multiplicativo que no depende de la posición representan el mismo estado físico**.¹⁵

¹⁵ Nótese que el mismo argumento se puede aplicar en la representación en momentos, para la que un factor multiplicativo que no dependa del momento es irrelevante (en este caso, sería $\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) = \alpha(t)\tilde{\Phi}(\mathbf{p}, t)$) y las dos funciones de onda representarían también el mismo estado físico.

Por tanto eliminaremos molestos factores en el cálculo de las densidades de probabilidad si *normalizamos* la función de onda multiplicándola por una *constante de normalización* que la transforme en otra físicamente equivalente pero de norma unidad, ya que entonces las densidades de probabilidad son

$$\left. \begin{array}{l} \rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \\ \rho_{\text{mom}}(\mathbf{p}, t) = |\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)|^2 \end{array} \right\} \text{ si } \|\Psi(t)\| = 1. \quad (3.19)$$

§ 5. La condición de que la función de onda tenga norma finita plantea aparentemente un problema: la función de De Broglie, $\theta_0 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$, *no es normalizable*. En realidad esto no es un problema en absoluto sino la constatación de que es imposible preparar a la partícula en un estado en el que su momento lineal tenga *un* valor \mathbf{p}_0 completamente definido, esto es, en el que una medida de \mathbf{p} dé con certeza absoluta *el* valor \mathbf{p}_0 . Sin embargo no hay nada “cuántico” en este hecho, ya que tal preparación no es posible simplemente porque las componentes de \mathbf{p} toman valores continuos. De esta forma, el enunciado completamente riguroso del principio de De Broglie consiste en afirmar que cuanto más definido esté el momento lineal de una partícula en un instante de tiempo t_0 (o sea, cuanto más concentrada esté la densidad de probabilidad $\rho_{\text{mom}}(\mathbf{p}, t_0)$ alrededor de un valor \mathbf{p}_0) más parecida será la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t_0)$ a la función De Broglie $\theta_0 \exp(i\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{r}/\hbar)$, salvo constante multiplicativa.

Así, si la partícula está en un estado con momento lineal *muy bien* definido, por conveniencia matemática podremos expresar la dependencia espacial de su función de onda mediante una función De Broglie, pero bien entendido que ésta es una aproximación a $\Psi(\mathbf{r}, t)$ en una región amplia pero finita del espacio. Es decir, debemos admitir la presencia implícita de un factor de modulación que haga que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ se anule cuando $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$, tal y como hacíamos al describir la radiación electromagnética mediante una onda plana.

EJEMPLO 3.b. *La desigualdad de Schwarz*

Sean $\Phi(\mathbf{r})$ y $\Psi(\mathbf{r})$ dos funciones de cuadrado integrable cualesquiera. Una propiedad matemática importante es la llamada *desigualdad de Schwarz*

$$\left| \int_{\mathbb{R}^3} \Phi^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \right| \leq \|\Phi\| \|\Psi\| \quad (3.20)$$

Demuéstrela desarrollando la desigualdad $\|\Psi - \zeta\Phi\|^2 \geq 0$, siendo ζ una constante compleja arbitraria, y particularice el resultado para

$$\zeta = \frac{1}{\|\Phi\|^2} \int_{\mathbb{R}^3} \Phi^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}$$

Solución:

De acuerdo con la sugerencia del enunciado,

$$\begin{aligned} \|\Psi - \zeta\Phi\|^2 &= \int_{\mathbb{R}^3} |\Psi(\mathbf{r}) - \zeta\Phi(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r} = \int_{\mathbb{R}^3} [\Psi(\mathbf{r}) - \zeta\Phi(\mathbf{r})]^* [\Psi(\mathbf{r}) - \zeta\Phi(\mathbf{r})] d^3\mathbf{r} \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} [| \Psi(\mathbf{r}) |^2 + |\zeta|^2 |\Phi(\mathbf{r})|^2 - \zeta \Psi^*(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) - \zeta^* \Phi^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r})] d^3\mathbf{r} \geq 0 \end{aligned}$$

y aplicando la linealidad de la integral y la definición de norma, tenemos que

$$\|\Psi\|^2 + |\zeta|^2 \|\Phi\|^2 - \zeta \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} - \zeta^* \int_{\mathbb{R}^3} \Phi^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \geq 0$$

Para el valor de ζ indicado en el enunciado se tiene por sustitución directa que

$$\|\Psi - \zeta\Phi\|^2 = \|\Psi\|^2 - \frac{1}{\|\Phi\|^2} \left| \int_{\mathbb{R}^3} \Phi^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \right|^2$$

por lo que

$$0 \leq \|\Psi - \zeta\Phi\|^2 \Rightarrow \left| \int_{\mathbb{R}^3} \Phi^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \right|^2 \leq \|\Psi\|^2 \|\Phi\|^2.$$

Ya basta tomar raíces cuadradas para llegar a la desigualdad de Schwarz (3.20).

3.4. VALORES MEDIOS E INCERTIDUMBRES

§ 1. Pensemos ahora en una magnitud física escalar $g \equiv g(\mathbf{r})$ dependiente exclusivamente de la posición \mathbf{r} de la partícula (si g fuese vectorial las siguientes definiciones se aplicarían componente a componente). La medida experimental de dicha magnitud pasa por la determinación de la posición \mathbf{r} y, a partir del resultado, se tendrá el valor de g . Como la probabilidad de obtener un valor concreto \mathbf{r} está dictada por la densidad de probabilidad $\rho(\mathbf{r}, t)$, definimos el **valor medio o esperado** $\langle g \rangle$ de la magnitud g como la media ponderada de los posibles resultados de una medida:

$$\langle g \rangle_t = \int_{\mathbb{R}^3} g(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} = \frac{1}{\|\Psi(t)\|^2} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}, t) g(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} \quad (3.21)$$

(observe que el valor medio puede depender del tiempo, de ahí el subíndice). Análogamente, si $h \equiv h(\mathbf{p})$ es otra magnitud física escalar pero dependiente del momento lineal,

$$\langle h \rangle_t = \int_{\mathbb{R}^3} h(\mathbf{p}) \rho_{\text{mom}}(\mathbf{p}, t) d^3\mathbf{p} = \frac{1}{\|\Psi(t)\|^2} \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\Psi}^*(\mathbf{p}, t) h(\mathbf{p}) \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) d^3\mathbf{p}. \quad (3.22)$$

Estas expresiones son aplicables a las coordenadas de la posición, del momento lineal y también a otras magnitudes de interés como la energía cinética, en las que no aparecen términos con ambos tipos de coordenadas. Sin embargo no sirven, por ejemplo, para el momento angular ya que en su definición entran *simultáneamente* coordenadas de la posición y del momento. Tendremos, pues, que avanzar un poco más en la teoría para poder abordar este tipo de situaciones.

La *incertidumbre* de una magnitud genérica g en un estado cuántico es la dispersión cuadrática media de los posibles resultados de una medida de g , es decir

$$(\Delta g)_t = \sqrt{\langle (g - \langle g \rangle_t)^2 \rangle} = \sqrt{\langle g^2 \rangle_t - \langle g \rangle_t^2}. \quad (3.23)$$

En general, la mayoría de los posibles resultados de una medida se concentrarán en torno a $\langle g \rangle$, en un intervalo cuya anchura es del orden de $2\Delta g$. De este modo, cuanto mayor sea Δg menos definida está la magnitud g en el estado cuántico $\Psi(\mathbf{r}, t)$ o $\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)$ y viceversa. La magnitud g tomará un valor perfectamente definido igual a $\langle g \rangle$ (esto es, una medida de g daría con toda certeza el valor $\langle g \rangle$) si y sólo si se cumple que $\Delta g = 0$.

§ 2. En bastantes ocasiones supondremos que la partícula se mueve a lo largo de una recta (dimensión espacial $N = 1$) o sobre un plano ($N = 2$). La posición y el momento lineal quedan entonces limitadas a N coordenadas, las integrales tridimensionales que han ido apareciendo en estas páginas se reducen a integrales N -dimensionales, y el prefactor $(2\pi\hbar)^{3/2}$ de las transformadas de Fourier debe cambiarse a $(2\pi\hbar)^{N/2}$ (recuerde la discusión sobre la transformada de Fourier en el **capítulo 1**). Veamos un ejemplo ilustrativo.

EJEMPLO 3.c. *La función de onda lorentziana*

En un instante dado de tiempo t , que por simplicidad omitiremos en las expresiones, el estado cuántico de una partícula de masa M sin espín que se mueve en una dimensión espacial está dado por la función de onda normalizada

$$\Psi(x) = A \frac{e^{ik_0 x}}{x^2 + a_0^2},$$

donde a_0 , k_0 y A son constantes reales y positivas. La función $\Psi(x)$ es pues una onda de De Broglie (excluida su dependencia temporal) modulada por una lorentziana.

- Obtenga la constante de normalización A .
- Calcule la probabilidad de que al medir la posición de la partícula se obtenga un resultado dentro del intervalo $[-a_0, +a_0]$.
- Halle la densidad de probabilidad para el momento lineal $\rho_{\text{mom}}(p_x)$.
- Evalúe los valores medios e incertidumbres de x y p_x . Calcule el producto $\Delta x \Delta p_x$ e interprete el resultado.
- Analice cómo es la función de onda cuando $\Delta p_x \rightarrow 0$ (estado con momento lineal bien definido) y cuando $\Delta x \rightarrow 0$ (estado con posición bien definida).

Ayudas: $\int_{\mathbb{R}} \frac{du}{(u^2 + 1)^2} = \frac{\pi}{2}$; $\int_{-1}^{+1} \frac{du}{(u^2 + 1)^2} = \frac{\pi + 2}{4}$; $\frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}} \frac{\cos(\kappa u)}{u^2 + 1} du = e^{-|\kappa|}$

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{u^2 du}{(u^2 + 1)^2} = \frac{\pi}{2}; \quad \int_{\mathbb{R}} u^2 e^{-|u|} du = 4$$

Solución:

- a) La norma al cuadrado de $\Psi(x)$ es

$$\|\Psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |\Psi(x)|^2 dx = A^2 \int_{\mathbb{R}} \frac{|e^{ik_0 x}|^2}{(x^2 + a_0^2)^2} dx = \frac{A^2}{a_0^3} \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{(u^2 + 1)^2} du = \frac{\pi}{2a_0^3} A^2,$$

donde hemos usado que $|\exp(ik_0 x)| = 1$, realizado el cambio $x \rightarrow u = x/a_0$ y utilizado la primera ayuda. Como $\|\Psi\|^2 = 1$ tenemos que

$$\frac{\pi}{2a_0^3} A^2 = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2a_0^3}{\pi}}$$

y, entonces,

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2a_0^3}{\pi}} \frac{e^{ik_0 x}}{x^2 + a_0^2} = \sqrt{\frac{2}{\pi a_0}} \frac{e^{ik_0 x}}{(x/a_0)^2 + 1}$$

(fíjese que, dimensionalmente, Ψ es una longitud elevada a $-1/2$).

- b) La densidad de probabilidad para posiciones, representada en el panel izquierdo de la FIG. 3-4, es

$$\rho(x) = |\Psi(x)|^2 = \frac{2}{\pi a_0} \frac{1}{[(x/a_0)^2 + 1]^2}$$

y la probabilidad pedida se obtiene integrando $\rho(x)$ sobre el intervalo $[-a_0, +a_0]$:

$$\Pr(x \in [-a_0, a_0]) = \int_{-a_0}^{+a_0} \rho(x) dx = \frac{2}{\pi a_0} \int_{-a_0}^{+a_0} \frac{dx}{[(x/a_0)^2 + 1]^2} = \frac{\pi + 2}{2\pi} \simeq 0,818$$

donde hemos hecho otra vez el cambio $x \rightarrow u = x/a_0$ y usado la segunda ayuda. La probabilidad solicitada es entonces del 82 %, aproximadamente.

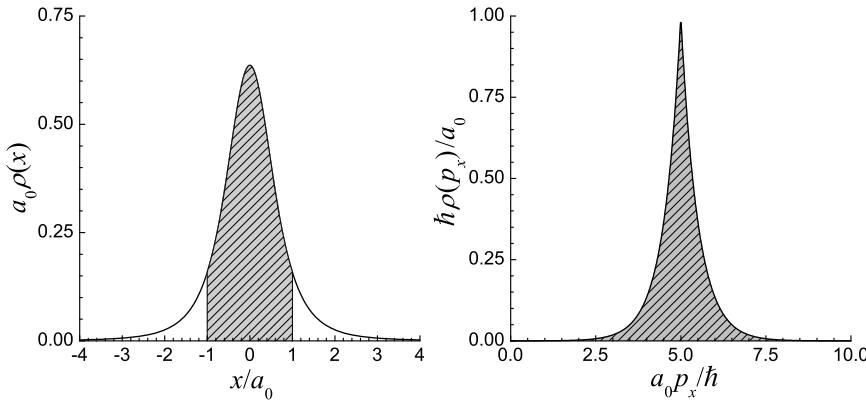


Figura 3-4. Densidades de probabilidad $\rho(x)$ y $\tilde{\rho}_{\text{mom}}(p_x)$ correspondientes al **ejemplo 3.c** ($k_0 a_0 = 5$). El área destacada en $\rho(x)$ es la probabilidad solicitada en el apartado **b**)

c) Aplicando (3.10) particularizada a una dimensión espacial

$$\tilde{\Psi}(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} \Psi(x) e^{-ip_xx/\hbar} dx = \frac{1}{\pi\sqrt{\hbar a_0}} \int_{\mathbb{R}} \frac{e^{i(k_0 - p_x/\hbar)x}}{(x/a_0)^2 + 1} dx.$$

Resulta conveniente volver a hacer el cambio $x \rightarrow u = x/a_0$ y definir la variable adimensional $\kappa \equiv a_0(k_0 - p_x/\hbar)$ para descargar la notación. Entonces:

$$\tilde{\Psi}(p_x) = \sqrt{\frac{a_0}{\hbar}} \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}} \frac{e^{i\kappa u}}{u^2 + 1} du = \sqrt{\frac{a_0}{\hbar}} \frac{1}{\pi} \left\{ \int_{\mathbb{R}} \frac{\cos(\kappa u)}{u^2 + 1} du + i \int_{\mathbb{R}} \frac{\sin(\kappa u)}{u^2 + 1} du \right\}.$$

La primera integral está dada en las ayudas y la segunda es cero puesto que es la integral sobre todo \mathbb{R} de una función impar. En definitiva

$$\tilde{\Psi}(p_x) = \sqrt{\frac{a_0}{\hbar}} e^{-|\kappa|} \quad \Rightarrow \quad \rho_{\text{mom}}(p_x) = |\tilde{\Psi}(p_x)|^2 = \frac{a_0}{\hbar} \exp\left(-\frac{2a_0}{\hbar} |p_x - \hbar k_0|\right),$$

estando $\rho_{\text{mom}}(p_x)$ representada en el panel derecho de la **FIG. 3-4**.

d) El valor medio de la posición de la partícula es

$$\langle x \rangle = \int_{\mathbb{R}} x \rho(x) dx = \frac{2}{\pi a_0} \int_{\mathbb{R}} \frac{x}{[(x/a_0)^2 + 1]^2} dx = 0$$

ya que el integrando es impar. La incertidumbre estará dada por

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle_{|\Psi\rangle}} = \left(\int_{\mathbb{R}} x^2 \rho(x) dx \right)^{1/2} = \left(\frac{2}{\pi a_0} \int_{\mathbb{R}} \frac{x^2}{[(x/a_0)^2 + 1]^2} dx \right)^{1/2} = a_0,$$

donde hemos hecho el mismo cambio $x \rightarrow u = x/a_0$ y usado la ayuda.

La función $\rho_{\text{mom}}(p_x)$ está distribuida simétricamente en torno a $\hbar k_0$, por lo que

$$\langle p_x \rangle = \int_{\mathbb{R}} p_x \rho_{\text{mom}}(p_x) dp_x = \hbar k_0.$$

El cuadrado de la incertidumbre del momento lineal será

$$(\Delta p_x)^2 = \int_{\mathbb{R}} (p_x - \langle p_x \rangle)^2 \rho_{\text{mom}}(p_x) dp_x = \frac{a_0}{\hbar} \int_{\mathbb{R}} (p_x - \hbar k_0)^2 e^{-2a_0|p_x - \hbar k_0|/\hbar} dp_x$$

y haciendo el cambio de variable $p_x \rightarrow u = 2a_0(p_x - \hbar k_0)/\hbar$ y usando la ayuda

$$\Delta p_x = \frac{\hbar}{2\sqrt{2}a_0} \left(\int_{\mathbb{R}} u^2 e^{-|u|} du \right)^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{a_0}.$$

El producto de las incertidumbres de la posición y el momento lineal es

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}$$

que resulta ser independiente de a_0 . Los valores pequeños de a_0 corresponden entonces a un estado cuántico en el que la posición está bastante bien definida pero en el que el momento lineal tiene una incertidumbre grande. Si $a_0 \gg 0$ tendríamos la situación contraria: momento lineal bien definido y posición con una incertidumbre acusada. Esta relación entre las incertidumbres de la posición y el momento lineal ilustra claramente el principio de Heisenberg, que veremos un par de secciones más adelante.

e) En general, si $|x| \ll a_0$, la función de onda puede aproximarse por

$$\Psi(x) \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi a_0}} e^{ik_0 x} \quad \text{si } |x| \ll a_0$$

que es la función de De Broglie en una dimensión correspondiente a un momento lineal $p_x = \hbar k_0$. A medida que aumenta el valor de a_0 , la anterior aproximación es válida en una región cada vez más grande del espacio. Como hemos visto en el apartado anterior, $a_0 \gg 0$ corresponde a un estado con momento lineal $\hbar k_0$ muy bien definido y, como acabamos de comprobar, su función de onda tiende entonces a parecerse a la función de De Broglie $\theta_0 \exp(i k_0 x)$.

Por el contrario, la función de onda se anula si $|x|/a_0 \gg 0$. Así, si $\Delta x = a_0 \rightarrow 0$, $\Psi(x)$ tiende a concentrarse en una región de anchura cada vez menor alrededor del origen.

3.5. DIFRACCIÓN DE PARTÍCULAS

§ 1. Una vez establecida la interpretación básica de la función de onda, ya podemos analizar algunos fenómenos de interferencia y difracción que se

observan en haces de partículas materiales. Sin embargo, todavía no sabemos cómo evoluciona en el tiempo la función de onda de una partícula. Nuestra única herramienta será, además de los principios de superposición y de De Broglie, el de Huygens-Fresnel¹⁶ (aplicado no a una onda EM sino a una onda de materia).

Consideremos entonces la misma situación general del epígrafe §1.6.1, pero sustituyendo la radiación EM por un haz de partículas materiales. En concreto, pensemos en un conjunto de partículas con momento $\mathbf{p}_{\text{in}} = p_0 \mathbf{u}_y$ que inciden contra una lámina A, situada en el plano $y = 0$, en la que se ha practicado una abertura \mathcal{S} de forma arbitraria y centrada en el origen. En la región $y < 0$ (antes de impactar contra A) la función de onda de una partícula será

$$\Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}, t) = \Psi_0 e^{i(ky - \omega t)}, \quad \text{con} \quad \begin{cases} k = p_0/\hbar \\ \omega = E/\hbar = p_0^2/(2m\hbar). \end{cases} \quad (3.24)$$

De acuerdo con el principio de Huygens-Fresnel, la onda en $y > 0$ es la superposición de ondas esféricas secundarias emitidas desde todos los puntos de la abertura. Razonando de idéntica manera a como hicimos en §1.6.2, la onda difractada será

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{k\Psi_0 e^{-i\omega t}}{2\pi i} \int_{\mathcal{S}} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^2\mathbf{r}' \quad \text{si } y \gg \lambda \quad (3.25)$$

Si la abertura fuese una rendija de longitud ℓ y anchura b muy pequeña situada a lo largo del eje X de la lámina A, el resultado es la onda cilíndrica

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{e^{-i\pi/4} kb}{\sqrt{2\pi}} \frac{\Psi_0 e^{i(kr - \omega t)}}{\sqrt{kr}} \equiv \mathcal{C} \frac{e^{i(kr - \omega t)}}{\sqrt{kr}} \quad \text{si } \ell \gg y \gg \lambda, \quad (3.26)$$

donde $r = (y^2 + z^2)^{1/2}$ es la distancia entre el punto \mathbf{r} y la rendija.

§ 2. A partir de estas expresiones podemos explicar más cuantitativamente los datos experimentales del experimento de la doble rendija de Young que vimos en la sección 3.1. Cuando *una* partícula incide contra la lámina A con las *dos* rendijas abiertas, el cambio en su función de onda puede verse como el resultado de la difracción de la onda de materia (3.24) al atravesar simultáneamente las

¹⁶ Si aplicamos el principio de Huygens estamos suponiendo que la evolución del estado cuántico va a estar regida por una ecuación de ondas. Esta es la ecuación de Schrödinger, que estudiaremos en el capítulo 6.

dos rendijas. La densidad de impactos en la pantalla B será así proporcional a la probabilidad de detección de una partícula y, por tanto, al cuadrado del módulo de la función de onda difractada al llegar a la pantalla B.

Dado que en el experimento de Young de la **FIG. 3-1** cada rendija actúa como el foco de una onda cilíndrica, los valores de estas dos ondas sobre la pantalla B (situada en el plano $x = L$) son

$$\Psi_1(z, t) = \frac{Ce^{ikr_1}}{\sqrt{kr_1}} e^{-i\omega t} ; \quad \Psi_2(z, t) = \frac{Ce^{ikr_2}}{\sqrt{kr_2}} e^{-i\omega t} \quad \text{con} \quad \begin{cases} r_1 = \sqrt{L^2 + (z - \frac{D}{2})^2} \\ r_2 = \sqrt{L^2 + (z + \frac{D}{2})^2} \end{cases}$$

donde hemos usado la expresión (3.26). La función de onda resultante será entonces la superposición $\Psi_{\text{tot}} = \Psi_1 + \Psi_2$, y la densidad de impactos en la pantalla, $I_{\text{tot}}(z)$, será proporcional a $|\Psi_1 + \Psi_2|^2$. Desarrollando el cuadrado del módulo

$$I_{\text{tot}}(z) \propto |\Psi_{\text{tot}}(z, t)|^2 = |\Psi_1(z, t)|^2 + |\Psi_2(z, t)|^2 + 2\Re(\Psi_1^*(z, t)\Psi_2(z, t)). \quad (3.27)$$

Así, $I_{\text{tot}}(z)$ exhibe claros máximos y mínimos resultado de las interferencias constructivas y destructivas en los puntos de la pantalla debidas a la *superposición coherente* de las ondas procedentes de cada una de las rendijas.

Si $L \gg D$ podríamos proceder tal y como hicimos en el epígrafe **§1.6.3** y comprobaríamos que los impactos se distribuyen formando franjas muy nítidas cuyos centros están separados una distancia Δ dada por

$$\Delta = \frac{\lambda L}{D} = \frac{hL}{p_0 D}. \quad (3.28)$$

Aquí $h = 2\pi\hbar$ es la constante de Planck, $\lambda = 2\pi/k$ la longitud de onda de De Broglie de las partículas incidentes y p_0 el módulo del momento lineal de las partículas incidentes.

§ 3. Cuando en un segundo experimento de Young tapamos una de las dos rendijas, la función de onda se difracta únicamente por la otra. La función de onda en la región $y > 0$ será así

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \begin{cases} \Psi_1(\mathbf{r}, t) & \text{si tapamos la rendija inferior} \\ \Psi_2(\mathbf{r}, t) & \text{si tapamos la rendija superior} \end{cases}$$

Por consiguiente, la intensidad de la onda en la pantalla B será bien $|\Psi_1(z, t)|^2$ o bien $|\Psi_2(z, t)|^2$. Si acumulamos los impactos, tapando la mitad de las veces

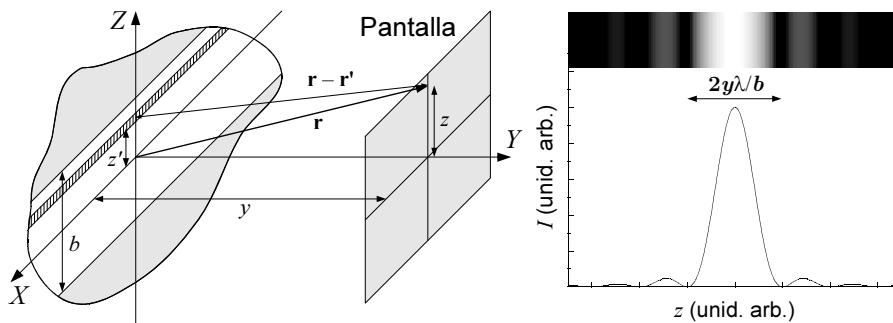


Figura 3-5. Difracción de una onda plana por una rendija infinitamente larga de anchura finita b . El patrón de difracción representado en el panel derecho corresponde al régimen de Fraunhofer $y \gg kb^2$

una rendija y la otra mitad la otra, la densidad de impactos en la pantalla B es proporcional a una *suma incoherente*:

$$I_{\text{tot}}(z) \propto |\Psi_1(z, t)|^2 + |\Psi_2(z, t)|^2 \quad (3.29)$$

que sería lo observado en el segundo experimento. Nótese que en este caso *el comportamiento de la partícula es también cuántico* pero no se muestra tan dramáticamente como en el caso de las dos rendijas abiertas ya que ahora no hay fenómenos de interferencia.

§ 4. Estudiemos ahora la difracción por una única rendija *de anchura finita* b mucho mayor que la longitud de onda λ de la onda incidente. A tal fin, dividamos la rendija en pequeñas subrendijas de anchura dz' tal y como muestra la FIG. 3-5. Usando (3.26) tenemos que la contribución de cada subrendija a la función de onda difractada en un punto \mathbf{r} de la pantalla es

$$d\Psi(\mathbf{r}, t) = C \frac{e^{i(ks' - \omega t)}}{\sqrt{ks'}} dz' \quad \text{si } \ell \gg y \gg \lambda$$

donde

$$ks' = k\sqrt{y^2 + (z' - z)^2} = k\sqrt{r^2 - 2zz' + (z')^2} \quad \text{con } z' \in [-b/2, +b/2]$$

siendo $r = (y^2 + z^2)^{1/2}$ la distancia al eje central de la rendija. Para puntos muy alejados de la rendija ($y \gg b$), la cantidad $(z')^2 - 2zz'$ será siempre pequeña en comparación con y . Podemos así desarrollar en serie la raíz cuadrada de modo que

$$ks' \simeq kr - \frac{kzz'}{r} + \frac{k(z')^2}{2r}$$

y puesto que $|z'|$ toma a lo sumo el valor $b/2$, y r es mayor o igual que y , podemos despreciar el último término si

$$\frac{kb^2}{8y} \sim \frac{b^2}{\lambda y} \ll 1. \quad (3.30)$$

Esta condición define el llamado *régimen de difracción de Fraunhofer* en óptica. También podemos despreciar el término $-kzz'/r$ pero solo en el denominador de $d\Psi(\mathbf{r}, t)$; en la exponencial compleja del numerador hemos de ser más cuidadosos y preservarlo ya que contiene las diferencias de fase entre las distintas contribuciones procedentes de cada subrendija. Con todo ello

$$d\Psi(\mathbf{r}, t) \simeq \mathcal{C} \frac{e^{i(kr-\omega t)}}{\sqrt{kr}} e^{-ikzz'/r} dz'.$$

La función de onda difractada por toda la rendija será

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int_{-b/2}^{+b/2} d\Psi(\mathbf{r}, t) \simeq \mathcal{C} \frac{e^{i(kr-\omega t)}}{\sqrt{kr}} \int_{-b/2}^{+b/2} e^{-ikzz'/r} dz'.$$

La integral es inmediata, e introduciendo la función

$$\text{sinc } u = \frac{\sin u}{u}$$

tenemos que

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \simeq \mathcal{C} \frac{be^{i(kr-\omega t)}}{\sqrt{kr}} \text{sinc}\left(\frac{kbz}{2r}\right). \quad (3.31)$$

Entonces, la densidad de impactos sobre una pantalla a una distancia y de la rendija será proporcional a $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$:

$$I(\mathbf{r}) \propto \frac{1}{r} \text{sinc}^2\left(\frac{kbz}{2r}\right) = \frac{1}{r} \text{sinc}^2\left(\frac{\pi bz}{\lambda r}\right) \quad \text{con } r = \sqrt{y^2 + z^2}. \quad (3.32)$$

Podemos simplificar algo más esta expresión. La función $\text{sinc } u$ se anula para valores del argumento múltiplos enteros de π (excepto para $u = 0$ donde toma el valor 1) y sólo toma valores apreciables en el intervalo $[-\pi, \pi]$. Entonces, la densidad de impactos se concentrará en una franja central de anchura $2\lambda r/b$.

Como hemos supuesto que $b \gg \lambda$, esta anchura es mucho menor que r y podemos aproximar sin mayor problema r por y en (3.32). En definitiva,

$$I(\mathbf{r}) \propto \frac{1}{y} \operatorname{sinc}^2\left(\frac{\pi b z}{\lambda y}\right) \quad \text{si} \quad \begin{cases} \ell \gg y \gg \lambda \\ y \gg b^2/\lambda \gg b \end{cases} \quad (3.33)$$

que es el resultado presentado en el panel derecho de la **FIG. 3-5**, donde se puede apreciar que la franja principal de impactos de anchura $\Delta_{\text{imp}} \simeq 2y\lambda/b$ está rodeada de otras con una intensidad mucho menor.

- Analicemos ahora el resultado. Cuando una partícula llega a la rendija, está en un estado en el que el momento lineal es

$$\mathbf{p}_{\text{in}} \simeq p_0 \mathbf{u}_y \quad ; \quad \text{con } p_0 = h/\lambda.$$

Nada más atravesar la rendija, la coordenada z_{out} de la posición de la partícula está contenida en el intervalo $(-b/2, +b/2)$; es decir, $z_{\text{out}} \in (-b/2, +b/2)$ y la partícula queda preparada en un nuevo estado cuántico: aquel en el que si midiésemos la coordenada z justamente a la salida de la rendija obtendríamos valores únicamente dentro del intervalo $(-b/2, +b/2)$.

Si esa partícula termina impactando en un punto de coordenada z de la pantalla, eso quiere decir que al atravesar la rendija se ha desviado un ángulo α dado por

$$\sin \alpha = \frac{z}{\sqrt{z^2 + y^2}} \simeq \frac{z}{y}$$

ya que sólo se contabilizan impactos para $|z| \ll y$. Como estamos suponiendo que la partícula mantiene su energía cinética constante en el proceso, el momento lineal a la salida de la rendija es

$$\mathbf{p}_{\text{out}} \simeq (p_0 \cos \alpha) \mathbf{u}_y + (p_0 \sin \alpha) \mathbf{u}_z \simeq p_0 \mathbf{u}_y + \frac{p_0 z}{y} \mathbf{u}_z$$

pero como la mayoría de los impactos se producen si $|z| \leq \Delta_{\text{imp}}/2 \simeq y\lambda/b$ podemos inferir que

$$\mathbf{p}_{\text{out}} \simeq p_0 \mathbf{u}_y + p_z \mathbf{u}_z \quad \text{con} \quad p_z \in \left(-\frac{p_0 \lambda}{b}, +\frac{p_0 \lambda}{b}\right) = \left(-\frac{h}{b}, +\frac{h}{b}\right).$$

De este modo, una medida de la componente z del momento lineal de la partícula en el nuevo estado cuántico daría resultados dentro del rango $(-h/b, +h/b)$.

Podemos entonces decir que en el estado cuántico así preparado, el resultado de una medida de z (a la salida de la rendija) es en promedio 0 pero con una incertidumbre $\Delta z \sim b/2$. En este mismo estado, una medida de p_z daría también cero en promedio pero con una incertidumbre $\Delta p_z \sim h/b$. Ambas incertidumbres no son independientes, ya que

$$\Delta z \Delta p_z \sim \frac{h}{2}.$$

Como conclusión: si deseamos preparar una partícula en un estado con el valor de su coordenada z muy bien definido,¹⁷ el estado cuántico resultante exhibe un valor muy poco definido para la componente z del momento lineal (y viceversa).

Al igual que el análisis de la función de onda lorentziana realizado en el **ejemplo 3.c**, este experimento ilustra cuantitativamente el principio de incertidumbre de Heisenberg. La “indefinición” o incertidumbre en los valores que se obtendrían en una medida de la componente z de la posición y multiplicada por la incertidumbre correspondiente a una medida de la componente z del momento lineal es, como mínimo, del orden de la constante de Planck.

§ 5. Cuando se estudia un experimento real de doble rendija deberemos tener en cuenta tanto los efectos de interferencia entre las ondas de materia procedentes de cada rendija como las correcciones debidas a la anchura finita de cada rendija. Este análisis más detallado es el que proponemos en el siguiente ejemplo.

EJEMPLO 3.d. (*) *El experimento de doble rendija de Zeilinger*

En un experimento de Anton Zeilinger y colaboradores [Rev. Mod. Phys. **60**, 1067 (1988)] se hicieron incidir un haz de neutrones fríos con una longitud de onda $\lambda = 18,5 \text{ \AA}$ sobre un dispositivo de doble rendija (véase la **FIG. 3-6**). Las rendijas tienen una anchura $b = 22 \mu\text{m}$ y sus centros están separados una distancia $D = 128 \mu\text{m}$. La pantalla de observación está situada a una distancia $y = 5 \text{ m}$.

- a) ¿Cuál es la velocidad de los neutrones? ¿A qué temperatura se generaron?
- b) Si despreciamos la anchura de las rendijas, ¿cuál será la separación entre los centros de las franjas de interferencia que se observarán en la pantalla B? Compare el resultado con el experimental.
- c) Obtenga la densidad de impactos que se observa en la pantalla.

Solución:

¹⁷ Esto significa que la anchura b es pequeña

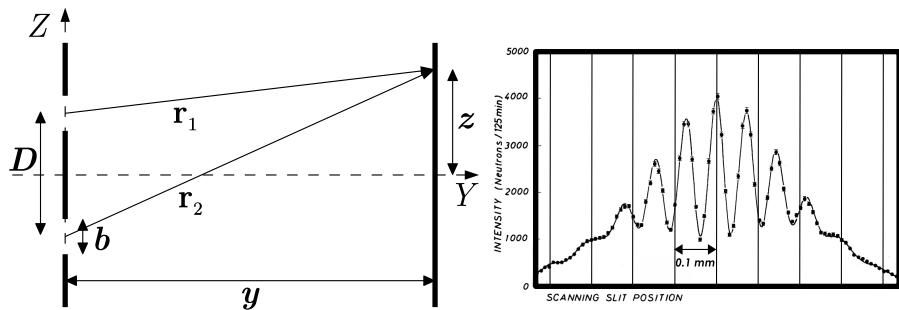


Figura 3-6. Representación esquemática del experimento de doble rendija de Zeilinger *et al.* A la derecha se muestra el patrón de difracción en el que la distancia entre máximos es de 0.07 mm aproximadamente

a) La velocidad de los neutrones será

$$v = \frac{p}{m_n} = \frac{\hbar}{\lambda m_n} = \frac{6,63 \times 10^{-34}}{18,5 \times 10^{-10} \cdot 1,67 \times 10^{-27}} \simeq 215 \text{ m/s}$$

La temperatura a la que están generados se puede estimar igualando la energía térmica del teorema clásico de equipartición $(3/2)k_B T$ con $p^2/(2m_n)$, lo que lleva a que

$$T = \frac{p^2}{3k_B m_n} = \frac{\hbar^2}{3\lambda^2 k_B m_n} = \left(\frac{hc}{\lambda}\right)^2 \frac{1}{3m_n c^2 k_B} \simeq 1,75 \text{ K}$$

(de ahí el nombre de neutrones fríos).

b) Usando directamente (3.28)

$$\Delta_0 = \frac{\lambda y}{D} = \frac{1,85 \times 10^{-9} \cdot 5}{128 \times 10^{-6}} \text{ m} \simeq 0,072 \text{ mm}$$

que está de acuerdo con el valor experimental (vea el pie de la FIG. 3-6).

c) Como $b^2/\lambda = 0,26 \text{ m}$, valor sustancialmente menor que $y = 5 \text{ m}$, podemos usar (3.31) para evaluar la onda difractada por cada rendija aunque sin olvidar que están desplazadas del eje OX. A su vez, la figura de difracción está localizada en una región de tamaño milimétrico en torno a $z = 0$ por lo que podemos hacer $r \simeq y$ en (3.31) excepto, naturalmente, en la exponencial compleja. Por el principio de superposición, la función de onda en la pantalla es

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \simeq \mathcal{C} e^{-i\omega t} \left[e^{ikr_1} \text{sinc} \frac{kb(z - \frac{D}{2})}{2y} + e^{ikr_2} \text{sinc} \frac{kb(z + \frac{D}{2})}{2y} \right]$$

siendo \mathcal{C} una cierta constante. Los valores de r_1 y r_2 son

$$r_1 = \sqrt{y^2 + \left(z - \frac{D}{2}\right)^2} \simeq \sqrt{y^2 - Dz} \quad ; \quad r_2 = \sqrt{y^2 + \left(z + \frac{D}{2}\right)^2} \simeq \sqrt{y^2 + Dz},$$

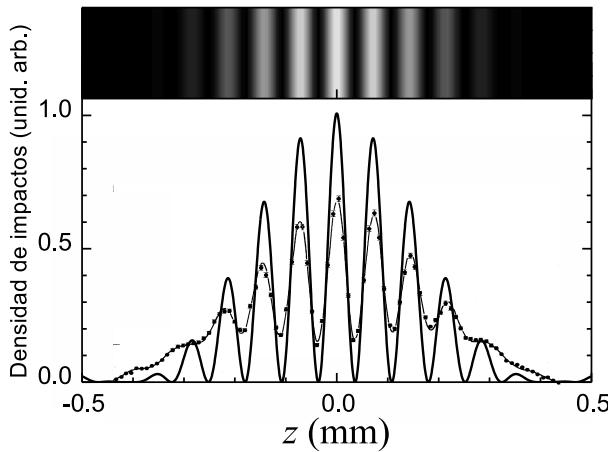


Figura 3-7. Comparación entre la densidad teórica de impactos obtenida en el [ejemplo 3.d](#) (línea continua) y los resultados experimentales de Zeilinger (línea con puntos)

cumpliéndose que $r_2 - r_1 \simeq Dz/y$. La anchura de cada función sinc es $z_0 = 2y\lambda/b \simeq 0,84$ mm, estando desplazadas respecto de $z = 0$ una distancia $D/2 = 0,063$ mm. No es entonces una mala aproximación despreciar los términos $\pm D/2$ en sus argumentos, por lo que

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \simeq C e^{-i\omega t} (e^{ikr_1} + e^{ikr_2}) \operatorname{sinc}\left(\frac{k bz}{2y}\right).$$

Así, la densidad de impactos será

$$I(z) \propto |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \propto |e^{ikr_1} + e^{ikr_2}|^2 \operatorname{sinc}^2\left(\frac{2\pi z}{z_0}\right) = 4 \cos^2\left[\frac{k(r_2 - r_1)}{2}\right] \operatorname{sinc}^2\left(\frac{k bz}{2y}\right)$$

y usando $r_2 - r_1 \simeq Dz/y$ y $k = 2\pi/\lambda$ queda

$$I(z) \propto \cos^2\left(\frac{\pi Dz}{\lambda y}\right) \operatorname{sinc}^2\left(\frac{\pi bz}{\lambda y}\right) = \cos^2\left(\frac{\pi z}{\Delta_0}\right) \operatorname{sinc}^2\left(\frac{2\pi z}{z_0}\right)$$

Este resultado corresponde al patrón de interferencia en el límite de rendijas de anchura despreciable pero multiplicado por una función sinc que, como ya hemos visto, es característica de la rendija de anchura finita. Como puede apreciar en la **FIG. 3-7** hay un acuerdo bastante bueno entre el resultado teórico y el experimental. Sin embargo, en este último las interferencias, tanto constructivas como destructivas, son menos intensas en la región central y, además, las franjas exteriores apenas están definidas.

Estas discrepancias pueden explicarse si consideramos que: (i) no todas las partículas inciden perpendicularmente contra la lámina difractora; (ii) no todas las partículas tienen igual energía. En realidad el haz incidente es una mezcla incoherente de neutrones, cada uno de ellos con un momento lineal razonablemente bien definido pero cuyo valor se

distribuyen de manera aleatoria alrededor de $\mathbf{p}_0 = m_n v_0 \mathbf{u}_y$, donde $v_0 = 215$ m/s. Evidentemente cada partícula tiene una inevitable incertidumbre “cuántica”, pero los neutrones proceden de un repositorio a ultrabaja temperatura en el que sus velocidades tienen una dispersión estadística puramente clásica. Aunque en el experimento se coliman las partículas para reducirla al máximo, esta dispersión es técnicamente imposible eliminarla del todo. Así, si $I_{\mathbf{p}}(z)$ es la intensidad de la onda de De Broglie en la pantalla de observación correspondiente a una partícula que incide con momento \mathbf{p} , la intensidad total será la suma de intensidades parciales $I_{\mathbf{p}}(z)$ con valores de \mathbf{p} distribuidos en torno a \mathbf{p}_0 . Por lo general, las diferencias entre \mathbf{p} y \mathbf{p}_0 van a afectar más al término $\cos^2[\pi Dz/(\lambda y)]$ que a la función moduladora $\text{sinc}^2[kbz/(2y)]$, de modo que podemos considerar que esta última no se ve afectada y hacer la discusión únicamente en términos de las interferencias de Young.

Si la partícula incide con una pequeña desviación respecto de la normal entonces el centro del patrón de interferencia se desplaza (podrá comprobarlo en el **problema propuesto 3.5**). Al sumar intensidades cuyos perfiles son muy similares pero que están desplazadas entre sí el resultado es una atenuación de los máximos y mínimos relativos, que es el efecto más notorio que hemos observado al comparar la predicción teórica y el resultado experimental.

Por otro lado, pequeñas variaciones de $|\mathbf{p}|$ apenas afectan al patrón de interferencia cerca de $z = 0$, pero a medida que nos alejamos del centro las diferencias son importantes. Como consecuencia, al realizar una suma sobre intensidades parciales las franjas centrales apenas cambian, pero las exteriores se difuminan, efecto que es el que observamos en la **FIG. 3-7**.

3.6. EL PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE DE HEISENBERG

§ 1. Es evidente que el principio de incertidumbre de Heisenberg, que esbozamos en la **sección 3.1**, y la interpretación probabilística de la función de onda están íntimamente ligados. Si es imposible preparar una partícula en un estado en el que, simultáneamente, las incertidumbres de la posición y el momento lineal sean arbitrariamente pequeñas, no puede haber garantía alguna de que podamos predecir exactamente cuál es el resultado de la medida de una magnitud mecánica.

Esta relación puede también verse si tomamos el ejemplo de la difracción de partículas al atravesar una rendija. El análisis que hicimos de los resultados obtenidos a partir del postulado de De Broglie y de la interpretación probabilística nos llevó a concluir que era imposible preparar la partícula en un estado en el que simultáneamente z y p_z estuviesen bien definidos. Este experimento se ha realizado en los laboratorios repetidas veces y, además, hay otros fenómenos de difracción

de partículas más complicados que los vistos hasta ahora que llevan a la misma conclusión: *no es posible preparar una partícula en un estado cuántico en el que la posición y el momento lineal estén completamente definidos.*

§ 2. Podemos dar un resultado más cuantitativo. En el **ejemplo 3.c** vimos que en una función de onda plana modulada por una lorentziana se cumplía que

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar.$$

Si en lugar de usar una lorentziana como función de modulación utilizamos una gaussiana, en el **ejemplo 3.e** veremos que el producto de las incertidumbres de x y p_x toma un valor ligeramente inferior:

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{1}{2} \hbar.$$

De hecho esta última igualdad es una *cota inferior estricta* al producto de las incertidumbres de una coordenada de la posición y de la correspondiente del momento en el supuesto de que las propiedades de la posición se infieran de una función $\Psi(\mathbf{r}, t)$ y las del momento de la transformada de Fourier $\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)$.¹⁸ Esta acotación del producto de las incertidumbre de x y p_x (y de (y, p_y) y (z, p_z)) refleja una propiedad matemática cualitativa: la transformada de Fourier de una función muy localizada en una representación (posiciones o momentos) está muy extendida en la otra (momentos o posiciones).

Finalmente, pensemos en la siguiente función de onda de una partícula que se mueve en tres dimensiones:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \mathcal{A} \frac{e^{ik_x x}}{(x/a_x)^2 + 1} \frac{e^{ik_y y}}{(y/a_y)^2 + 1} \frac{e^{ik_z z}}{(z/a_z)^2 + 1},$$

donde \mathcal{A} es una constante de normalización. $\Psi(\mathbf{r})$ es el producto de tres funciones dependientes de cada una de las variables espaciales. Podemos así calcular las incertidumbres de las coordenadas de la posición y del momento lineal separadamente. Aplicando directamente los resultados del **ejemplo 3.c**:

$$\begin{aligned} \Delta x &= a_x & \Delta y &= a_y & \Delta z &= a_z \\ \Delta p_x &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}a_x} & \Delta p_y &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}a_y} & \Delta p_z &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}a_z}. \end{aligned}$$

¹⁸ La demostración es algo técnica, pero debido a su importancia la veremos más adelante.

No hay entonces ninguna restricción a los valores de las incertidumbres de una coordenada de la posición y de una coordenada *distinta* del momento lineal. Por ejemplo, si $a_x \sim 0$ y $a_y \gg 0$ se tiene que $\Delta x \Delta p_y \sim 0$. Hay entonces estados cuánticos en los que la coordenada x de la posición y la coordenada y del momento lineal pueden estar simultánea y arbitrariamente bien definidas.

§ 3. Tras esta discusión ya estamos en disposición de enunciar *el principio de incertidumbre de Heisenberg*:

Es imposible preparar una partícula puntual en un estado cuántico en el que una coordenada de la posición y la correspondiente del momento lineal estén simultáneamente definidas a voluntad.

En concreto, el producto de las incertidumbres respectivas está acotado inferiormente de acuerdo con las siguientes **desigualdades de Heisenberg**:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} ; \quad \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} ; \quad \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2} .$$

Tales restricciones no se aplican ni a dos coordenadas de la posición, ni a dos del momento, ni a componentes perpendiculares entre sí de la posición y del momento.

Tal y como hemos razonado, pudiera parecer que el principio de incertidumbre es una mera consecuencia de la interpretación probabilística. En rigor es al revés. En efecto, el postulado de De Broglie afirma que $|\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)|^2$ proporciona la información relativa a medidas del momento lineal y, como recordará, *supusimos entonces* que lo mismo debería ocurrir con $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ pero para medidas de la posición. En realidad esta correspondencia es *obligada* al ser la única posible que garantiza el cumplimiento del principio de Heisenberg. Que las representaciones en posiciones y en momentos estén ligadas entre sí mediante transformadas de Fourier es la “traducción” matemática del principio de incertidumbre.

§ 4. En las secciones 3.1 y 3.5 vimos que se puede hacer una preparación mediante una medida filtrante, cuyo resultado nos permite saber cómo es el estado cuántico finalizada la medición. Se tiene así que el principio de Heisenberg implica que *es imposible medir simultáneamente y con precisión arbitraria la posición y el momento lineal de una partícula*. Si esto fuera factible podríamos diseñar un método de preparación que resultase en un estado de la partícula en el que $\Delta \mathbf{r}$ y $\Delta \mathbf{p}$ fuesen a la vez tan pequeños como se deseé.

§ 5. Usando una terminología acuñada en la década de los años veinte del siglo pasado por Niels Bohr se dice que cada una de las parejas $\{x, p_x\}$, $\{y, p_y\}$, $\{z, p_z\}$ son **magnitudes físicas complementarias**, entendidas como tales aquellas para las que no es posible encontrar un estado cuántico en el que sus valores estén simultáneamente definidos.¹⁹

La célebre *dualidad onda-corpúsculo* debe entonces entenderse a la luz de la complementariedad entre posición y momento. La distribución de probabilidad en la medida de la posición de una partícula puntual será básicamente corpuscular si su función de onda $\Psi(\mathbf{r})$ está localizada en una pequeña región del espacio. Por el contrario, si en un instante dado la partícula está en un estado en el que el momento lineal tiene un valor \mathbf{p}_0 muy bien definido entonces la función de onda será muy parecida a la onda plana de De Broglie, proporcional a $\exp(i\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{r}/\hbar)$. Esta función estará muy extendida en el espacio y las distribuciones de probabilidad en las medidas de la posición exhibirán propiedades típicamente ondulatorias, tales como las franjas de impactos en el dispositivo de Young.

Otra manera de entender esta dualidad es la siguiente: al medir la posición de una partícula exploramos sus propiedades corpusculares pero si medimos su momento lineal obtenemos información sobre sus propiedades ondulatorias. Ambas están relacionadas entre sí pero nunca pueden manifestarse simultáneamente ya que las medidas arbitrariamente precisas y simultáneas de la posición y del momento están vetadas por la naturaleza.²⁰

§ 6. Las consecuencias epistemológicas del principio de incertidumbre son de gran trascendencia. Admitamos que la física cuántica *es* la descripción última de los sistemas físicos o, mejor dicho, de las propiedades de los sistemas físicos que podemos observar experimentalmente. Tenemos entonces que el conocimiento de

¹⁹ Niels Bohr (1885-1962), quien ya había sido galardonado con el premio Nobel de física en 1922 por su famoso modelo atómico, tuvo un papel menor en el desarrollo formal de la mecánica cuántica en comparación con el de Erwin Schrödinger, Werner Heisenberg, Max Born, Pascual Jordan, Wolfgang Pauli o P.A.M. Dirac, entre otros. Sin embargo sus contribuciones a la interpretación de la nueva teoría como un todo conceptualmente consistente fueron esenciales, al igual que su liderazgo en la divulgación de la mecánica cuántica entre otros científicos. Cuando Heisenberg publicó en 1927 su artículo sobre el principio de incertidumbre era asistente de Bohr en Copenhague, lugar que se convirtió en la referencia de la “nueva física”. Tanto es así que se denomina **interpretación de Copenhague** a la que es comúnmente admitida en mecánica cuántica. Ésta es la que estamos siguiendo en este texto, aunque con una terminología algo más contemporánea.

²⁰ En cualquier caso no olvide el carácter instrumental de la función de onda como “repositorio” de información: esta discusión en modo alguno permite afirmar que la partícula, sea un electrón o un fotón, tenga una *naturaleza* dual: la partícula *es* una partícula y las leyes cuánticas de evolución se plantearán en consecuencia.

la naturaleza tiene un límite, ya que habrá aspectos que son inaccesibles a la observación experimental.

Grandes científicos como Planck, De Broglie, Schrödinger y Einstein rechazaron de plano esta idea. Einstein asumió el liderazgo en la defensa de la visión *clásica* de la física y sus debates con Niels Bohr alcanzaron dimensiones intelectualmente épicas. Einstein salió “vencido pero no convencido” porque de esos debates resultó evidente que, en efecto, no era posible una medición *directa* y simultánea con precisión arbitraria de la posición y el momento de una partícula. Sin embargo eso no cerraba la puerta a posibles medidas *indirectas* que pudieran desvelar los valores de *variables ocultas* que definirían sin ambigüedad el estado físico de una partícula, determinando completamente su evolución posterior. Décadas después, gracias a los trabajos teóricos de John S. Bell y a experimentos pioneros como los de Alain Aspect, se pudo comprobar que tales medidas indirectas tampoco eran posibles.

EJEMPLO 3.e. La función de onda gaussiana

En un instante dado de tiempo t , que por simplicidad omitiremos en las expresiones, el estado cuántico de una partícula de masa M sin espín que se mueve en una dimensión espacial está dado por la función de onda normalizada

$$\Phi(x) = \frac{e^{ik_0 x}}{(\pi a^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(x - x_0)^2}{2a^2}\right].$$

donde x_0 , k_0 y a son reales y, además, $a > 0$. La función $\Phi(x)$ es una onda De Broglie (excluida su dependencia temporal) modulada por una gaussiana centrada en el punto $x = x_0$.

- a) Evalúe el valor medio y la incertidumbre de la posición de la partícula.
- b) Halle la representación en momentos $\tilde{\Phi}(p_x)$.
- c) Calcule el valor medio y la incertidumbre del momento lineal.
- d) Evalúe el producto $\Delta x \Delta p_x$ y compruebe que se satura la desigualdad de Heisenberg.

Ayudas: $\int_{\mathbb{R}} e^{-u^2} du = \sqrt{\pi}$; $\int_{\mathbb{R}} u^2 e^{-u^2} du = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$; $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-u^2/2} e^{-i\kappa u} du = e^{-\kappa^2/2}$

Solución:

- a) El procedimiento para resolver este ejemplo es prácticamente idéntico al empleado en el **ejemplo 3.c**, por lo que omitiremos muchos pasos intermedios. La densidad de probabilidad para posiciones es

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}a} e^{-(x-x_0)^2/a^2}$$

que es una función distribuida simétricamente en torno a x_0 . Por tanto

$$\langle x \rangle = x_0$$

A su vez, la incertidumbre puede escribirse como

$$\Delta x = [\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2]^{1/2} = [\langle x^2 \rangle - 2x_0\langle x \rangle + 2x_0\langle x \rangle - \langle x \rangle^2]^{1/2}$$

y ya que $\langle x \rangle = x_0$, tenemos que

$$\Delta x = [\langle x^2 \rangle - 2x_0\langle x \rangle + x_0^2]^{1/2} = \langle (x - x_0)^2 \rangle^{1/2}.$$

Haciendo el cambio $x \rightarrow u = (x - x_0)/a$ obtenemos inmediatamente que

$$\Delta x = \left[\int_{\mathbb{R}} (x - x_0)^2 \rho(x) dx \right]^{1/2} = \dots = a \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 e^{-u^2} du \right]^{1/2} = \frac{a}{\sqrt{2}}.$$

La densidad de probabilidad gaussiana puede así escribirse como

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}(\Delta x)} \exp \left[-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2(\Delta x)^2} \right], \quad (3.34)$$

resultado bien conocido de la estadística matemática elemental.

b) Haciendo de nuevo el cambio $x \rightarrow u = (x - x_0)/a$

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}(p_x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\hbar} \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{e^{ik_0 x}}{(\pi a^2)^{1/4}} \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{2a^2} \right] \right) e^{-ip_x x/\hbar} dx = \dots \\ &\dots = \frac{(a^2/\pi)^{1/4} e^{-i(p_x - \hbar k_0)x_0/\hbar}}{\sqrt{2\pi}\hbar} \int_{\mathbb{R}} e^{-u^2/2} e^{-ia(p_x - \hbar k_0)u/\hbar} du \end{aligned}$$

y usando la ayuda y operando

$$\tilde{\Phi}(p_x) = \frac{e^{-i(p_x - \hbar k_0)x_0/\hbar}}{(\pi\hbar^2/a^2)^{1/4}} \exp \left[-\frac{a^2(p_x - \hbar k_0)^2}{2\hbar^2} \right]$$

(otra función gaussiana).

c) La densidad de probabilidad en momentos es

$$\rho_{\text{mom}}(p_x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\hbar/a} \exp \left[-\frac{(p_x - \hbar k_0)^2}{(\hbar/a)^2} \right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}[\hbar/(\sqrt{2}a)]} \exp \left[-\frac{(p_x - \hbar k_0)^2}{2[\hbar/(\sqrt{2}a)]^2} \right].$$

Observe que la transformada de Fourier de una gaussiana es otra gaussiana. Así, simplemente comparando con (3.34)

$$\langle p_x \rangle = \hbar k_0 \quad ; \quad \Delta p_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}a}.$$

d) Directamente,

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{1}{2}\hbar,$$

por lo que vemos que se satura la desigualdad de Heisenberg.

PROBLEMAS PROPUESTOS

PROBLEMA 3.1. *Onda de De Broglie para una partícula relativista*

Una partícula relativista de masa en reposo M_0 se mueve libremente con momento lineal \mathbf{p} . Obtenga su longitud de onda de De Broglie $\lambda = \hbar/|\mathbf{p}|$ y demuestre la relación de dispersión relativista $\omega = \sqrt{c^2|\mathbf{k}|^2 + \omega_0^2} - \omega_0$ con $\omega_0 = M_0 c^2/\hbar$, entre su frecuencia $\omega_k = E/\hbar$ y el módulo del vector de onda $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$.

Muestre que esta relación de dispersión tiende a $\omega = \hbar|\mathbf{k}|^2/(2M)$, que es la ecuación (3.7), en el límite no relativista.

PROBLEMA 3.2. *El término de degeneración*

Consideremos una muestra gaseosa de $N \gg 0$ partículas de masa M que se mueven libremente dentro de un recinto de volumen V . Si el gas está a temperatura T las partículas se mueven con una energía cinética característica que es del orden de la energía térmica $k_B T$. Demuestre que los efectos cuánticos son inapreciables si se cumple que

$$\Delta_{\text{deg}}(T) \ll 1, \quad \text{donde} \quad \Delta_{\text{deg}}(T) = \frac{\hbar^3 V}{(2Mk_B T)^{3/2} N}$$

es una cantidad adimensional denominada *término de degeneración* del gas.

PROBLEMA 3.3. *Ondas de De Broglie moduladas*

En un instante dado, la función de onda normalizada de una partícula que se mueve en el espacio es una función de De Broglie modulada de la forma

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})$$

donde $\Phi(\mathbf{r})$ es una función *real* salvo constante multiplicativa irrelevante que no depende de la posición. Demuestre que el valor medio del momento lineal es

$$\langle \mathbf{p} \rangle \equiv \langle p_x \rangle \mathbf{u}_x + \langle p_y \rangle \mathbf{u}_y + \langle p_z \rangle \mathbf{u}_z = \hbar \mathbf{k}_0$$

y que las incertidumbres de cada una de las componentes de \mathbf{p} dependen *exclusivamente* de la función $\Phi(\mathbf{r})$.

PROBLEMA 3.4. (*) *La red de difracción*

Un haz de partículas de momento lineal $\mathbf{p} = p_0 \mathbf{u}_y$ muy bien definido incide contra una lámina A dispuesta en el plano XZ en la hay $2N + 1$ rendijas muy estrechas orientadas en la dirección OY y separadas entre sí una distancia d . Supongamos que el haz incidente es lo suficientemente ancho como para admitir que el número de partículas que atraviesa cada rendija es el mismo. A una distancia $y_B \gg Nd$ situamos una pantalla B, paralela a la lámina A, que recoge los impactos individuales de las partículas que hayan atravesado

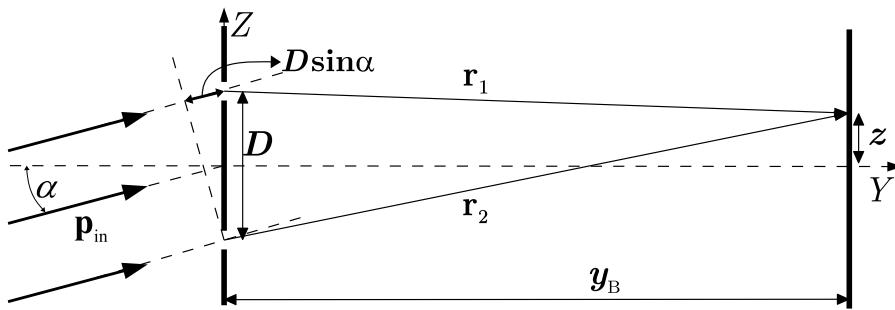


Figura 3-8. Esquema de un experimento de doble rendija en el que las partículas no inciden normalmente sobre la lámina difractora (**problema 3.5**)

las rendijas. Calcule la densidad de impactos sobre dicha pantalla suponiendo que $N \gg 1$. Discuta en detalle los casos:

- (i) $\lambda \ll b$,
- (ii) $\lambda \sim b$,
- (iii) $\lambda \gg b$,

donde λ es la longitud de onda De Broglie de las partículas.

$$\text{Ayuda: } \sum_{n=0}^{2N} e^{in\beta} = \frac{e^{i(2N+1)\beta} - 1}{e^{i\beta} - 1} = \frac{\sin[(N + \frac{1}{2})\beta]}{\sin(\frac{1}{2}\beta)} e^{iN\beta}.$$

PROBLEMA 3.5. (*) Incoherencia espacial e interferencias

Un haz de partículas con momento lineal \mathbf{p}_{in} muy bien definido incide contra una lámina A en la que hay dos rendijas muy estrechas separadas una distancia D . Las partículas no inciden normalmente, sino con una pequeña desviación de ángulo α respecto de dirección perpendicular a la lámina A (vea la **FIG 3-8**).

(a) Obtenga la densidad de impactos contra una pantalla de observación B situada a una distancia $y_B \gg D$ de la lámina A.

Supongamos ahora que todas las partículas del haz han sido preparadas en un estado en el que $\langle \mathbf{p} \rangle = p_0 \mathbf{u}_y$, pero en el que la componente z del momento lineal no está perfectamente bien definida. Para simplificar el tratamiento matemático consideremos que la función de onda en la representación en momentos de las partículas incidentes está dada aproximadamente por

$$\tilde{\Psi}_{in}(\mathbf{p}) e^{-i\omega t} \text{ con } \tilde{\Psi}_{in}(\mathbf{p}) = \begin{cases} \tilde{\Psi}_0 & \text{si } p_y = p_0, \quad p_x = 0, \quad p_z \in [-p_0 \sin \alpha, +p_0 \sin \alpha] \\ 0 & \text{en el resto de los casos} \end{cases}$$

siendo $\tilde{\Psi}_0$ una constante, $\omega = p_0^2 / (2m\hbar)$ y $\alpha = 0,2 \text{ rad} \simeq 11,5^\circ$.

(b)] Discuta la bondad de esta aproximación. ¿Cuál será la densidad de impactos en la pantalla B?

(c) Obtenga la densidad de impactos si el haz estuviese formado por una *mezcla incoherente* de partículas cada una con un momento lineal bien definido $\mathbf{p}_{\text{in}} = p_0 \mathbf{u}_y + p_z \mathbf{u}$, estando el valor de p_z distribuido uniformemente en el intervalo $[-p_0 \sin \alpha, +p_0 \sin \alpha]$. Compare el resultado con el obtenido en el apartado anterior.

Ayuda: Tenga en cuenta que el ángulo α es lo suficientemente pequeño como para que sean válidas las aproximaciones $\cos \alpha = 1$; $\sin \alpha = \alpha$; $\sin^2 \alpha \simeq 0$.

PROBLEMA 3.6. La desigualdad triangular

Consideremos dos funciones $\Psi(\mathbf{r})$ y $\Phi(\mathbf{r})$ de cuadrado integrable. A partir de la desigualdad de Schwarz demuestre la *desigualdad triangular*

$$\|\Psi + \Phi\| \leq \|\Psi\| + \|\Phi\| \quad (3.35)$$

Como consecuencia, pruebe que toda función de la forma

$$\vartheta(\mathbf{r}) = \alpha \Psi(\mathbf{r}) + \beta \Phi(\mathbf{r}) \quad \text{con } \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

es también de cuadrado integrable.

PROBLEMA 3.7. (!! Difracción de agregados

Se han observado fenómenos de difracción incluso para partículas tan grandes como los fullerenos C_{60} , agregados de 60 átomos de carbono con un diámetro del orden de 1 nm. En un experimento realizado por el grupo de Zeilinger se analizó la difracción de un haz de fullerenos C_{60} con velocidad de 220 m/s a través de un dispositivo de dos rendijas de anchura 50 nm y cuyos centros están a una distancia de 150 nm. Una vez difractado, las partículas del haz impactan contra una pantalla situada a 1.25 m de las rendijas.²¹

- a) Obtenga la longitud de onda De Broglie λ_f de cada fullereno y la separación entre máximos en la densidad de impactos recogidos en la pantalla.
- b) Como habrá comprobado, λ_f es sustancialmente menor que el tamaño del fullereno lo que sugiere considerar los efectos derivados de su estructura interna (en particular, la vibración de los núcleos de carbono alrededor de sus posiciones de equilibrio genera la emisión de fotones cuya energía es del orden de 0.1 eV). En principio, su detección permitiría conocer la posición del foco de emisión y, por tanto, la rendija por la que ha pasado el fullereno. Sin embargo, aunque dichos fotones se detecten la distribución de impactos en la pantalla no se ve afectada. Explique por qué.

Ayuda: evalúe la longitud de onda de estos fotones.

²¹ En realidad se utilizó una red de difracción, pero a efectos de la física del problema esto no es relevante.

PROBLEMA 3.8. (!!) *La energía del punto cero*

Una de las consecuencias más interesantes del principio de incertidumbre es la siguiente. Imagine una partícula no relativista de masa M que se mueve libremente en una dimensión pero confinada al intervalo $[-L/2, L/2]$. Clásicamente, los estados con energía mínima son aquellos para los que la partícula está en reposo en un punto cualquiera dentro del rango $[-L/2, L/2]$. Sin embargo, cuánticamente esto no es posible. A partir de la desigualdad de Heisenberg estime la energía mínima que puede tener la partícula, esto es, el menor resultado posible en una medida de su energía. Para ello pruebe previamente que las incertidumbres de la posición y el momento de la partícula en cualquier instante de tiempo han de cumplir necesariamente que $\Delta x \leq L/2$ y que $(\Delta p_x)^2 \leq \langle p_x^2 \rangle$. A esta energía mínima se la denomina *energía del punto cero* del sistema.

SEGUNDA PARTE

Mecánica Ondulatoria

TEMA 4

EL ESPACIO DE FUNCIONES DE ONDA

En el capítulo anterior hemos visto que el estado cuántico de una partícula se representa mediante una función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$. El objetivo de este capítulo es construir una estructura matemática abstracta, el espacio de las funciones de onda, en la que hay que construir una formulación *robusta* de las leyes de la física cuántica.

Iniciaremos el capítulo definiendo el producto escalar entre dos funciones de onda y estableciendo su significado físico como una forma de cuantificar la similitud entre dos estados cuánticos. Acto seguido comprobaremos que el conjunto de funciones de onda normalizables forma una estructura algebraica denominada *espacio de Hilbert*.

El espacio de Hilbert es un espacio lineal con una serie de propiedades topológicas específicas, que nos permitirán generalizar el familiar concepto matemático de base ortonormal del álgebra lineal. Estas bases, denominadas genéricamente de representación, son fundamentales en el desarrollo de la interpretación probabilística.

A continuación introduciremos los operadores lineales en el espacio de Hilbert de las funciones de onda y expondremos algunas de sus propiedades, señalando someramente cuál será su utilidad en el futuro.

Finalmente trataremos la construcción de espacios de Hilbert a partir del llamado producto tensorial de espacios más sencillos. Esta herramienta matemática es necesaria para tratar con propiedad sistemas físicos divisibles en varios subsistemas. Aprovecharemos la discusión para hablar del fenómeno del entrelazamiento cuántico.

Deberíamos usar rigurosamente las propiedades algebraicas de los espacios de Hilbert, pero debido a su dificultad “suavizaremos” algunos conceptos matemáticos que se exponen con algo más de detalle en el **Apéndice B**, cuya lectura es optativa pero recomendable.

Orientaciones generales al plan de trabajo

Unas **15 horas** de trabajo personal son necesarias para este capítulo. Hay más contenidos matemáticos que físicos, aunque los segundos no son desdeñables: la similitud entre estados descrita mediante un producto escalar y el entrelazamiento son conceptos capitales en la teoría cuántica. El lenguaje no será sencillo: herramientas como la teoría de Fourier y los espacios lineales complejos con producto escalar serán el entorno natural en el que nos moveremos. Aún así, bastantes resultados matemáticos son una generalización de ideas ya aprendidas en asignaturas de álgebra lineal.

Objetivos del capítulo

- Saber caracterizar la similitud entre estados cuánticos a través del producto escalar entre sus funciones de onda.
- Recordar las reglas operativas básicas del producto escalar.
- Familiarizarse con la descripción formal de los estados de una partícula en el marco de una estructura algebraica general: el espacio de Hilbert de las funciones de onda.
- Identificar las representaciones en posiciones, en momentos y algebraica como coordenadas de la función de onda en diferentes bases del espacio de las funciones de onda.
- Conocer propiedades básicas de los operadores lineales en un espacio de Hilbert.
- Realizar un primer contacto con la notación abstracta de Dirac.
- Entender el concepto de producto tensorial y su relación con el entrelazamiento cuántico.

4.1. SIMILITUD Y PRODUCTO ESCALAR

§ 1. Como vimos en el tema anterior, el *estado dinámico clásico* de una partícula se representa por un punto del llamado *espacio de las fases* $(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t))$ que define sin ambigüedad los valores de la posición y el momento lineal. Dos puntos distintos del espacio de las fases representan estados dinámicos de la partícula *diferentes* y, como resultado, dos estados clásicos o son el mismo o son diferentes.

En física cuántica la situación es otra. Si las funciones de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ y $\Phi(\mathbf{r}, t)$, de cuadrado integrable (o normalizables), representan sendos *estados físicos realizable*s de la partícula, la combinación lineal

$$\Theta(\mathbf{r}, t) = \alpha\Psi(\mathbf{r}, t) + \beta\Phi(\mathbf{r}, t) \quad \text{con } \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

también representa un estado realizable. Esto es debido al principio de superposición y, más formalmente, porque la *desigualdad triangular*

$$\|\Psi(\mathbf{r}, t) + \Phi(\mathbf{r}, t)\| \leq \|\Psi(\mathbf{r}, t)\| + \|\Phi(\mathbf{r}, t)\| \quad (4.1)$$

(cfr. el **problema propuesto 3.6**) garantiza que si $\Psi(\mathbf{r}, t)$ y $\Phi(\mathbf{r}, t)$ son de cuadrado integrable entonces $\Theta(\mathbf{r}, t)$ es también una función de cuadrado integrable.

El estado cuántico representado por $\Theta(\mathbf{r}, t)$ comparte algunas características de los estados $\Psi(\mathbf{r}, t)$ y $\Phi(\mathbf{r}, t)$, por lo que aunque podamos afirmar que $\Theta(\mathbf{r}, t)$ y $\Psi(\mathbf{r}, t)$ (o que $\Theta(\mathbf{r}, t)$ y $\Phi(\mathbf{r}, t)$) *no son físicamente iguales* no podemos asegurar a priori que sean *completamente distintos*. Esta aparente paradoja es el resultado de conjugar el principio de superposición y el carácter *clásicamente incompleto* de la información contenida en la función de onda. Es así esencial definir un *criterio de similitud* que cuantifique hasta qué punto dos estados cuánticos son iguales, parecidos o *completamente diferentes*.

§ 2. A tal fin definamos el *producto escalar* de dos funciones como

$$\langle \Psi | \Phi \rangle \equiv \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \quad (4.2)$$

Este producto está relacionado directamente con la norma $\|\Psi\|$, ecuación (3.18), de una función, pues tenemos que

$$\|\Psi\| = \sqrt{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (4.3)$$

Además, satisface todas las propiedades formales que dicta el álgebra lineal (vea la **TABLA 4-1**) y para funciones de cuadrado integrable toma un valor finito gracias a la desigualdad de Schwarz.

De acuerdo con el teorema de Parseval podemos evaluar $\langle \Psi | \Phi \rangle$ usando indistintamente las funciones en su representación directa o sus transformadas de Fourier (representación en momentos). Por ello, si $\Psi(\mathbf{r})$ y $\Phi(\mathbf{r})$ representan sendos estados cuánticos en un determinado instante de tiempo puede decirse, por extensión, que (4.2) es el producto escalar de los estados cuánticos.

El producto escalar y la norma para **funciones de onda** cumplen las siguientes propiedades, características de *todo* producto escalar y *toda* norma:

Producto escalar

$$\langle \Phi | \Phi \rangle \in \mathbb{R}^+$$

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = 0 \Leftrightarrow \Phi(\mathbf{r}) = \mathbb{O}(\mathbf{r})$$

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \langle \Psi | \Phi \rangle^*$$

$$\langle \Phi | a\Psi \rangle = a \langle \Phi | \Psi \rangle$$

$$\langle a\Phi | \Psi \rangle = a^* \langle \Phi | \Psi \rangle$$

$$\langle \Phi | \Psi + \Gamma \rangle = \langle \Phi | \Psi \rangle + \langle \Phi | \Gamma \rangle$$

Norma

$$\| \Phi \| \in \mathbb{R}^+$$

$$\| \Phi \| = 0 \Leftrightarrow \Phi(\mathbf{r}) = \mathbb{O}(\mathbf{r})$$

$$\| a\Phi \| = |a| \| \Phi \|$$

$$\| \Phi + \Psi \| \leq \| \Phi \| + \| \Psi \| \text{ (des. triang.)}$$

$$\langle \Phi | \mathbb{O} \rangle = \langle \mathbb{O} | \Phi \rangle = 0 \text{ para toda } \Phi(\mathbf{r}) \quad |\langle \Psi | \Phi \rangle| \leq \| \Psi \| \| \Phi \| \text{ (des. Schwarz)}$$

donde $\mathbb{O}(\mathbf{r}) = 0$ es la función nula y a un escalar complejo arbitrario (en rigor, las dos últimas propiedades se pueden deducir de las anteriores).

Nota: Por extensión, lo que aquí se ha dicho es válido para los **estados cuánticos** de una partícula.

TABLA 4-1 Propiedades del producto escalar y de la norma

§ 3. Sabemos que dos funciones de onda Ψ y Φ son físicamente equivalentes si y sólo si existe una constante compleja λ no nula tal que $\Psi(\mathbf{r}) = \lambda\Phi(\mathbf{r})$. Multiplicando $\Psi(\mathbf{r})$ escalarmente por $\Phi(\mathbf{r})$ y por $\Psi(\mathbf{r})$ obtenemos, respectivamente, que

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \langle \Phi | \lambda\Phi \rangle = \lambda \langle \Phi | \Phi \rangle \quad ; \quad \langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi | \lambda\Phi \rangle = \lambda \langle \Psi | \Phi \rangle.$$

Dividiendo ahora miembro a miembro estas expresiones tenemos que:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \lambda\Phi(\mathbf{r}) \Leftrightarrow \frac{\langle\Phi|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \frac{\langle\Phi|\Phi\rangle}{\langle\Psi|\Phi\rangle} \Leftrightarrow \frac{\langle\Phi|\Psi\rangle\langle\Psi|\Phi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle\langle\Phi|\Phi\rangle} = 1 \Leftrightarrow \frac{|\langle\Psi|\Phi\rangle|^2}{\|\Psi\|^2\|\Phi\|^2} = 1,$$

donde hemos usado la propiedad $\langle\Phi|\Psi\rangle = \langle\Psi|\Phi\rangle^*$ del producto escalar definido en la ecuación (4.2) y la definición (4.3) de norma.

Esto sugiere definir la semejanza entre dos estados mediante

$$\Delta_{\text{sem}} = \frac{|\langle\Psi|\Phi\rangle|^2}{\|\Psi\|^2\|\Phi\|^2} \in [0, 1]$$

(4.4)

($\Delta_{\text{sem}} \leq 1$ es consecuencia de la desigualdad de Schwarz) y afirmar que serán más “parecidos” cuanto más próximo esté Δ_{sem} a la unidad. Dos estados serán *completamente diferentes* si $\Delta_{\text{sem}} = 0$, esto es, si sus funciones de onda son *ortogonales* (producto escalar igual a cero). Naturalmente podríamos haber definido otro criterio pero éste, basado en el producto escalar, va a ser el más adecuado a nuestros propósitos tal y como se irá viendo en los próximos capítulos.

§ 4. Por ejemplo, supongamos que en un instante t una partícula está en un estado cuya función de onda es $\Psi(\mathbf{r})$. Por la definición (4.2) de producto escalar, $\Psi(\mathbf{r})$ será ortogonal a cualquier otra función de onda $\Phi(\mathbf{r})$ que cumple

$$\Psi^*(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{para todo } \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$$

(la condición es suficiente, pero no necesaria). Esto implica que $\Psi(\mathbf{r})$ y $\Phi(\mathbf{r})$ son no nulas en regiones disjuntas del espacio, propiedad que es inmediatamente extensible a las densidades de probabilidad asociadas a una medida de la posición. Como consecuencia, si al medir la posición en dos estados de una partícula obtenemos con *total seguridad* resultados distintos, las funciones de onda representativas son ortogonales.

Lo mismo sucede si hablamos del momento lineal. Como el producto escalar se puede evaluar también en la representación en momentos, si no hay valores de \mathbf{p} para los que $\tilde{\Psi}(\mathbf{p})$ y $\tilde{\Phi}(\mathbf{p})$ son simultáneamente no nulas, una medida de \mathbf{p} en cada uno de estos estados dará con seguridad un valor diferente. Puesto que, entonces,

$$\tilde{\Psi}^*(\mathbf{p})\tilde{\Phi}(\mathbf{p}) = 0 \quad \text{para todo } \mathbf{p} \in \mathbb{R}^3$$

el producto escalar $\langle\Psi|\Phi\rangle$ será cero.

Tenemos así una primera interpretación física de la ortogonalidad entre dos funciones de onda. Si al medir una magnitud como la posición (o el momento) en dos estados obtenemos con seguridad valores distintos, podemos intuitivamente afirmar que esos dos estados son claramente diferentes. Esta diferencia se plasma en que el producto escalar entre las funciones de onda representativas es nulo.

Pero el producto escalar de dos funciones $\Psi(\mathbf{r})$ y $\Phi(\mathbf{r})$ puede ser también nulo sin necesidad de que las funciones tengan soportes disjuntos, es decir, sin necesidad de que $\Psi^*(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r}) = 0$ para todo \mathbf{r} (o $\tilde{\Psi}^*(\mathbf{p})\tilde{\Phi}(\mathbf{p}) = 0$ para todo \mathbf{p}). Pensemos, por ejemplo, en las siguientes funciones de onda, correspondientes a una partícula que se mueve en una dimensión espacial

$$\Psi(x) = \mathcal{A} \exp\left(-\frac{x^2}{2\alpha^2}\right) \quad ; \quad \Phi(x) = \mathcal{B}x \exp\left(-\frac{x^2}{2\alpha^2}\right)$$

(\mathcal{A} y \mathcal{B} son constantes de normalización y α es un escalar real y positivo). Puesto que $\Psi(x)$ es par y $\Phi(x)$ es impar, tenemos que

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)\Phi(x)dx = 0,$$

ya que el integrando es una función impar. Con este ejemplo vemos que medidas de la posición o del momento en los estados descritos por estas $\Psi(\mathbf{r})$ y $\Phi(\mathbf{r})$ pueden dar resultados iguales. Sin embargo, veremos más adelante que en general hay otra propiedad física “distintiva”¹ para la que es imposible encontrar un mismo valor en ambos estados.

Podemos entonces dar una interpretación física más general a la ortogonalidad de funciones. *Dos funciones de onda son ortogonales si y sólo si representan sendos estados físicos para los que al medir una cierta propiedad física obtendremos con certeza resultados diferentes.*

4.2. EL ESPACIO DE LAS FUNCIONES DE ONDA

§ 1. Recordemos que, como ya se comentó en el tema anterior, el tiempo t es un *parámetro* asociado a la evolución del estado físico. Nos podemos, pues, olvidar de t si no estamos interesados en aspectos dinámicos. En la sección anterior hemos visto que la combinación lineal de funciones de onda de cuadrado integrable es también

¹ Esa propiedad no tiene por qué ser ni la posición ni el momento lineal y más adelante veremos que puede ser la energía mecánica de una partícula cuando está sometida a una fuerza recuperadora.

normalizable. Además, bajo las operaciones suma y producto por un escalar, las funciones complejas definidas sobre \mathbb{R}^3 cumplen las propiedades matemáticas que definen a un *espacio lineal*. Podemos entonces plasmar matemáticamente el principio de superposición de la siguiente manera:

- i) Las posibles funciones de onda normalizables (esto es, de cuadrado integrable) de una partícula que se mueve en el espacio constituyen *un espacio lineal complejo*, designado por el símbolo $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, en el que se ha definido un producto escalar y una norma mediante las Eqs. (4.2) y (4.3).
- ii) El espacio lineal $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ tiene la peculiaridad de que su dimensión algebraica es *infinita* ya que es posible encontrar en él un número arbitrariamente grande de funciones linealmente independientes.²
- iii) Como la función nula forma parte de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ admitiremos por convenio que representa el estado “partícula ausente” o el “estado imposible”.

El término combinación lineal indica, en rigor, una suma de un número *finito* de sumandos. Aun así, ya hemos aplicado el principio de superposición a sumas continuas en forma de integrales que, dividiendo el rango de integración en intervalos finitos, son equivalentes a sumas discretas de *infinitos* términos que deben entenderse como el límite de una sucesión. Por ejemplo:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \Psi_n(\mathbf{r}) = \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^m \alpha_n \Psi_n(\mathbf{r}) \equiv \lim_{m \rightarrow \infty} \Phi_m(\mathbf{r}),$$

donde α_n es un escalar complejo y $\Psi_n(\mathbf{r})$ una función de onda normalizable. Puede ocurrir que esta sucesión diverja³ pero lo que no sería admisible es que dicha sucesión convergiese a una función que *no fuese normalizable* ya que la utilización despreocupada de sumas infinitas o *series* no sería admisible (y ya no digamos la evaluación de sumas continuas mediante integrales). No obstante, esto no puede suceder para las funciones de cuadrado integrable: si una sucesión de funciones normalizables Φ_n converge a una función, ésta es necesariamente normalizable. Formalmente, esto se escribe como

$$\text{si } \{\Phi_n(\mathbf{r})\} \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \quad \text{y} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \|\Phi_n - \Phi\| = 0 \quad \Rightarrow \quad \Phi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3), \quad (4.5)$$

² Por ejemplo: escoja una función normalizable que tome valores no nulos en una región finita del espacio, otra con igual forma pero trasladada a una segunda región disjunta a la primera, y así sucesivamente.

³ Esto no sería especialmente preocupante ya que lo único que habría pasado es que habríamos hecho una descripción incorrecta de $\Phi(\mathbf{r})$.

donde hemos definido el criterio de convergencia usando la propiedad de la norma, $\|\Psi\| = 0 \Leftrightarrow \Psi(\mathbf{r}) = 0$.

En lenguaje matemático, la condición (4.5) es la que define a un conjunto topológicamente *cerrado*, y a los espacios lineales con un producto escalar y cerrados bajo la norma definida a partir del producto escalar se les denomina **espacios de Hilbert**. Sobre estas estructuras algebraicas se va a cimentar todo el formalismo cuántico, que usará herramientas del Álgebra Lineal ya conocidas, aunque con algunas matizaciones debidas a la dimensión infinita de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$.

Tenemos así que:

- En física cuántica los posibles estados realizable de una partícula en un instante t se describen mediante funciones de onda complejas $\Psi(\mathbf{r}, t)$ de cuadrado integrable. La función de onda contiene toda la información experimentalmente accesible acerca de la partícula en términos de probabilidades de ocurrencia.
- El conjunto $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ de todas las funciones complejas de cuadrado integrable es un espacio lineal, lo que refleja el principio de superposición: si $\Psi(\mathbf{r}, t)$ y $\Phi(\mathbf{r}, t)$ representan posibles estados realizable en un instante t entonces la función $\alpha\Psi(\mathbf{r}, t) + \beta\Phi(\mathbf{r}, t)$, siendo α y β dos constantes complejas arbitrarias, también representa un estado realizable.
- En $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ se define un **producto escalar** $\langle \Psi | \Phi \rangle$, que lo dota de estructura algebraica de **espacio de Hilbert**, y que define la similitud entre dos estados cuánticos. Los estados serán completamente distintos en un instante t dado si sus funciones de onda son ortogonales ($\langle \Psi | \Phi \rangle = 0$) mientras que serán iguales (físicamente) si

$$\frac{|\langle \Psi | \Phi \rangle|^2}{\|\Psi\|^2 \|\Phi\|^2} = 1 \quad \text{con } \langle \Psi | \Phi \rangle \equiv \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}, \quad \|\Psi\| \equiv \langle \Psi | \Psi \rangle^{1/2}.$$

§ 2. Como ya hemos mencionado, todo estado cuántico *realizable* de una partícula está representado en un instante de tiempo por una función $\Psi(\mathbf{r})$ de cuadrado integrable. Sin embargo, y estrictamente hablando, la recíproca no es cierta. Por ejemplo, existen funciones de onda normalizables para las que se tiene el muy poco razonable resultado de que el valor medio de la energía cinética diverge. Esto implica que hay funciones de onda de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ que, a priori, no deberían aparecer en la descripción de un sistema físico aunque tengan perfecta cabida en

el formalismo matemático. En particular, el valor medio de toda potencia positiva de cualquier componente de la posición en un estado cuántico ha de ser finito, por lo que $\Psi(\mathbf{r})$ debe ser de muy corto alcance. Lo mismo ha de ocurrir para el momento lineal. $\hat{\Psi}(\mathbf{p})$ también ha de ser de muy corto alcance, que es algo que únicamente ocurre si $\Psi(\mathbf{r})$ es infinitamente derivable.⁴

Las dos condiciones que acabamos de mencionar se cumplen en el conjunto $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ de *funciones de Schwartz*, también llamado de *funciones suaves de decaimiento rápido*:⁵

$$\Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3) \Leftrightarrow \begin{cases} x^\ell y^m z^n \Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \\ \frac{\partial^{\ell+m+n} \Psi(\mathbf{r})}{\partial^\ell x \partial^m y \partial^n z} \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \end{cases} \text{ para todo } \ell, m, n \in \mathbb{N}. \quad (4.6)$$

El conjunto $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ es topológicamente *denso* en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$. Por la definición de conjunto denso, para toda función $\Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ y para todo $\epsilon > 0$ siempre es posible encontrar una función de Schwartz $\Phi(\mathbf{r})$ tal que $\|\Psi - \Phi\| < \epsilon$. En otras palabras, *toda función de onda de cuadrado integrable puede aproximarse con precisión arbitraria por una función de Schwartz*. Dando la vuelta al argumento, *toda función de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ puede servir como una descripción matemáticamente aproximada de algún estado cuántico estrictamente realizable*. Teniendo en cuenta esta salvedad, podemos afirmar que **toda función normalizable**, sea o no de $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$, **representa un estado realizable**.

Para que el formalismo matemático sea consistente es preciso trabajar sobre una estructura de espacio de Hilbert. Esto explica por qué el espacio de las funciones de onda que se emplea en física cuántica es $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ y no $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$: el primero es de Hilbert (topológicamente cerrado) mientras que el segundo, siendo en sí mismo un espacio lineal, no es cerrado.

§ 3. Las funciones de onda *no normalizables* se utilizan de manera ubicua en física cuántica, bien sea para realizar una descripción matemática simplificada de un estado cuántico, bien para representar estados límites ideales que físicamente son imposibles de alcanzar.

⁴ Ésta es una propiedad típica de la transformada de Fourier que está directamente relacionada con el hecho ya comentado en el capítulo 1 de que la derivada en el espacio de posiciones se transforma en la multiplicación por las componentes del vector de onda en el espacio recíproco.

⁵ La definición para los conjuntos $\mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$ y $\mathcal{S}(\mathbb{R})$, relevantes si la partícula se mueve sobre un plano o sobre una recta respectivamente, es análoga.

- Nosotros ya conocemos un ejemplo: *las funciones de De Broglie* dadas por

$$\theta_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}/\hbar) \quad (4.7)$$

(el prefactor $(2\pi\hbar)^{3/2}$ se incluye por conveniencia matemática). Recordemos que, de acuerdo con el postulado de De Broglie, $\theta_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ es el límite al que tiende la dependencia espacial de una función de onda en un estado en el que el valor medio del momento lineal es $\langle \mathbf{p} \rangle = \mathbf{q}$ cuando la incertidumbre $\Delta \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{0}$.

Como la información física se va a extraer a partir de productos escalares, nos evitaremos problemas de índole matemático en la utilización de funciones no normalizables si su producto escalar con cualquier función de Schwartz es finito. Esto es,

$$\left. \begin{array}{l} \Lambda(\mathbf{r}) \notin \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \text{ representa un} \\ \text{estado límite ideal (no realizable)} \end{array} \right\} \Rightarrow \langle \Lambda | \Phi \rangle \in \mathbb{C} \text{ para toda } \Phi(\mathbf{r}) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3) \quad (4.8)$$

donde al indicar que $\langle \Lambda | \Phi \rangle \in \mathbb{C}$ damos por supuesto que tal producto escalar es finito. Se puede comprobar que las funciones de De Broglie satisfacen la condición (4.8). Además, podemos afirmar que son ortogonales entre sí. En efecto, haciendo un cambio de variable,

$$\langle \theta_{\mathbf{p}} | \theta_{\mathbf{q}} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \theta_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) \theta_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^3} d^3 \mathbf{r} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{-i(\mathbf{p}-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{u}}}{(2\pi)^3} d^3 \mathbf{u}$$

y recordando los resultado del epígrafe §1.3.3,

$$\langle \theta_{\mathbf{p}} | \theta_{\mathbf{q}} \rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{q}) = \begin{cases} \infty & \text{si } \mathbf{p} = \mathbf{q} \\ 0 & \text{si } \mathbf{p} \neq \mathbf{q}. \end{cases} \quad (4.9)$$

Esta relación de ortogonalidad puede así interpretarse como sigue: no siendo ninguno de ellos realizable, los estados representados por $\theta_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ y $\theta_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ son completamente distintos porque al medir en cada uno de ellos una propiedad física, el momento lineal, se tienen con certeza los valores diferentes \mathbf{q} y \mathbf{p} .

- Como veremos en el ejemplo que cierra esta sección, estas mismas conclusiones también son válidas para los estados descritos por las *deltas de Dirac*

$$\delta_{\mathbf{a}}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{a}). \quad (4.10)$$

De hecho, $\delta_{\mathbf{a}}(\mathbf{r})$ corresponderá a un estado igualmente hipotético en el que la posición está completamente definida (la medida de la posición es \mathbf{a} , con incertidumbre nula).

§ 4. En resumen, las funciones de onda que se utilizan en el formalismo matemático de la física cuántica son de tres tipos:

- a) *Funciones normalizables de Schwartz*, que forman el subconjunto $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$. Estas funciones representan exactamente estados cuánticos de la partícula realizable, esto es, para los que existe un procedimiento físico por el que obtenemos la partícula en dicho estado cuántico.
- b) *Funciones normalizables de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ pero que no son de Schwartz*. Estas funciones constituyen una descripción arbitrariamente precisa de un estado cuántico realizable y, matemáticamente, se pueden utilizar en pie de igualdad junto a las funciones de $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$. Su inclusión en el formalismo responde no sólo a una cuestión de conveniencia, sino porque son necesarias para que el espacio de las funciones de onda sea de Hilbert.
- c) *Funciones no normalizables pero que satisfacen la condición (4.8)*. Sirven para describir estados ideales, físicamente imposibles de preparar.

EJEMPLO 4.a. (!) *Estados con posición completamente definida*

Un estado cuántico tendría una posición \mathbf{a} completamente definida si $\langle \mathbf{r} \rangle = \mathbf{a}$ y si las incertidumbres de las tres componentes de la posición fuesen cero. Designemos por $\delta_{\mathbf{a}}(\mathbf{r})$ la función de onda de ese hipotético estado.

- a) Compruebe que $\delta_{\mathbf{a}}(\mathbf{r})$ es la delta de Dirac $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{a})$.
- b) Verifique que si $\mathbf{a} \neq \mathbf{b}$ entonces las funciones de onda $\delta_{\mathbf{a}}(\mathbf{r})$ y $\delta_{\mathbf{b}}(\mathbf{r})$ son ortogonales.

Solución:

- a) El valor medio de la componente x de la posición es

$$\langle x \rangle = \frac{1}{\|\Psi\|^2} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}) x \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}.$$

Consideremos una función factorizada de la forma

$$\Psi(\mathbf{r}) = \delta(x - a_x) \Phi(y, z)$$

Entonces, aplicando la propiedad $x\delta(x - a_x) = a_x\delta(x - a_x)$

$$\langle x \rangle = \frac{1}{\|\Psi\|^2} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}) a_x \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = a_x \frac{\int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}}{\|\Psi\|^2} = a_x \frac{\|\Psi\|^2}{\|\Psi\|^2} = a_x.$$

A su vez, para este mismo estado

$$(\Delta x)^2 = \frac{1}{\|\Psi\|^2} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r})(x - a_x)^2 \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}$$

pero como $(x - a_x)^2 \delta(x - a_x) = (a_x - a_x)^2 \delta(x - a_x) = 0$, tenemos inmediatamente que $(\Delta x)^2 = 0$. Por consiguiente, cualquier función de onda de la forma $\delta(x - a_x)\Phi(y, z)$ representa un estado (ideal) en el que x está bien definida con valor a_x . Procediendo análogamente para las otras dos coordenadas, llegamos a que

$$\delta_{\mathbf{a}}(\mathbf{r}) = \delta(x - a_x)\delta(y - a_y)\delta(z - a_z) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{a}).$$

b) Es inmediato si tenemos en cuenta que la delta de Dirac es real:

$$\langle \delta_{\mathbf{a}} | \delta_{\mathbf{b}} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \delta^*(\mathbf{r} - \mathbf{a}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{b}) d^3\mathbf{r} = \delta^*(\mathbf{b} - \mathbf{a}) = \delta(\mathbf{b} - \mathbf{a}),$$

que es igual a cero si $\mathbf{b} \neq \mathbf{a}$.

Nota: Obviamente, ninguna de las integrales que hemos escrito converge por separado, incluida la que proporciona $\|\Psi\|^2$, pero si pensamos en una delta de Dirac como un límite los pasos anteriores están justificados.

4.3. BASES DE FOURIER Y BASES DE REPRESENTACIÓN

4.3.a BASES DE FOURIER

§ 1. Consideremos un espacio lineal genérico \mathcal{W} de dimensión algebraica *finita* N . Una *base* es un subconjunto \mathcal{B} de \mathcal{W} linealmente independiente, tal que todo elemento de \mathcal{W} se puede escribir como combinación lineal de elementos de \mathcal{B} . Un teorema básico del álgebra lineal indica que el cardinal de cualquier base es igual a N , y que para cada elemento de \mathcal{W} la combinación lineal en términos de elementos de \mathcal{B} es única. Ello implica que cualquier elemento del espacio lineal queda unívocamente determinado por los coeficientes de tal combinación lineal de los elementos de \mathcal{B} , que se denominan *coordenadas*.

A priori, estos importantes resultados no tienen por qué ser válidos en un espacio lineal de dimensión infinita. Sin embargo, el *teorema de Riesz-Fischer* establece que $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ es un espacio de Hilbert *separable*, es decir, que tiene bases formadas por un número infinito, pero **numerable**, de funciones. La única salvedad es que, en general, la combinación lineal de una función de cuadrado integrable en términos de los elementos de una de estas bases tendrá infinitos

términos. En particular, existen **bases ortonormales** (formadas por funciones ortogonales entre sí y de norma unidad) **numerables**, también conocidas como **bases de Fourier**.⁶

Llamemos $\mathcal{B} \equiv \{\Phi_1(\mathbf{r}), \Phi_2(\mathbf{r}), \Phi_3(\mathbf{r}), \dots\}$ a una base de Fourier de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$. Como \mathcal{B} es un conjunto ortonormal, se cumple que

$$\langle \Phi_n | \Phi_m \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \Phi_n^*(\mathbf{r}) \Phi_m(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \delta_{n,m} = \begin{cases} 1 & \text{si } n = m \\ 0 & \text{si } n \neq m, \end{cases} \quad (4.11)$$

donde hemos introducido la *delta de Kronecker* $\delta_{n,m}$. Puesto que \mathcal{B} es una base, toda función de cuadrado integrable puede escribirse como

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Phi_n(\mathbf{r})$$

siendo c_n la n -ésima coordenada de la función $\Psi(\mathbf{r})$. Usando la linealidad del producto escalar y (4.11),

$$\langle \Phi_m | \Psi \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \langle \Phi_m | \Phi_n \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{m,n} = c_m$$

llegamos a

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Phi_n(\mathbf{r}), \quad \text{con} \quad c_n = \langle \Phi_n | \Psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \Phi_n^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \quad (4.12)$$

Esto es, la n -ésima coordenada de una función $\Psi(\mathbf{r})$ en una base ortonormal es igual al producto escalar del n -ésimo elemento de la base por la función $\Psi(\mathbf{r})$.

La importante relación (4.12) garantiza que la suma de funciones y su producto por un escalar complejo λ se pueden efectuar a través de sus coordenadas en una base de Fourier. Así, sean $\Psi(\mathbf{r})$ y $\vartheta(\mathbf{r})$ dos funciones normalizables cuyas coordenadas respectivas en una base \mathcal{B} son $\{c_n\}$ y $\{z_n\}$. Entonces, $c_n + z_n$ es la n -ésima coordenada de $\Psi(\mathbf{r}) + \vartheta(\mathbf{r})$, mientras que λc_n es la n -ésima coordenada de la función $\lambda\Psi(\mathbf{r})$.

⁶ Puesto que, según el teorema de Riesz-Fischer, toda base ortonormal de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ es **numerable**, no podemos encontrar en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ un conjunto formado por un continuo de funciones ortogonales dos a dos. Esto tendrá importancia en el futuro.

Por otra parte, podemos desarrollar el producto escalar de estas dos funciones como sigue,

$$\langle \vartheta | \Psi \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \langle z_n \Phi_n | c_m \Phi_m \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} z_n^* c_m \langle \Phi_n | \Phi_m \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} z_n^* c_m \delta_{n,m}$$

y usando las propiedades de la delta de Kronecker,

$$\langle \vartheta | \Psi \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} z_n^* c_n.$$

(4.13)

Tenemos así que también el producto escalar entre funciones se puede evaluar a partir de sus coordenadas. Lo mismo sucede para la norma, ya que:

$$\|\Psi\| = \langle \Psi | \Psi \rangle^{1/2} = \left(\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 \right)^{1/2}.$$

Nótese además que las sucesiones de coordenadas $\{c_1, c_2, \dots\}$ forman un espacio de Hilbert bajo el producto escalar dado en (4.13), al que se designa como \mathbb{C}_2^∞ . El teorema de Riesz-Fischer es entonces equivalente a afirmar que $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ y \mathbb{C}_2^∞ son isomorfos.

- Si ahora introducimos la dependencia temporal, cada función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ queda determinada únicamente en una base ortonormal $\mathcal{B} \equiv \{\Phi_1(\mathbf{r}), \Phi_2(\mathbf{r}), \Phi_3(\mathbf{r}), \dots\}$, que no depende del tiempo, por una sucesión infinita de números complejos $\{c_1(t), c_2(t), c_3(t), \dots\}$ tales que⁷

$$c_n(t) = \langle \Phi_n | \Psi(t) \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \Phi_n^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r}, \quad \text{con } \sum_n |c_n(t)|^2 \text{ finito}$$

La evolución del estado cuántico se plasma así en la dependencia temporal de las coordenadas de su función de onda en la base \mathcal{B} . Diremos entonces que $\{c_1(t), c_2(t), c_3(t), \dots\}$ constituye una *representación algebraica* de la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$. Fíjese en el grado de abstracción que supone: el estado cuántico ya no se describe mediante una función definida en el espacio sino ¡a través de una sucesión infinita de números complejos!

⁷ A este respecto no es ocioso insistir de nuevo en que el tiempo es un mero parámetro (no una variable) en la definición de la estructura algebraica del espacio de las funciones de onda.

$\mathfrak{h}_0(u) = 1$	$\mathfrak{h}_1(u) = 2u$	$\mathfrak{h}_2(u) = -2 + 4u^2$
$\mathfrak{h}_3(u) = -12u + 8u^3$	$\mathfrak{h}_4(u) = 12 - 48u^2 + 16u^4$	
$\mathfrak{h}_5(u) = 120u - 160u^3 + 32u^5$	$\mathfrak{h}_6(u) = -120 + 720u^2 - 480u^4 + 64u^6$	
$\mathfrak{h}_n(u) = (-1)^n \exp(u^2) \frac{d^n \exp(-u^2)}{du^n}$		

TABLA 4-2 Polinomios de orden más bajo que aparecen en las funciones de la base ortonormal de Hermite. Se incluye también la fórmula de su término general

§ 2. Como ejemplo del teorema de Riesz-Fischer, esto es, de la existencia de bases ortonormales numerables, se puede proponer la *base ortogonal de Hermite* de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, formada por las funciones de Hermite, $\Phi_n(x)$

$$\mathcal{B}_{H,\alpha} = \left\{ \Phi_n(x) \equiv \frac{\mathfrak{h}_n(x/\alpha) e^{-x^2/(2\alpha^2)}}{(2^n n! \sqrt{\pi}\alpha)^{1/2}} \quad \text{con } \alpha \in \mathbb{R}^+; \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \right\} \quad (4.14)$$

donde $\mathfrak{h}_n(u)$ es un polinomio de grado n (vea la **TABLA 4-2**). Como puede apreciarse, los elementos de esa base son funciones de Schwartz.

Toda función $\Psi(x)$ de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ se podrá expresar entonces como⁸

$$\Psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \Phi_n(x) \quad \text{con } c_n = \int_{\mathbb{R}} \Phi_n^*(x) \Psi(x) dx. \quad (4.15)$$

Como sabemos, la suma infinita que aparece en (4.15) ha de entenderse como el siguiente límite:

$$\Psi(x) = \lim_{M \rightarrow \infty} \Psi_M(x), \quad \text{con } \Psi_M(x) \equiv \sum_{n=0}^M c_n \Phi_n(x),$$

y, a efectos prácticos, a medida que aumentemos M tendremos una mejor aproximación a la función $\Psi(x)$ incluso aunque ésta no sea de Schwartz.

Se puede tomar como ejemplo ilustrativo la función triangular,

$$T_{\alpha}(x) = \begin{cases} 1 - |x/\alpha| & \text{si } |x| \leq \alpha \\ 0 & \text{si } |x| > \alpha. \end{cases}$$

⁸ Las funciones de Hermite $\Phi_n(x)$ son reales por lo que señalar la conjugación compleja no es necesario, aunque lo hemos hecho para mantener la consistencia con la expresión general (4.12).

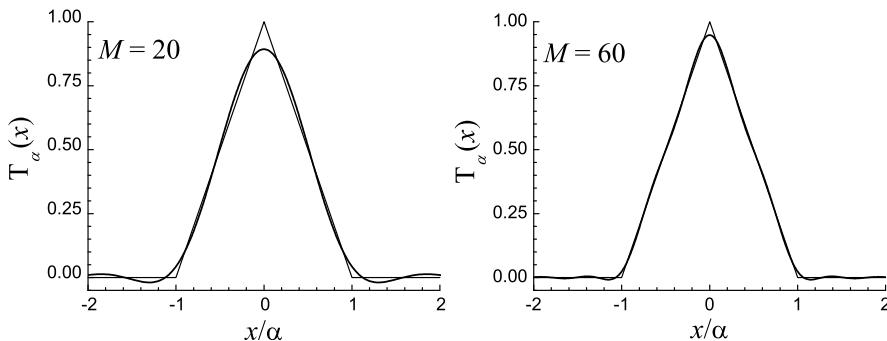


Figura 4-1. Aproximación de la función triangular $T_\alpha(x)$ por combinaciones lineales de $M + 1$ funciones ortonormales de Hermite

Como se puede apreciar en la **FIG. 4-1**, obtenemos una aproximación razonablemente buena con $M = 20$, y con $M = 60$ el acuerdo es ya muy bueno.

El teorema de Riesz-Fischer y, en consecuencia, la existencia de bases ortonormales numerables, es también aplicable al espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ de las funciones de onda normalizables de una partícula que se mueve en N dimensiones espaciales.

4.3.b BASES DE REPRESENTACIÓN

§ 3. Pensemos ahora en las funciones no normalizables $\delta_{\mathbf{a}}(\mathbf{r})$ y $\theta_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ que, recordemos, representan estados límite no realizables para los que la posición y el momento lineal están completamente definidos, respectivamente. Dada una función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ de cuadrado integrable, a partir de las definiciones de delta de Dirac y de transformada de Fourier es inmediato ver que

$$\boxed{\Psi(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi(\mathbf{a}, t) \delta_{\mathbf{a}}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{a} = \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t) \theta_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{q}} \quad (4.16)$$

donde

$$\boxed{\begin{aligned} \Psi(\mathbf{a}, t) &= \int_{\mathbb{R}^3} \delta_{\mathbf{a}}^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} = \langle \delta_{\mathbf{a}} | \Psi \rangle \\ \tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t) &= \int_{\mathbb{R}^3} \theta_{\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} = \langle \theta_{\mathbf{q}} | \Psi \rangle. \end{aligned}} \quad (4.17)$$

De acuerdo con estos resultados, para cada posición \mathbf{a} el valor complejo $\Psi(\mathbf{a}, t)$ puede interpretarse como una “**coordenada**” de la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ en una

“base” del espacio $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ formada por las funciones $\delta_a(\mathbf{r})$, ortogonales entre sí. A su vez, para cada valor de \mathbf{q} , la representación en momentos $\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t)$ sería una “coordenada” de la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ pero en otra “base” compuesta por las funciones $\theta_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$, también ortogonales.

La peculiaridad de estas “coordenadas” es que forman un continuo y que las funciones ortogonales de la “base” tienen norma infinita y no pertenecen al espacio $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$. Así, no es correcto afirmar que las funciones de De Broglie y las deltas de Dirac puedan formar parte de *bases ortonormales* numerables (o de Fourier) del espacio de Hilbert de dimensión infinita $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$.

§ 4. Podemos, pues, generalizar el concepto de base ortonormal e introducir el de **base de representación** \mathcal{B} de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ que es la unión de:

- (i) un conjunto numerable $\{\Phi_n(\mathbf{r})\}$ de funciones de norma unidad, en el que el índice n toma valores discretos;
- (ii) un conjunto continuo $\{\Lambda_\lambda(\mathbf{r})\}$, en el que el índice λ toma valores en un continuo, de funciones no normalizables que obedecen la condición (4.8).

Además, todas estas funciones de una base de representación han de cumplir:

(a) Las condiciones de ortogonalidad dadas por

$$\langle \Phi_n | \Phi_m \rangle = \delta_{n,m} ; \quad \langle \Lambda_\lambda | \Lambda_\mu \rangle = \delta(\lambda - \mu) ; \quad \langle \Phi_n | \Lambda_\lambda \rangle = 0 \quad (4.18)$$

donde $\delta(\lambda - \mu)$ es la delta de Dirac. Note que n y m indican valores discretos, mientras que λ y μ son índices continuos.

(b) Que toda función $\Psi(\mathbf{r})$ de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ pueda escribirse como

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n \Phi_n(\mathbf{r}) + \int c_\lambda \Lambda_\lambda(\mathbf{r}) d\lambda \quad \text{con} \quad \begin{cases} c_n = \langle \Phi_n | \Psi \rangle \\ c_\lambda = \langle \Lambda_\lambda | \Psi \rangle \end{cases} \quad (4.19)$$

donde la suma sobre n y la integral sobre λ se extienden sobre todos los valores que pueden tomar estos índices. Los escalares complejos $\{c_n\}$ y $\{c_\lambda\}$ son así las coordenadas de $\Psi(\mathbf{r})$ en la base \mathcal{B} .

Por consiguiente diremos que las funciones $\delta_a(\mathbf{r})$ y $\theta_q(\mathbf{r})$, de las que hemos hablado en § 3, constituyen sendas **bases de representación** a las que, por motivos evidentes, denominaremos en posiciones y en momentos, respectivamente.⁹

⁹ Si tiene reparos matemáticos, consulte el **Apéndice B**.

Usando las propiedades de la delta de Dirac y la linealidad del producto escalar, es fácil generalizar la ecuación (4.13) a coordenadas continuas c_λ y z_λ , de manera que el producto escalar de dos funciones cualesquiera de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ se puede expresar en términos de las coordenadas de una base de representación como

$$\langle \vartheta | \Psi \rangle = \sum_n z_n^* c_n + \int z_\lambda^* c_\lambda \, d\lambda. \quad (4.20)$$

Además, la norma de una función de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ será

$$\| \Psi \| ^2 = \sum_n |c_n|^2 + \int |c_\lambda|^2 \, d\lambda. \quad (4.21)$$

Tampoco es difícil probar que la condición necesaria y suficiente para que un conjunto ortogonal $\{\{\Phi_n(\mathbf{r})\}, \{\Lambda_\lambda(\mathbf{r})\}\}$ forme una base de representación de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ es que se satisfaga la *relación de cierre*

$$\sum_n \Phi_n^*(\mathbf{r}) \Phi_n(\mathbf{r}') + \int \Lambda_\lambda^*(\mathbf{r}) \Lambda_\lambda(\mathbf{r}') \, d\lambda = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (4.22)$$

En resumen, las funciones no normalizables que satisfacen la condición (4.8) no sólo sirven para describir estados cuánticos ideales (no realizable), sino también para construir bases de representación del espacio $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ de funciones de onda.¹⁰ Obsérvese que, entonces, todas las coordenadas de una función de Schwartz en una base de representación son números complejos finitos, $\{c_n\}$ y $\{c_\lambda\}$. Para una función $\Psi(\mathbf{r})$ de cuadrado integrable, pero que no sea de Schwartz, puede ocurrir que alguna coordenada c_λ de la parte continua sea infinita. Sin embargo, ese valor infinito será integrable en las expresiones (4.19), (4.20) y (4.21).

§ 5. La etiquetación que hemos hecho de las funciones de una base de representación es la más simple posible, pero no es la única. En muchos casos se identifican las funciones con un conjunto de índices, denominados *números cuánticos*, que toman valores discretos para las funciones normalizadas y valores continuos para las no normalizables. Por ejemplo, en la base de representación en posiciones $\{\delta_a(\mathbf{r})\}$ de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ los números cuánticos son las tres coordenadas a_x, a_y, a_z , que pueden tomar un valor real cualquiera.

¹⁰ En general, el espacio en donde se trabaja será \mathbb{R}^N , en vez de \mathbb{R}^3 .

4.3.c PROYECCIONES ORTOGONALES

§ 6. Todos los resultados que hemos visto son aplicables a un *subespacio de Hilbert* \mathcal{W} de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, es decir, a un subconjunto de funciones de cuadrado integrable que constituyen un espacio lineal en sí mismo y topológicamente cerrado. Esto nos va a permitir llegar a un resultado algebraico de gran utilidad en el formalismo cuántico.

Sean \mathcal{W} un subespacio de Hilbert de dimensión algebraica N (finita o infinita numerable), $\mathcal{B}_{\mathcal{W}} = \{\Phi_1(\mathbf{r}), \dots, \Phi_N(\mathbf{r})\}$ una de sus bases ortonormales y $\Psi(\mathbf{r})$ una función arbitraria de cuadrado integrable. Definimos la *proyección ortogonal* de $\Psi(\mathbf{r})$ sobre \mathcal{W} como la función

$$\boxed{\Psi_{\mathcal{W}}(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^N \langle \Phi_n | \Psi \rangle \Phi_n(\mathbf{r})} \quad (4.23)$$

que, obviamente, pertenece a \mathcal{W} . Podría parecer que la función $\Psi_{\mathcal{W}}(\mathbf{r})$ depende de la base ortonormal escogida pero no es así. La función $\Psi(\mathbf{r}) - \Psi_{\mathcal{W}}(\mathbf{r})$ es ortogonal a \mathcal{W} ya que (compruébelo) $\Psi(\mathbf{r}) - \Psi_{\mathcal{W}}(\mathbf{r})$ es perpendicular a todos los elementos de la base $\mathcal{B}_{\mathcal{W}}$; por la linealidad del producto escalar $\Psi(\mathbf{r}) - \Psi_{\mathcal{W}}(\mathbf{r})$ será ortogonal a cualquier función escrita como combinación lineal de las funciones de $\mathcal{B}_{\mathcal{W}}$, esto es, a cualquier función de \mathcal{W} .

Así, este llamado *teorema de la proyección ortogonal* establece que la descomposición

$$\boxed{\Psi(\mathbf{r}) = \Psi_{\mathcal{W}}(\mathbf{r}) + (\Psi(\mathbf{r}) - \Psi_{\mathcal{W}}(\mathbf{r})) , \text{ con } \begin{cases} \Psi_{\mathcal{W}}(\mathbf{r}) \in \mathcal{W} \\ (\Psi(\mathbf{r}) - \Psi_{\mathcal{W}}(\mathbf{r})) \perp \mathcal{W} \end{cases}} \quad (4.24)$$

es única: obtendríamos la misma función $\Psi_{\mathcal{W}}(\mathbf{r})$ si hubiésemos escogido otra base de representación de \mathcal{W} .

§ 7. El conjunto formado por todas las funciones ortogonales a \mathcal{W} es también un subespacio de Hilbert, llamado *complemento ortogonal* y simbolizado a veces como \mathcal{W}^\perp . El teorema (4.24) señala entonces que toda función de onda se escribe de manera única como suma de una función de \mathcal{W} y de otra de \mathcal{W}^\perp .

Por tanto, una base de todo $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ se consigue a partir de la unión de una base de \mathcal{W} y de otra de \mathcal{W}^\perp . Se dice entonces que $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ es igual a la *suma directa* de los subespacios de Hilbert \mathcal{W} y \mathcal{W}^\perp .

4.4. OPERADORES EN UN ESPACIO DE FUNCIONES

§ 1. Introduzcamos ahora los operadores en el espacio¹¹ de funciones $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ donde $N = 1, 2, 3, \dots$ Empecemos recordando unas definiciones básicas.

- Un *operador* \hat{A} de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ es cualquier aplicación que hace corresponder a una función de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ otra función de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$:

$$\hat{A} : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N) \mapsto \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N) \quad \text{tal que} \quad \forall \Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{D}(\hat{A}) \mapsto \hat{A}\Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N). \quad (4.25)$$

Un operador se caracteriza por:

- i) su *regla de actuación*, esto es, el procedimiento matemático que define $\hat{A}\Psi(\mathbf{r})$ a partir de $\Psi(\mathbf{r})$;
- ii) su *dominio* $\mathcal{D}(\hat{A}) \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$, esto es, el subconjunto de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ de las funciones sobre las que actúa el operador. Si el dominio no se especificase se sobreentiende que es el más amplio posible compatible con la regla de actuación.

Dos operadores son iguales ($\hat{A} = \hat{B}$) si sus reglas de actuación son las mismas *y* sus dominios coinciden.

Nota: Puesto que $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ es un subconjunto de otro más amplio, el de las funciones complejas definidas sobre \mathbb{R}^N , la regla de actuación de \hat{A} puede tener sentido para funciones no normalizables. Por ejemplo, el operador $\hat{\pi}_x$ cuya regla de actuación es

$$\hat{\pi}_x\Psi(\mathbf{r}) = -i\frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial x} = -i\lim_{dx \rightarrow 0} \frac{\Psi(x+dx, y, z) - \Psi(x, y, z)}{dx} \quad (4.26)$$

puede aplicarse a cualquier función que sea continua, pero cuando $\hat{\pi}_x$ actúa como operador de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ su dominio son aquellas funciones continuas de cuadrado integrable para las que $\partial\Psi(\mathbf{r})/\partial x$ también es de cuadrado integrable.

- Un operador de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ es *lineal* si así lo es su regla de actuación. Específicamente, si $\Psi(\mathbf{r})$ y $\Phi(\mathbf{r})$ son funciones cualesquiera de su dominio $\mathcal{D}(\hat{A})$ y (α, β) cualquier par de números complejos,

$$\hat{A} \text{ es lineal} \iff \begin{cases} \text{i)} & \alpha\Psi(\mathbf{r}) + \beta\Phi(\mathbf{r}) \in \mathcal{D}(\hat{A}) \\ \text{ii)} & \hat{A}(\alpha\Psi(\mathbf{r}) + \beta\Phi(\mathbf{r})) = \alpha\hat{A}\Psi(\mathbf{r}) + \beta\hat{A}\Phi(\mathbf{r}) \end{cases} \quad (4.27)$$

(la primera condición sería redundante si no imponemos restricciones artificiales al dominio de \hat{A} , pero la hemos incluido por claridad). Por tanto, el dominio de

¹¹ Los resultados son aplicables a cualquier espacio de Hilbert.

un operador lineal es un subespacio de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$, aunque $\mathcal{D}(\hat{A})$ no necesariamente es un subespacio de Hilbert (puede ser topológicamente abierto como el conjunto de las funciones de Schwartz).

Es evidente que el operador $\hat{\pi}_x$ es lineal, al igual que el operador

$$\hat{x}\Psi(\mathbf{r}) \equiv x\Psi(\mathbf{r}). \quad (4.28)$$

§ 2. Dados dos operadores lineales cualesquiera \hat{A} y \hat{B} y un escalar complejo arbitrario λ , podemos construir otros operadores lineales a partir de las siguientes operaciones básicas:

- a) Suma de operadores: $(\hat{A} + \hat{B})\Psi(\mathbf{r}) = \hat{A}\Psi(\mathbf{r}) + \hat{B}\Psi(\mathbf{r})$
- b) Multiplicación por un escalar: $(\lambda\hat{A})\Psi(\mathbf{r}) = \lambda(\hat{A}\Psi(\mathbf{r}))$
- c) Producto o composición de operadores: $(\hat{A}\hat{B})\Psi(\mathbf{r}) = \hat{A}(\hat{B}\Psi(\mathbf{r}))$

donde se sobreentiende que $\Psi(\mathbf{r})$ pertenece simultáneamente a los dominios de \hat{A} y \hat{B} en a), al dominio de \hat{A} en b), y que $\Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{D}(\hat{B})$ y $\hat{B}\Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{D}(\hat{A})$ en c).

Tenga en cuenta que mientras la suma de operadores es commutativa ($\hat{A} + \hat{B} = \hat{B} + \hat{A}$), puede que el producto no lo sea (en general $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$).

También podemos definir el operador “potencia n -ésima de \hat{A} ” como

$$\hat{A}^n \equiv \underbrace{\hat{A}\hat{A}\dots\hat{A}}_{n \text{ veces}} \quad (4.29)$$

Supongamos una función $g(z)$ que admite el siguiente desarrollo en serie de Taylor

$$g(z) = a_0 + a_1z + a_2z^2 + a_3z^3 + \dots \quad \text{con } a_i \in \mathbb{C}$$

y un cierto operador \hat{A} . Definimos el operador $g(\hat{A})$ a través de la siguiente expresión formal

$$g(\hat{A}) \equiv a_0 + a_1\hat{A} + a_2\hat{A}^2 + a_3\hat{A}^3 + \dots \quad (4.30)$$

cuyo dominio está formado por todas las funciones $\Psi(\mathbf{r})$ para las cuales

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n \hat{A}^n \Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^2).$$

Finalmente, si \hat{I} es el operador identidad (habitualmente se escribe $\hat{I} = 1$ para abbreviar), el operador inverso de \hat{A} es aquél que cumple que

$$\hat{A}\hat{A}^{-1}\Psi(\mathbf{r}) = \hat{I}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r}) \quad ; \quad \hat{A}^{-1}\hat{A}\Phi(\mathbf{r}) = \hat{I}\Phi(\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r})$$

para toda función $\Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{D}(\hat{A}^{-1})$ tal que $\hat{A}^{-1}\Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{D}(\hat{A})$, y para toda $\Phi(\mathbf{r}) \in \mathcal{D}(\hat{A})$ tal que $\hat{A}\Phi(\mathbf{r}) \in \mathcal{D}(\hat{A}^{-1})$. Dando por supuestas las matizaciones precisas en los dominios, podemos escribir sencillamente que

$$\hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{I}.$$

§ 3. Dentro del conjunto de los operadores lineales definidos en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ se pueden definir algunos subconjuntos caracterizados a través del producto escalar. Si seguimos la siguiente notación:

$$\langle \Psi | \hat{A} \Phi \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi^*(\mathbf{r}) \{\hat{A}\Phi(\mathbf{r})\} d^N \mathbf{r} ; \quad \langle \hat{A} \Psi | \Phi \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \{\hat{A}\Psi(\mathbf{r})\}^* \Phi(\mathbf{r}) d^N \mathbf{r}$$

tenemos tres clases importantes de operadores lineales:

a) *Operadores unitarios* (que conservan el producto escalar)

$$\hat{U} \text{ es unitario} \Leftrightarrow \langle \hat{U} \Psi | \hat{U} \Phi \rangle = \langle \Psi | \Phi \rangle \quad \forall \Psi(\mathbf{r}), \Phi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N). \quad (4.31)$$

b) *Operadores simétricos*:

$$\hat{A} \text{ es simétrico} \Leftrightarrow \langle \Psi | \hat{A} \Phi \rangle = \langle \hat{A} \Psi | \Phi \rangle \quad \forall \Psi(\mathbf{r}), \Phi(\mathbf{r}) \in \mathcal{D}(\hat{A}). \quad (4.32)$$

c) *Proyectores [ortogonales]*:

$$\hat{P} \text{ es proyector} \Leftrightarrow \hat{P} \text{ es simétrico y } \hat{P}^2 \Psi(\mathbf{r}) = \hat{P} \Psi(\mathbf{r}) \quad \forall \Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N). \quad (4.33)$$

Observe que se da por supuesto que los operadores unitarios y los proyectores tienen como dominio todo el espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$.

- Los operadores unitarios se utilizan en física cuántica: **(i)** para estudiar la evolución temporal de la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$, **(ii)** para expresar formalmente cambios de [base de] representación, **(iii)** para estudiar propiedades de simetría.
- Los proyectores se emplean para calcular probabilidades de ocurrencia.
- Los operadores simétricos, finalmente, representan a las magnitudes físicas y se usan en el cálculo de valores medios e incertidumbres.
- Estos tres tipos de operadores satisfacen las siguientes propiedades de interés que no son muy difíciles de demostrar (ha debido estudiarlas en asignaturas de Álgebra Lineal, si bien restringidas a espacios de dimensión finita):

- (a) Si $\mathcal{B} = \{\Phi_1(\mathbf{r}), \Phi_2(\mathbf{r}), \dots\}$ es una base ortonormal de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ y \hat{U} un operador unitario, entonces $\{\hat{U}\Phi_1(\mathbf{r}), \hat{U}\Phi_2(\mathbf{r}), \dots\}$ también es base ortonormal de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$.
 (b) Si \mathcal{W} es un subespacio de Hilbert de dimensión algebraica N (finita o infinita numerable), $\mathcal{B}_{\mathcal{W}} = \{\Phi_1(\mathbf{r}), \dots, \Phi_N(\mathbf{r})\}$ una de sus bases ortonormales y $\Psi_{\mathcal{W}}(\mathbf{r})$ la proyección ortogonal sobre \mathcal{W} de una función $\Psi(\mathbf{r})$, entonces el operador $\hat{\mathcal{P}}_{\mathcal{W}}$ definido como

$$\hat{\mathcal{P}}_{\mathcal{W}}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi_{\mathcal{W}}(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^N \langle \Phi_n | \Psi \rangle \Phi_n(\mathbf{r}) \quad \text{para todo } \Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N) \quad (4.34)$$

es un proyector. Como consecuencia inmediata, $\hat{I} - \hat{\mathcal{P}}_{\mathcal{W}}$ es el proyector sobre \mathcal{W}^\perp . Recíprocamente, la actuación de un proyector $\hat{\mathcal{P}}$ es igual a la proyección ortogonal sobre el subespacio de Hilbert de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ que coincide con su recorrido.

- (c) Si $\hat{\mathcal{P}}$ es un proyector

$$\langle \hat{\mathcal{P}}\Psi | \hat{\mathcal{P}}\Phi \rangle = \langle \Psi | \hat{\mathcal{P}}\Phi \rangle = \langle \hat{\mathcal{P}}\Psi | \Phi \rangle \quad \text{para todos } \Psi(\mathbf{r}), \Phi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N) \quad (4.35)$$

- (d) Si α, β son escalares *reales*, entonces

$$\hat{A}, \hat{B} \text{ simétricos} \Rightarrow \begin{cases} \alpha\hat{A} + \beta\hat{B}, \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}, \text{i}\alpha(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}), \hat{A}^n, \hat{B}^n \\ \text{son también simétricos} \end{cases} \quad (4.36)$$

§ 4. Dado un operador lineal \hat{A} , se define su **adjunto** \hat{A}^\dagger como el operador con mayor dominio posible tal que

$$\langle \Psi | \hat{A}\Phi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \Psi | \Phi \rangle \quad \text{para todos } \Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{D}(\hat{A}^\dagger), \Phi(\mathbf{r}) \in \mathcal{D}(\hat{A}). \quad (4.37)$$

Algunas propiedades del operador adjunto son las siguientes (no prestamos atención a los dominios de definición):

$$\begin{aligned} (\hat{A} + \hat{B})^\dagger &= \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger & (\lambda\hat{A})^\dagger &= \lambda^*\hat{A}^\dagger \\ (\hat{A}\hat{B})^\dagger &= \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger & (\hat{A}^{-1})^\dagger &= (\hat{A}^\dagger)^{-1} \end{aligned} \quad (4.38)$$

cuya demostración es sencilla a partir de la definición (4.37).

Se dice que un operador es **autoadjunto** si coincide con su adjunto (regla de actuación y dominio), esto es, que cumple que $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ y que $\mathcal{D}(\hat{A}) = \mathcal{D}(\hat{A}^\dagger)$. Como consecuencia, \hat{U} es unitario si $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$.

Hay que hacer notar que los operadores simétricos no tienen por qué ser autoadjuntos en un espacio de Hilbert de dimensión infinita. Si \hat{A} es simétrico

entonces las reglas de actuación de \hat{A} y \hat{A}^\dagger coinciden, pero el dominio del adjunto puede ser más amplio. Sólo cuando los dominios de \hat{A} y \hat{A}^\dagger son iguales se puede afirmar que \hat{A} es también autoadjunto. Vemos así que los proyectores son autoadjuntos porque su dominio es todo $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$.

§ 5. Resulta muy conveniente definir el *conmutador* de dos operadores \hat{A} y \hat{B} como

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (4.39)$$

y se dice que dos operadores \hat{A} y \hat{B} *comutan* si $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{0}$, esto es, si el orden en su producto o composición es irrelevante.

El conmutador satisface las siguientes propiedades:

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}] &= -[\hat{B}, \hat{A}] & [\lambda\hat{A}, \hat{B}] &= [\hat{A}, \lambda\hat{B}] = \lambda[\hat{A}, \hat{B}] \quad \text{con } \lambda \in \mathbb{C} \\ [\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] &= [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}] & [\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] &= [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}] \\ [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] & [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] &= \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \\ [\hat{A}, \hat{B}]^\dagger &= -[\hat{A}^\dagger, \hat{B}^\dagger] & \text{Si } [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{0} \text{ entonces } [f(\hat{A}), g(\hat{B})] = \hat{0}. \end{aligned} \quad (4.40)$$

La demostración de todas ellas es sencilla. Por ejemplo:

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} \\ &= (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{C} + \hat{B}(\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}) = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \end{aligned}$$

(fíjese que hay que ser cuidadosos con el orden en la composición de operadores).

4.5. REPRESENTACIÓN MATRICIAL DE UN OPERADOR

§ 1. En los desarrollos formales de la teoría, y también en sus aplicaciones prácticas, es de bastante utilidad el concepto de *representación matricial* de un operador.

Consideremos un operador lineal \hat{A} , no necesariamente autoadjunto, y una base ortonormal $\mathcal{B} = \{\Phi_n(\mathbf{r})\}$ de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ contenida tanto en su dominio como en el del operador adjunto \hat{A}^\dagger . Definamos los *elementos de matriz* del operador en la base \mathcal{B} como la colección de números complejos $\mathbb{A}_{i,j} \equiv \langle \Phi_i | \hat{A} \Phi_j \rangle$. A partir de ellos

definimos la *representación matricial* del operador en dicha base como la matriz

$$\boxed{\mathbb{A} \equiv \begin{pmatrix} \mathbb{A}_{1,1} & \mathbb{A}_{1,2} & \mathbb{A}_{1,3} & \dots \\ \mathbb{A}_{2,1} & \mathbb{A}_{2,2} & \mathbb{A}_{2,3} & \dots \\ \mathbb{A}_{3,1} & \mathbb{A}_{3,2} & \mathbb{A}_{3,3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \text{ con } \mathbb{A}_{i,j} \equiv \langle \Phi_i | \hat{A} \Phi_j \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \Phi_i^*(\mathbf{r}) (\hat{A} \Phi_j(\mathbf{r})) d^{3N} \mathbf{r}} \quad (4.41)$$

- Supongamos que $\hat{A}\Psi(\mathbf{r})$ es el resultado de la actuación del operador \hat{A} sobre una función $\Psi(\mathbf{r})$. Si $z_n = \langle \Phi_n | \hat{A}\Psi \rangle$ y $c_n = \langle \Phi_n | \Psi \rangle$ son las coordenadas de $\hat{A}\Psi(\mathbf{r})$ y $\Psi(\mathbf{r})$ en la base \mathcal{B} , respectivamente, se cumple que

$$z_n = \sum_{i=1}^{\infty} \mathbb{A}_{n,i} c_i, \quad (4.42)$$

En efecto, por la linealidad del operador \hat{A} y la del producto escalar,

$$z_n = \langle \Phi_n | \hat{A}\Psi \rangle = \langle \Phi_n | \hat{A} \left(\sum_i c_i \Phi_i \right) \rangle \stackrel{(*)}{=} \sum_{i=1}^{\infty} c_i \langle \Phi_n | \hat{A} \Phi_i \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \mathbb{A}_{n,i} c_i,$$

donde al final hemos usado la definición (4.41) de elemento de matriz.¹² Las coordenadas z_n de $\hat{A}\Psi(\mathbf{r})$ están así dadas por la actuación de la matriz \mathbb{A} sobre la ∞ -upla formada por las coordenadas c_n de $\Psi(\mathbf{r})$, esto es,

$$\boxed{\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{A}_{1,1} & \mathbb{A}_{1,2} & \mathbb{A}_{1,3} & \dots \\ \mathbb{A}_{2,1} & \mathbb{A}_{2,2} & \mathbb{A}_{2,3} & \dots \\ \mathbb{A}_{3,1} & \mathbb{A}_{3,2} & \mathbb{A}_{3,3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix}} \quad (4.43)$$

- Si \mathbb{J} es la representación matricial de un segundo operador \hat{J} y la base de representación \mathcal{B} también está contenida en el dominio de \hat{J} y en el de su adjunto,

¹² El paso (*) puede resultar dudoso ya que aplicamos la linealidad de \hat{A} a una suma infinita. El que la base \mathcal{B} pertenezca al dominio de \hat{A}^\dagger permite hacerlo:

$$\langle \Phi_n | \hat{A} \left(\sum_i c_i \Phi_i \right) \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \Phi_n | \sum_i c_i \Phi_i \rangle = \sum_i c_i \langle \hat{A}^\dagger \Phi_n | \Phi_i \rangle = \sum_i c_i \langle \Phi_n | \hat{A} \Phi_i \rangle,$$

ya que el producto escalar es lineal sobre sumas infinitas al estar en un espacio de Hilbert (esa es, justamente, la ventaja de trabajar con espacios de este tipo).

entonces

$$\text{Si } \hat{F} = \hat{A} + \hat{J}, \quad \mathbb{F}_{i,j} = \mathbb{A}_{i,j} + \mathbb{J}_{i,j} \quad \Rightarrow \quad \mathbb{F} = \mathbb{A} + \mathbb{J} \quad (4.44)$$

$$\text{Si } \hat{S} = \lambda \hat{A}, \quad \mathbb{S}_{i,j} = \lambda \mathbb{A}_{i,j} \quad \Rightarrow \quad \mathbb{S} = \lambda \mathbb{A} \quad (4.45)$$

$$\text{Si } \hat{G} = \hat{A}\hat{J}, \quad \mathbb{G}_{i,j} = \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{A}_{i,n} \mathbb{J}_{n,j} \quad \Rightarrow \quad \mathbb{G} = \mathbb{A}\mathbb{J} \quad (4.46)$$

donde λ es un escalar complejo. Estas relaciones profundizan en la conexión entre operador y representación matricial ya que las operaciones entre operadores lineales (suma, producto por un escalar y composición o producto) se trasladan a sus equivalentes en el álgebra de matrices.¹³

Esta correspondencia entre operadores y representaciones matriciales también se refleja en los siguientes enunciados:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{0} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbb{A}\mathbb{B} = \mathbb{B}\mathbb{A} \quad (4.47)$$

$$\hat{U} \text{ es unitario} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbb{U}^\dagger \mathbb{U} = \mathbb{U}\mathbb{U}^\dagger = \mathbb{I} \quad (4.48)$$

$$\hat{A} \text{ es simétrico} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbb{A} = \mathbb{A}^\dagger \quad (4.49)$$

$$\hat{P} \text{ es proyector} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbb{P} = \mathbb{P}^\dagger \quad \text{y} \quad \mathbb{P}^2 = \mathbb{P} \quad (4.50)$$

donde \mathbb{A}^\dagger representa la matriz traspuesta conjugada de \mathbb{A} ($\mathbb{A}_{i,j}^\dagger = \mathbb{A}_{j,i}^*$) e \mathbb{I} es la matriz unidad ($\mathbb{I}_{i,j} = \delta_{i,j}$). Vemos así que un operador simétrico está representado por una matriz hermítica (coincide con su traspuesta conjugada) y que un operador unitario lo está por una matriz unitaria (su inversa es igual a su traspuesta conjugada).

Finalmente, puesto que (4.43) proporciona la n -ésima coordenada de $\hat{A}\Psi(\mathbf{r})$ en la base \mathcal{B} , tenemos que

$$\hat{A}\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \Phi_n | \hat{A}\Psi \rangle \Phi_n(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{\infty} \mathbb{A}_{n,i} \langle \Phi_i | \Psi \rangle \Phi_n(\mathbf{r}), \quad (4.51)$$

expresión que define la regla de actuación de \hat{A} en términos de su representación matricial.

¹³ Por ejemplo, la demostración de (4.46) es la siguiente: $\mathbb{G}_{i,j} = \langle \Phi_i | \hat{A}\hat{B}\Phi_j \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \Phi_i | \hat{B}\Phi_j \rangle \stackrel{(1)}{=} \sum_{n=1}^{\infty} \langle \hat{A}^\dagger \Phi_i | \Phi_n \rangle \langle \Phi_n | \hat{B} | \Phi_j \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \Phi_i | \hat{A}\Phi_n \rangle \langle \Phi_n | \hat{B}\Phi_j \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{A}_{i,n} \mathbb{B}_{n,j}$ donde en el paso (1) hemos expresado el producto escalar en términos de las coordenadas en la base \mathcal{B} .

EJEMPLO 4.b. (!) Algunos operadores simétricos

Consideremos el espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ en el que definimos los operadores lineales \hat{x} y $\hat{\pi}_x$ como

$$\hat{x}\Psi(\mathbf{r}) = x\Psi(\mathbf{r}) \quad ; \quad \hat{\pi}_x\Psi(\mathbf{r}) = -i\frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial x}.$$

Determine sus dominios (por convenio, los más amplios posibles) y demuestre que son simétricos. ¿Son también autoadjuntos?

Solución:

El dominio $\mathcal{D}(\hat{x})$ está formado por todas las funciones de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ para las que $x\Psi(\mathbf{r})$ es de cuadrado integrable, mientras que $\mathcal{D}(\hat{\pi}_x)$ está compuesto por aquellas funciones normalizables derivables para las que su derivada respecto de x también es normalizable.

El carácter simétrico de \hat{x} es inmediato:

$$\langle \Psi | \hat{x} \Phi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}) (x\Phi(\mathbf{r})) d^3\mathbf{r} = \int_{\mathbb{R}^3} (x\Psi(\mathbf{r}))^* \Phi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \langle \hat{x}\Psi | \Phi \rangle,$$

donde en el segundo paso hemos usado que x únicamente toma valores reales.

En cuanto a $\hat{\pi}_x$, partamos de

$$\langle \Psi | \hat{\pi}_x \Phi \rangle = -i \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}) \frac{\partial\Phi(\mathbf{r})}{\partial x} d^3\mathbf{r} = -i \int_{\mathbb{R}^2} \left[\int_{\mathbb{R}} \Psi^*(\mathbf{r}) \frac{\partial\Phi(\mathbf{r})}{\partial x} dx \right] dy dz.$$

Si hacemos una integración por partes en la integral sobre x y tenemos en cuenta que, puesto que son normalizables, las funciones $\Psi(\mathbf{r})$ y $\Phi(\mathbf{r})$ se anulan cuando $x \rightarrow \pm\infty$ queda que

$$\langle \Psi | \hat{\pi}_x \Phi \rangle = +i \int_{\mathbb{R}^2} \left[\int_{\mathbb{R}} \frac{\partial\Psi^*(\mathbf{r})}{\partial x} \Phi(\mathbf{r}) dx \right] dy dz = +i \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\partial\Psi^*(\mathbf{r})}{\partial x} \Phi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}.$$

Ya sólo queda usar que el complejo conjugado de la derivada es la derivada del complejo conjugado para llegar a que

$$\langle \Psi | \hat{\pi}_x \Phi \rangle = +i \int_{\mathbb{R}^3} \left[\frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial x} \right]^* \Phi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \int_{\mathbb{R}^3} \left[-i\frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial x} \right]^* \Phi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \langle \hat{\pi}_x \Psi | \Phi \rangle,$$

quedando así probado que $\hat{\pi}_x$ es simétrico.

Los dominios de estos operadores simétricos se han obtenido imponiendo restricciones mínimas a $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$. Los operadores adjuntos no pueden tener así dominios más amplios y, en consecuencia, los operadores \hat{x} y $\hat{\pi}_x$ son también autoadjuntos.

Observe que de idéntica manera se demostraría que los operadores

$$\hat{y}\Psi(\mathbf{r}) = y\Psi(\mathbf{r}) ; \quad \hat{z}\Psi(\mathbf{r}) = z\Psi(\mathbf{r}) ; \quad \hat{\pi}_y\Psi(\mathbf{r}) = -i\frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial y} ; \quad \hat{\pi}_z\Psi(\mathbf{r}) = -i\frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial z}$$

son autoadjuntos. Todos estos operadores van a ser esenciales en la descripción de las magnitudes físicas que expondremos en el próximo capítulo.

4.6. ESPACIO DE LOS ESTADOS. NOTACIÓN DE DIRAC

§ 1. Como hemos visto en §4.3.4, ecuación (4.19), un estado cuántico queda perfectamente definido por sus coordenadas $\{c_n, c_\lambda\}$ en una base de representación. Podemos entonces decir que los estados físicos realizables de una partícula forman una estructura algebraica abstracta llamada *espacio [de Hilbert] de los estados de la partícula*, que designaremos genéricamente como \mathcal{E} . Los espacios de Hilbert de funciones $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ (representaciones en posiciones o en momentos), el de sucesiones complejas \mathbb{C}_2^∞ (representaciones algebraicas) y el de los estados \mathcal{E} de una partícula puntual resultan ser así *isomorfos*.

Si trabajamos en el espacio de los estados \mathcal{E} es conveniente adoptar una notación debida a Dirac:¹⁴ el estado cuya función de onda es $\Psi(\mathbf{r}, t)$ tiene asignado un *vector de estado* (o simplemente *estado*) perteneciente a \mathcal{E} que se suele simbolizar mediante un “*ket*” $|\Psi(t)\rangle$. Estos vectores de estado se describen *explícitamente* por sus coordenadas en una cierta base de representación de \mathcal{E} ; los elementos de esta base tienen unas propiedades físicas definidas. Aplicando el principio de superposición se obtendrán las características de cualquier estado a partir de sus coordenadas.

Por ejemplo, la base de la representación en posiciones está formada por los estados (no realizable) $|\delta_{\mathbf{a}}\rangle$ con posición bien definida. Todo vector de estado se expresa en un instante t cualquiera como (vea las ecuaciones (4.16) y (4.17))

$$|\Psi(t)\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi(\mathbf{a}, t) |\delta_{\mathbf{a}}\rangle d^3\mathbf{a} \quad (4.52)$$

con $\Psi(\mathbf{a}, t) = \langle \delta_{\mathbf{a}} | \Psi(t) \rangle$ y siendo $|\Psi(\mathbf{a}, t)|^2 = |\langle \delta_{\mathbf{a}} | \Psi(t) \rangle|^2$ proporcional a la densidad de probabilidad de detectar a la partícula en \mathbf{a} , que es precisamente la posición de una partícula en el estado $|\delta_{\mathbf{a}}\rangle$.

Lo mismo sucedería en la representación en momentos: el módulo al cuadrado de la coordenada $\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t)$, $|\langle \theta_{\mathbf{q}} | \tilde{\Psi}(t) \rangle|^2$, del estado en esta representación es, salvo constante multiplicativa, la densidad de probabilidad de que al medir el momento lineal se obtenga el valor \mathbf{q} , el que corresponde al estado de De Broglie $|\theta_{\mathbf{q}}\rangle$.

¹⁴ Paul Adrien Maurice Dirac (1902-1984), fue uno de los más grandes físicos teóricos del Siglo XX (y para algunos *el más grande*). Unificó las formulaciones de la mecánica cuántica que Heisenberg-Born-Jordan y Schrödinger presentaron en 1925 y 1926, respectivamente, y fue el padre de la mecánica cuántica relativista. Su circunspección llegaba hasta tal punto que sus colegas definieron en broma el “dirac” como la unidad mínima de información relevante. Fue autor de un célebre tratado, *Principles of Quantum Mechanics*, que sigue siendo pasados ochenta años desde su primera edición una de las exposiciones más claras de la teoría cuántica.

En general, las coordenadas de un vector de estado tendrán un significado físico directo relacionado con las propiedades de los estados cuyos kets forman la base de representación que hemos escogido.

Análogamente a lo discutido en la **Sección 4.4**, se pueden definir operadores lineales en el espacio de los estados \mathcal{E} , y sus reglas de actuación quedan determinadas por las representaciones matriciales correspondientes en cada base del espacio \mathcal{E} .

§ 2. Las operaciones básicas en \mathcal{E} (suma de kets, producto de un ket por un escalar y actuación de un operador) se expresan como

$$|\Psi\rangle + |\Phi\rangle \equiv |\Phi + \Psi\rangle \quad ; \quad \lambda|\Psi\rangle \equiv |\lambda\Psi\rangle \quad ; \quad \hat{A}|\Psi\rangle \equiv |\hat{A}\Psi\rangle. \quad (4.53)$$

Esta notación alcanza toda su potencia si recordamos un resultado básico del álgebra lineal. El producto escalar de dos vectores de estado $|\Theta\rangle$ y $|\Phi\rangle$ puede también verse como la actuación de un *covector* o *forma lineal* sobre el ket $|\Phi\rangle$, cuyo resultado es el producto escalar $\langle\Theta|\Phi\rangle$. Así, todo ket $|\Theta\rangle$ tiene asociado una forma lineal, que Dirac simbolizó mediante el “*bra*” $\langle\Theta|$, de modo que su actuación sobre $|\Phi\rangle$ es

$$\langle\Theta||\Phi\rangle = \langle\Theta|\Phi\rangle. \quad (4.54)$$

Entonces, la doble barra que separa la actuación del covector sobre el vector de estado resulta redundante.¹⁵ Se dice que el bra $\langle\Theta|$ representa la *forma lineal conjugada o dual* del vector $|\Theta\rangle$. Recíprocamente, todo covector $\langle\Psi|$ tiene asociado un único vector de estado $|\Psi\rangle$; en el caso de combinaciones lineales la correspondencia es

$$\lambda|\Phi\rangle + \mu|\Theta\rangle = |\lambda\Phi + \mu\Theta\rangle \quad \longleftrightarrow \quad \langle\lambda\Phi + \mu\Theta| = \lambda^*\langle\Phi| + \mu^*\langle\Theta|. \quad (4.55)$$

donde los complejos conjugados aparecen por consistencia con las propiedades del producto escalar.

Nótese que los kets correspondientes a estados límites ideales (representados por funciones de onda no normalizables) se pueden introducir rigurosamente a través de sus formas duales (consúltese el **Apéndice B** para más detalles).

§ 3. Por otra parte, el objeto $|\Phi\rangle\langle\Lambda|$ resulta ser un operador lineal ya que su actuación sobre cualquier ket $|\Psi\rangle$ es

$$(|\Phi\rangle\langle\Lambda|)|\Psi\rangle = |\Phi\rangle\langle\Lambda||\Psi\rangle = |\Phi\rangle\langle\Lambda|\Psi\rangle = \langle\Lambda|\Psi\rangle|\Phi\rangle$$

¹⁵ Efectivamente, el producto escalar resulta ser entonces una aplicación que para todo vector $|\Theta\rangle$ de \mathcal{E} le hace corresponder un escalar $\langle\Theta|\Phi\rangle$.

esto es, el vector $|\Phi\rangle$ multiplicado por el escalar complejo $\langle\Theta|\Psi\rangle$.

Si $\mathcal{B}_{\mathcal{W}} = \{|\Phi_1\rangle, |\Phi_2\rangle, \dots\}$ es una base ortonormal de un subespacio de Hilbert \mathcal{W} de \mathcal{E} , la proyección ortogonal (4.23) de un vector de estado $|\Psi\rangle$ sobre \mathcal{W} se expresa como

$$|\Psi_{\mathcal{W}}\rangle = \sum_n \langle\Phi_n|\Psi\rangle |\Phi_n\rangle = \sum_n |\Phi_n\rangle \langle\Phi_n|\Psi\rangle = \left(\sum_n |\Phi_n\rangle \langle\Phi_n| \right) |\Psi\rangle, \quad (4.56)$$

de manera que la suma entre paréntesis será el proyector $\hat{\mathcal{P}}_{\mathcal{W}}$ sobre el subespacio \mathcal{W} .

A su vez, a partir de la correspondencia (4.55), puede probarse que si una cantidad escalar está expresada en términos de kets y bras entonces su compleja conjugada se obtiene invirtiendo el orden de los términos, intercambiando kets por bras, cambiando un operador por su adjunto (si no es simétrico) y tomando los complejos conjugados de los escalares. La obtención del adjunto de un operador \hat{A} se haría siguiendo la misma regla.

A pesar de las virtudes de esta notación, y como corresponde a un curso introductorio en física cuántica, seguiremos describiendo los estados a través de su función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$, es decir, mediante las coordenadas del vector de estado $|\Psi(t)\rangle$ en la representación en posiciones. Únicamente utilizaremos la simbología de Dirac en ocasiones muy específicas (como la de la siguiente sección) y, en cualquier caso, sin explotar todas sus posibilidades.

4.7. EL PRODUCTO TENSORIAL. ENTRELAZAMIENTO

§ 1. Pensemos en una función de onda $\Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ que puede escribirse como

$$\Psi(\mathbf{r}) = \varphi(x)\xi(y)\eta(z),$$

donde cada factor es de cuadrado integrable en la dimensión correspondiente. Naturalmente, no hay problema alguno en tomar el producto anterior como el usual entre escalares complejos. Sin embargo hay un matiz importante si consideramos que estamos hablando de funciones entendidas como objetos matemáticos en sí mismos: mientras que $\Psi(\mathbf{r})$ es una función de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ las funciones $\varphi(x)$, $\xi(y)$ y $\eta(z)$ son funciones de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ que, además, están definidas sobre dominios conceptualmente distintos. La multiplicación $\varphi(x)\xi(y)\eta(z)$ es el producto de tres objetos sustancialmente diferentes, que en lenguaje matemático

se denomina **producto directo** o **producto tensorial**. Si usamos un ket de Dirac para representar a la función $\Psi(\mathbf{r})$ deberemos escribir

$$|\Psi\rangle = |\psi^{(x)}\rangle \otimes |\xi^{(y)}\rangle \otimes |\eta^{(z)}\rangle,$$

donde $|\psi^{(x)}\rangle$ representa una función de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ definida sobre el eje X , $|\xi^{(y)}\rangle$ corresponde a una función de *un espacio de Hilbert distinto* $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ de funciones definidas sobre el eje Y , y lo mismo para el tercero (y de ahí los superíndices, superfluos si se sigue un orden establecido pero que ayudan).

§ 2. Formalmente, dados dos espacios de Hilbert $\mathcal{E}^{(1)}$ y $\mathcal{E}^{(2)}$ se define el producto tensorial o directo de dos kets $|\psi^{(1)}\rangle \in \mathcal{E}^{(1)}$ y $|\phi^{(2)}\rangle \in \mathcal{E}^{(2)}$ como *el* objeto matemático $|\psi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle$. Definiendo la suma entre estos objetos y su producto por un escalar de modo que se cumplan, además de las propias de un espacio lineal, las siguientes propiedades

$$\begin{aligned} |\psi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle + |\psi^{(1)}\rangle \otimes |\xi^{(2)}\rangle &= |\psi^{(1)}\rangle \otimes \left(|\phi^{(2)}\rangle + |\xi^{(2)}\rangle \right) \\ |\psi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle + |\zeta^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle &= \left(|\psi^{(1)}\rangle + |\zeta^{(1)}\rangle \right) \otimes |\phi^{(2)}\rangle \\ \lambda \left(|\psi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle \right) &= \left(\lambda |\psi^{(1)}\rangle \right) \otimes |\phi^{(2)}\rangle = |\psi^{(1)}\rangle \otimes \left(\lambda |\phi^{(2)}\rangle \right) \end{aligned} \quad (4.57)$$

tenemos la garantía de que el conjunto de todos los posibles objetos $|\psi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle$ y sus combinaciones lineales forman un espacio lineal, que llamamos $\mathcal{E}^{(1)} \otimes \mathcal{E}^{(2)}$, y que “hereda” las propiedades de $\mathcal{E}^{(1)}$ y $\mathcal{E}^{(2)}$.

Si para abreviar usamos la notación (muy habitual) $|\psi, \phi\rangle \equiv |\psi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle$, el producto escalar en $\mathcal{E}^{(1)} \otimes \mathcal{E}^{(2)}$ para kets producto directo se define como

$$\langle \psi, \phi | \zeta, \eta \rangle = \langle \psi | \zeta \rangle \langle \phi | \eta \rangle. \quad (4.58)$$

- En este espacio lineal $\mathcal{E}^{(1)} \otimes \mathcal{E}^{(2)}$ habrá entonces dos tipos de kets: aquellos que son iguales a **un** producto directo y los restantes, escritos necesariamente como **sumas** de productos directos distintos entre sí. A los segundos los llamaremos **kets entrelazados** (del inglés *entangled*).¹⁶

Para kets entrelazados se obtendría su expresión a partir de las propiedades de linealidad, como una doble suma de productos escalares entre kets producto

¹⁶ Podrían haberse usado los términos “enredado” o “enmarañado”, pero el de “entrelazado” es el que se ha impuesto en castellano.

directo. Con esta definición se tiene la garantía de que $\mathcal{E}^{(1)} \otimes \mathcal{E}^{(2)}$ es un espacio de Hilbert.

- Si tenemos dos bases ortonormales de los espacios $\mathcal{E}^{(1)}$ y $\mathcal{E}^{(2)}$, $\mathcal{B}^{(1)} = \{|\Phi_1^{(1)}\rangle, |\Phi_2^{(1)}\rangle, \dots\}$ y $\mathcal{B}^{(2)} = \{|\vartheta_1^{(2)}\rangle, |\vartheta_2^{(2)}\rangle, \dots\}$, entonces el conjunto formado por los kets

$$|\Phi_j^{(1)}, \vartheta_n^{(2)}\rangle \equiv |\Phi_j^{(1)}\rangle \otimes |\vartheta_n^{(2)}\rangle \quad \text{con } j = 1, 2, \dots; \quad n = 1, 2, \dots$$

es una base ortonormal de $\mathcal{E}^{(1)} \otimes \mathcal{E}^{(2)}$. De hecho la manera más sencilla de construir $\mathcal{E}^{(1)} \otimes \mathcal{E}^{(2)}$ es hallar una base ortonormal siguiendo el procedimiento que acabamos de presentar y definir las sumas, el producto por un escalar y el producto escalar a través de las coordenadas de los kets en esa base.

- Si $\hat{A}^{(1)}$ es un operador lineal definido en $\mathcal{E}^{(1)}$, su regla de actuación sobre un ket producto directo es

$$\hat{A}^{(1)} \left(|\psi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle \right) = |\hat{A}^{(1)}\psi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle \quad \text{con } |\hat{A}^{(1)}\psi^{(1)}\rangle \equiv \hat{A}^{(1)}|\psi^{(1)}\rangle \quad (4.59)$$

(como resulta lógico). Análogo resultado se tiene para un operador lineal $\hat{A}^{(2)}$ del espacio de Hilbert $\mathcal{E}^{(2)}$. Las reglas de actuación sobre kets entrelazados se tienen entonces directamente de las propiedades de linealidad de los operadores; por ejemplo:

$$\hat{A}^{(2)} \left(|\psi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle + |\eta^{(1)}\rangle \otimes |\varphi^{(2)}\rangle \right) = |\psi^{(1)}\rangle \otimes |\hat{A}^{(2)}\phi^{(2)}\rangle + |\eta^{(1)}\rangle \otimes |\hat{A}^{(2)}\varphi^{(2)}\rangle.$$

Por construcción, los operadores $\hat{A}^{(1)}$ y $\hat{A}^{(2)}$, cuando actúan como operadores definidos en $\mathcal{E}^{(1)} \otimes \mathcal{E}^{(2)}$, comutan entre sí.

§ 3. La definición de producto tensorial se puede extender a tres o más espacios de Hilbert. Por ejemplo, consideremos las bases ortonormales $\{\varphi_n(x)\}$, $\{\xi_n(y)\}$, $\{\eta_n(z)\}$ con $n = 1, 2, 3, \dots$ de los espacios de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ de las funciones definidas sobre el eje X , Y y Z , respectivamente. Construyamos el subconjunto de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$

$$\Phi_{n_x, n_y, n_z}(\mathbf{r}) = \varphi_{n_x}(x) \xi_{n_y}(y) \eta_{n_z}(z) \quad \text{con} \quad \begin{cases} n_x = 1, 2, \dots \\ n_y = 1, 2, \dots \\ n_z = 1, 2, \dots \end{cases}$$

resultado de multiplicar (tensorialmente) entre sí todas las funciones de las tres bases de los espacios $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Este conjunto es una base ortonormal de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ y, por tanto,

$$\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{R}).$$

La demostración es sencilla. Si nos fijamos únicamente en la dependencia en x de una función $\Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, ésta puede escribirse como

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{n_x=1}^{\infty} \psi_{n_x}(y, z) \varphi_{n_x}(x) \quad \text{con } \psi_{n_x}(y, z) = \int_{\mathbb{R}} \varphi_{n_x}^*(x) \Psi(\mathbf{r}) dx$$

Si ahora consideramos que $\psi_{n_x}(y, z)$ es una función de y

$$\psi_{n_x}(y, z) = \sum_{n_y=1}^{\infty} \psi_{n_x, n_y}(z) \xi_{n_y}(y) \quad \text{con } \psi_{n_x, n_y}(z) = \int_{\mathbb{R}} \xi_{n_y}^*(y) \psi_{n_x}(y, z) dy$$

y, finalmente,

$$\psi_{n_x, n_y}(z) = \sum_{n_z=1}^{\infty} c_{n_x, n_y, n_z} \eta_{n_z}(z) \quad \text{con } c_{n_x, n_y, n_z} = \int_{\mathbb{R}} \eta_{n_z}^*(z) \psi_{n_x, n_y}(z) dz.$$

Uniendo todos los resultados llegamos que para cualquier $\Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}) &= \sum_{n_x=1}^{\infty} \sum_{n_y=1}^{\infty} \sum_{n_z=1}^{\infty} c_{n_x n_y, n_z} \Phi_{n_x n_y, n_z}(\mathbf{r}) \\ \text{con } \Phi_{n_x n_y, n_z}(\mathbf{r}) &\equiv \varphi_{n_x}(x) \xi_{n_y}(y) \eta_{n_z}(z) \\ \text{y } c_{n_x n_y, n_z} &= \int_{\mathbb{R}^3} \Phi_{n_x n_y, n_z}^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} = \langle \Phi_{n_x, n_y, n_z} | \Psi \rangle, \end{aligned} \tag{4.60}$$

como queríamos demostrar.

Físicamente, si en un instante dado la función de onda $\Psi(\mathbf{r})$ es un producto directo, las propiedades dinámicas de la partícula relativas a su evolución a lo largo de las direcciones X, Y, Z están desacopladas. Por ejemplo, si $\Psi(\mathbf{r}) = \varphi(x)\xi(y)\eta(z)$ entonces los valores medios e incertidumbres de x y p_x sólo dependen de $\varphi(x)$, siendo irrelevante cómo se comporten las otras dos funciones $\xi(y)$ y $\eta(z)$. Sin embargo, lo más habitual es que la función de onda de una partícula no sea factorizable.

§ 4. El producto tensorial nos servirá para describir sistemas físicos resultado de la unión de subsistemas más simples. Pensemos en un sistema formado por *dos* partículas puntuales distinguibles. Si \mathbf{r}_1 es la posición de la primera y \mathbf{r}_2 la de la segunda, el espacio de Hilbert de las funciones de onda del sistema compuesto estará formado por funciones producto directo $\Phi(\mathbf{r}_1)\Psi(\mathbf{r}_2)$ (una dependiente de \mathbf{r}_1

y otra de \mathbf{r}_2) y cualquier combinación lineal entre ellas. Si el sistema se encuentra en un estado dado por la función de onda entrelazada $\alpha\Phi(\mathbf{r}_1)\Psi(\mathbf{r}_2) + \beta\Omega(\mathbf{r}_1)\Gamma(\mathbf{r}_2)$ con α y β escalares complejos no nulos, es imposible hablar de dinámicas separadas para las partículas ya que están correlacionadas entre sí.

El entrelazamiento, término acuñado por Erwin Schrödinger, es una de las características más distintivas de la física cuántica. Conceptualmente es la consecuencia necesaria del principio de superposición, pero su importancia va más allá de la mera linealidad de las leyes básicas de la física cuántica. Siguiendo a Abner Shimony, la teoría cuántica se caracteriza por la *indefinición objetiva* (el principio de incertidumbre), el *azar objetivo* (la posibilidad de predecir probabilidades de ocurrencia a partir de la función de onda) y el *entrelazamiento*.

PROBLEMAS PROPUESTOS

PROBLEMA 4.1. *Estados con posición o momento definidos*

Consideremos los estados cuánticos no realizables $|\theta_{\mathbf{q}}\rangle$ y $|\delta_{\mathbf{a}}\rangle$ de una partícula, que corresponden a situaciones en las que la partícula tiene un valor \mathbf{q} del momento perfectamente definido y un valor \mathbf{a} de la posición libre de incertidumbre, respectivamente. Halle sus funciones de onda $\tilde{\theta}_{\mathbf{q}}(\mathbf{p})$ y $\tilde{\delta}_{\mathbf{a}}(\mathbf{p})$ en la representación en momentos.

PROBLEMA 4.2. *Unicidad de la proyección ortogonal*

Demuestre que la proyección ortogonal es única, esto es, que si \mathcal{W} es un subespacio de Hilbert de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, toda función $\Psi(\mathbf{r})$ puede escribirse de manera *única* como

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi_{\mathcal{W}}(\mathbf{r}) + \Psi_{\mathcal{W}^\perp}(\mathbf{r}) \quad \text{con} \quad \Psi_{\mathcal{W}}(\mathbf{r}) \in \mathcal{W} \quad \text{y} \quad \Psi_{\mathcal{W}^\perp}(\mathbf{r}) \perp \mathcal{W}.$$

Sugerencia: Proceda por reducción al absurdo y suponga que hay otra posible descomposición $\Psi(\mathbf{r}) = \Phi_{\mathcal{W}}(\mathbf{r}) + \Phi_{\mathcal{W}^\perp}(\mathbf{r})$. Restando miembro a miembro compruebe que $\|\Psi_{\mathcal{W}} - \Phi_{\mathcal{W}}\| = 0$ lo que únicamente es posible si $\Psi_{\mathcal{W}}(\mathbf{r}) = \Phi_{\mathcal{W}}(\mathbf{r})$.

PROBLEMA 4.3. *Propiedades de las bases de representación*

Pensemos en un conjunto discreto de funciones de norma unidad $\{\Phi_n(\mathbf{r})\}$, en otro conjunto continuo $\{\Lambda_\lambda(\mathbf{r})\}$ formado por funciones no normalizables y en la unión \mathcal{B} de ambos. Todas las funciones de \mathcal{B} son ortogonales entre sí y el producto escalar de las $\Lambda_\lambda(\mathbf{r})$ con cualquier función de Schwartz es finito. Demuestre que:

- a) Si \mathcal{B} es una base de representación, el producto escalar y la norma obedecen las relaciones (4.20) y (4.21).
- b) La condición necesaria y suficiente para que el conjunto ortogonal \mathcal{B} sea base de representación de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ es que satisfaga la relación de cierre (4.22),

$$\sum_n \Phi_n^*(\mathbf{r}) \Phi_n(\mathbf{r}') + \int \Lambda_\lambda^*(\mathbf{r}) \Lambda_\lambda(\mathbf{r}') d\lambda = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

PROBLEMA 4.4. *Propiedad de los operadores simétricos*

Si \hat{A} y \hat{B} son operadores simétricos y α, β escalares *reales*, demuestre que también son simétricos los operadores \hat{A}^n , $\alpha\hat{A} + \beta\hat{B}$, $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ y $i(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$ con $n \in \mathbb{N}$.

PROBLEMA 4.5. *Propiedades de los proyectores ortogonales*

En el espacio $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ consideremos los proyectores ortogonales $\hat{\mathcal{P}}$. Demuestre las siguientes propiedades:

- i) Si \mathcal{W} es el subespacio sobre el que proyecta $\hat{\mathcal{P}}$, entonces $\hat{\mathcal{P}}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r})$ si $\Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{W}$ y $\hat{\mathcal{P}}\Phi(\mathbf{r}) = 0$ si $\Phi(\mathbf{r}) \in \mathcal{W}^\perp$.
- ii) $\hat{\mathcal{P}}$ es autoadjunto e idempotente, esto es, que cumple que $\hat{\mathcal{P}}^\dagger = \hat{\mathcal{P}}$ y que $\hat{\mathcal{P}}^2 = \hat{\mathcal{P}}$.
- iii) Si $\hat{\mathcal{P}}_i$ son los proyectores ortogonales sobre los subespacios \mathcal{W}_i ($i = 1, 2$),

$$\mathcal{W}_1 \perp \mathcal{W}_2 \Leftrightarrow \hat{\mathcal{P}}_1 \hat{\mathcal{P}}_2 = \hat{\mathcal{P}}_2 \hat{\mathcal{P}}_1 = \hat{0}.$$

- iv) Si \mathcal{W}_1 y \mathcal{W}_2 son dos subespacios ortogonales entre sí y $\hat{\mathcal{P}}_1$, $\hat{\mathcal{P}}_2$ son los proyectores ortogonales correspondientes, entonces $\hat{\mathcal{P}}_1 + \hat{\mathcal{P}}_2$ es el proyector ortogonal sobre el subespacio *suma directa* $\mathcal{W}_1 \oplus \mathcal{W}_2$, formado por todas las funciones iguales a una suma de una función de \mathcal{W}_1 más otra función de \mathcal{W}_2 .

TEMA 5

MAGNITUDES FÍSICAS Y OPERADORES

Una vez que hemos definido una estructura matemática a la que pertenecen las funciones de onda de una partícula, el espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, estamos en disposición de ver cómo se representan las magnitudes físicas en mecánica cuántica.

Consideremos una cierta magnitud física escalar A correspondiente a una partícula puntual de masa M . El principio de incertidumbre de Heisenberg implica que el valor “clásico” de A no tiene por qué estar perfectamente definido en todos los estados cuánticos: una medida de A dará en general un resultado impredecible. A pesar de ello, la probabilidad de obtener un cierto resultado en una medida de A se podrá obtener a partir de la función de onda del estado cuántico. En el **capítulo 3** vimos que éste era el caso para las componentes de la posición y del momento lineal. El objetivo del presente capítulo será extender aquellos resultados a cualquier magnitud física medible.

A partir de la interpretación probabilística básica de la función de onda obtendremos un conjunto de operadores lineales autoadjuntos que representan de manera natural las componentes de la posición y el momento lineal de la partícula. A partir de ellos hallaremos, mediante una serie de argumentos de correspondencia, los operadores representativos del resto de magnitudes físicas de interés (energía cinética, potencial, momento angular, etc.).

Los operadores así definidos servirán para calcular los valores medios y las incertidumbres de la distribución de los posibles valores de la medida de una magnitud. Aún así, el cálculo de probabilidades de ocurrencia no es sencillo. Para ello deberemos introducir los conceptos de *autoestado* y *valor propio*, que nos llevarán al fenómeno físico de la *cuantización*. Veremos que para cada magnitud física será posible encontrar una base de representación del espacio de Hilbert, en la que el cálculo de tales probabilidades será inmediato a partir de las coordenadas de la función de onda en tal base.

Orientaciones generales al plan de trabajo

Hay bastantes ideas importantes en este capítulo, algunas bastante sutiles. Sugerimos unas **10 horas** de trabajo personal que deben estar repartidas a partes iguales entre el estudio de los conceptos teóricos y sus aplicaciones, que se muestran en los ejemplos resueltos y en los problemas propuestos.

Objetivos del capítulo

- Entender por qué las magnitudes se representan mediante operadores autoadjuntos en el espacio de las funciones de onda de una partícula.
- Saber analizar sistemáticamente los posibles resultados de una medida de una magnitud física. Relacionar tales resultados con conceptos algebraicos (espectro, autofunción, autovalor, subespacio propio, etc.)
- Conocer la “estructurapectral” de los operadores de posición, momento lineal, momento angular y energía cinética.

5.1. LOS OPERADORES DE POSICIÓN Y MOMENTO LINEAL

§ 1. Consideremos una partícula de masa M , cuyo estado en un cierto instante de tiempo t es $|\Psi(t)\rangle$, y que está representado por la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ perteneciente al espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ de funciones de cuadrado integrable.¹ Como vimos en la sección 3.4, el valor medio de la componente x de su momento lineal es

$$\langle p_x \rangle_t = \int_{\mathbb{R}^3} p_x \rho_{\text{mom}}(\mathbf{p}, t) d^3\mathbf{p} = \frac{1}{\|\Psi(t)\|^2} \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\Psi}^*(\mathbf{p}, t) (p_x \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)) d^3\mathbf{p}, \quad (5.1)$$

cálculo que obliga en principio a evaluar previamente la representación en momentos de la función de onda. Sin embargo, utilizando las propiedades de la transformada de Fourier podremos evitar este paso. En efecto, como $\mathbf{p} = p_x \mathbf{u}_x + p_y \mathbf{u}_y + p_z \mathbf{u}_z$, se tiene la igualdad

$$p_x \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar) = -i\hbar \frac{\partial \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar)}{\partial x},$$

de donde la transformada de Fourier inversa de $p_x \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)$ es

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} p_x \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar} d^3\mathbf{p} &= \frac{-i\hbar}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{\partial}{\partial x} \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar} d^3\mathbf{p} \\ &= -i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial x}. \end{aligned}$$

Si ahora aplicamos el teorema de Parseval a (5.1) tenemos que

$$\langle p_x \rangle_t = \frac{1}{\|\Psi(t)\|^2} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \left[-i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial x} \right] d^3\mathbf{r}, \quad (5.2)$$

expresión que tiene una estructura muy similar a la del valor medio de x del epígrafe §3.4.1.

$$\langle x \rangle_t = \frac{1}{\|\Psi(t)\|^2} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}, t) (x\Psi(\mathbf{r}, t)) d^3\mathbf{r}.$$

Por otra parte, si tenemos en cuenta que

$$p_x^n \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar) = (-i\hbar)^n \frac{\partial^n \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar)}{\partial x^n} \quad \text{con } n = 1, 2, 3, \dots$$

¹ Fíjese que usamos la notación de Dirac para designar al estado, aunque también utilizaremos la metonimia ya comentada de identificar estado con función de onda. A su vez, no olvide que el tiempo t es un mero parámetro intrascendente en todo lo relativo a las propiedades algebraicas de la función de onda.

procediendo de igual forma llegamos a que los valores medios de p_x^n y x^n son

$$\langle p_x^n \rangle_t = \frac{1}{\|\Psi(t)\|^2} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \left[\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \Psi(\mathbf{r}, t) \right] d^3\mathbf{r}$$

$$\langle x^n \rangle_t = \frac{1}{\|\Psi(t)\|^2} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}, t) (x^n \Psi(\mathbf{r}, t)) d^3\mathbf{r},$$

donde $(-i\hbar \partial / \partial x)^n$ es el operador diferencial resultado de la aplicación n veces del operador $-i\hbar \partial / \partial x$. Para las componentes y, z de la posición y el momento tendremos expresiones análogas a las anteriores.

§ 2. Estos resultados sugieren definir un conjunto de operadores, llamados *de posición y de momento lineal*, cuyas reglas de actuación son:

$\hat{x}\Phi(\mathbf{r}) = x\Phi(\mathbf{r})$	$\hat{y}\Phi(\mathbf{r}) = y\Phi(\mathbf{r})$	$\hat{z}\Phi(\mathbf{r}) = z\Phi(\mathbf{r})$
$\hat{p}_x\Phi(\mathbf{r}) = -i\hbar \frac{\partial\Phi(\mathbf{r})}{\partial x}$	$\hat{p}_y\Phi(\mathbf{r}) = -i\hbar \frac{\partial\Phi(\mathbf{r})}{\partial y}$	$\hat{p}_z\Phi(\mathbf{r}) = -i\hbar \frac{\partial\Phi(\mathbf{r})}{\partial z}$,

(5.3)

de manera que para cualquier función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ el valor medio de uno de esos operadores es

$\langle A^n \rangle_t = \frac{1}{\ \Psi(t)\ ^2} \langle \Psi(t) \hat{A}^n \Psi(t) \rangle = \frac{1}{\ \Psi(t)\ ^2} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}, t) (\hat{A}^n \Psi(\mathbf{r}, t)) d^3\mathbf{r},$
--

(5.4)

donde A es cualquiera de los operadores de la lista $A = \{\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}; \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z\}$. Aquí n es cualquier entero positivo y \hat{A}^n es el operador potencia n -ésima de \hat{A} , por lo que \hat{A}^n estará entonces asociado a la magnitud A^n .

Esto nos permite hallar la incertidumbre de cualquiera de dichos operadores simplemente aplicando la expresión general

$$(\Delta A)_t = \sqrt{\langle A^2 \rangle_t - \langle A \rangle_t^2} \quad (5.5)$$

y evaluando $\langle A^2 \rangle_t$ y $\langle A \rangle_t^2$ de acuerdo con (5.4).

§ 3. Tal y como vimos en el capítulo anterior, y en particular en el **ejemplo 4.b** de la sección (4.5), estos seis operadores ($\{\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}; \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z\}$) son simétricos (la aparición de un factor \hbar en los operadores de momento lineal no afecta a

esta conclusión), propiedad que inmediatamente se traslada a la de sus potencias. Esto garantiza que las expresiones (5.4) siempre van a ser reales y, si n es par, estrictamente positivas. A su vez, como vimos en el tema anterior, estos operadores son también autoadjuntos.

A su vez, y como ya mencionamos en la **sección 4.2**, los valores medios (5.4) son finitos para funciones de onda de Schwartz. Si relajamos esta obvia exigencia física, algo que muchas veces será necesario por simplicidad matemática, lo *mínimo* que se debe imponer a la función de onda es que los valores medios y las incertidumbres de la posición y el momento lineal sean finitos. Esto queda garantizado si $\Psi(\mathbf{r}, t)$ pertenece a los dominios de los operadores definidos en las ecuaciones (5.3) y si las funciones $r_i\Psi(\mathbf{r}, t)$, con $r_i = x, y, z$, son también de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$. Por tanto, $\Psi(\mathbf{r}, t)$ ha de ser continua y sus primeras derivadas han de ser normalizables.

§ 4. Es inmediato comprobar que el producto de los operadores $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ y $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ es conmutativo (el orden de composición no importa) *excepto* si están involucradas las mismas componentes de la posición y del momento lineal. En ese caso

$$\hat{x}\hat{p}_x\Psi(\mathbf{r}) = -i\hbar x \frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial x} = -i\hbar \frac{\partial\{x\Psi(\mathbf{r})\}}{\partial x} + i\hbar\Psi(\mathbf{r}) = \hat{p}_x\hat{x}\Psi(\mathbf{r}) + i\hbar\Psi(\mathbf{r})$$

por lo que

$$(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x})\Psi(\mathbf{r}) \equiv [\hat{x}, \hat{p}_x]\Psi(\mathbf{r}) = i\hbar\Psi(\mathbf{r})$$

Procediendo igualmente para y y z tenemos que

$$\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = \hat{y}\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{y} = \hat{z}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{z} = i\hbar\hat{I}$$

y usando una notación conveniente,

$$\begin{aligned} \hat{x}_i\hat{x}_j - \hat{x}_j\hat{x}_i &= \hat{p}_i\hat{p}_j - \hat{p}_j\hat{p}_i = \hat{0} \\ \hat{x}_i\hat{p}_j - \hat{p}_j\hat{x}_i &= i\hbar\delta_{i,j}\hat{I} \end{aligned} \quad \text{con} \quad \left\{ \begin{array}{l} i, j = 1, 2, 3 \\ x_1 \equiv x, x_2 \equiv y, x_3 \equiv z \\ p_1 \equiv p_x, p_2 \equiv p_y, p_3 \equiv p_z \end{array} \right.$$

(5.6)

siendo $\delta_{i,j}$ la delta de Kronecker. Éstas son las llamadas **reglas de conmutación canónicas** que, como veremos en el **capítulo 7**, están directamente relacionadas con el principio de incertidumbre de Heisenberg.

EJEMPLO 5.a. (!) Operadores en la representación en momentos

La representación en momentos es muy habitual, sobre todo en problemas de física del estado sólido. Por ello, es conveniente conocer cómo actúan en ella los principales operadores cuánticos. Obtenga las reglas de actuación en la representación de momentos de los operadores posición y momento lineal.

Solución:

a) Supongamos que la función de onda está normalizada y partamos de

$$\langle x \rangle_t = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}, t) x \Psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} ; \quad \langle p_x \rangle_t = \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\Psi}^*(\mathbf{p}, t) p_x \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) d^3\mathbf{p}. \quad (5.7)$$

Si transformamos el valor medio de x en una integral sobre \mathbf{p} (siguiendo un argumento prácticamente idéntico al del epígrafe §1 de esta sección), tenemos que

$$\langle x \rangle_t = +i\hbar \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\Psi}^*(\mathbf{p}, t) \frac{\partial \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)}{\partial p_x} d^3\mathbf{p} ; \quad \langle p_x \rangle_t = \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\Psi}^*(\mathbf{p}, t) p_x \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) d^3\mathbf{p}$$

por lo que en la representación en momentos las reglas de actuación de \hat{x} y \hat{p}_x son

$$\hat{x}\tilde{\Phi}(\mathbf{p}) = +i\hbar \frac{\partial \tilde{\Phi}(\mathbf{p})}{\partial p_x} ; \quad \hat{p}_x \tilde{\Phi}(\mathbf{p}) = p_x \tilde{\Phi}(\mathbf{p}) \quad (5.8)$$

con análogas expresiones para $\hat{y}, \hat{z}, \hat{p}_y, \hat{p}_z$.

5.2. OPERADOR REPRESENTATIVO DE UNA MAGNITUD

§ 1. Pensemos ahora en una magnitud escalar A arbitraria. La pregunta natural que surge es si existe un operador \hat{A} tal que el valor medio de A sobre cualquier estado $\Psi(\mathbf{r}, t)$ esté dado por una expresión como la ecuación (5.4).

Si la partícula está sometida a una fuerza conservativa que deriva de la energía potencial $V(\mathbf{r})$, su valor medio será

$$\langle V \rangle_t = \int_{\mathbb{R}^3} V(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} = \frac{1}{\|\Psi(t)\|^2} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}, t) V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r}$$

y, en consecuencia, podemos escribirlo también como

$$\langle V \rangle_t = \frac{1}{\|\Psi(t)\|^2} \langle \Psi(t) | \hat{V} \Psi(t) \rangle \quad \text{con} \quad \hat{V}\Phi(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r}). \quad (5.9)$$

El **operador energía potencial** \hat{V} dependerá, lógicamente, de la fuerza conservativa que actúa sobre la partícula. Siendo $V(\mathbf{r})$ una función real, \hat{V} es un operador simétrico.

La respuesta es también afirmativa para la energía cinética K de la partícula de masa M . Como

$$K = \frac{1}{2M}|\mathbf{p}|^2 = \frac{1}{2M}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$$

su valor medio estará dado por

$$\langle K \rangle_t = \frac{1}{2M} (\langle p_x^2 \rangle_t + \langle p_y^2 \rangle_t + \langle p_z^2 \rangle_t) = \frac{1}{\|\Psi(t)\|^2} \langle \Psi(t) | \hat{K} \Psi(t) \rangle$$

con

$$\hat{K}\Phi(\mathbf{r}) = \left[\frac{1}{2M} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) \right] \Phi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \Phi(\mathbf{r}),$$

donde \hat{K} es el **operador energía cinética** y ∇^2 es el operador laplaciana. El operador \hat{K} es también simétrico, al ser la suma de operadores simétricos.

De esta manera, la energía mecánica H estará representada por **el operador energía o hamiltoniano** \hat{H} , cuya regla de actuación es

$$\hat{H}\Phi(\mathbf{r}) = (\hat{K} + \hat{V})\Phi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Phi(\mathbf{r})$$

(5.10)

que, de nuevo, es simétrico al ser la suma de dos operadores simétricos.

§ 2. Hasta ahora nos hemos limitado a reformular resultados que se infieren directamente de la interpretación probabilística para la posición y el momento lineal. Pensemos ahora en la componente z del momento angular $L_z = xp_y - yp_x$. Por sustitución directa, el operador correspondiente sería en principio $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$. Sin embargo esta asignación es conceptualmente más profunda que las anteriores ya que *todavía no sabemos* cómo obtener el valor medio del momento angular o de cualquier magnitud que no pueda descomponerse como la suma de un término dependiente exclusivamente de la posición y de otro que lo sea del momento lineal.

La existencia de operadores representativos para la posición, el momento y la energía de una partícula es, en cualquier caso, un argumento de plausibilidad suficientemente sólido para poder afirmar que:

Toda magnitud dinámica A de una partícula puntual, expresable por tanto como función de la posición \mathbf{r} y del momento lineal \mathbf{p} , queda representada en física cuántica por un operador simétrico \hat{A} definido en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$.

El valor medio y la incertidumbre de A en un estado cuántico $\Psi(\mathbf{r}, t)$ están dados por

$$\langle A \rangle_t = \frac{1}{\|\Psi(t)\|^2} \langle \Psi(t) | \hat{A} \Psi(t) \rangle = \frac{1}{\|\Psi(t)\|^2} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}, t) (\hat{A} \Psi(\mathbf{r}, t)) d^3\mathbf{r}$$

$$(\Delta A)_t = \sqrt{\langle A^2 \rangle_t - \langle A \rangle_t^2} \quad \text{con} \quad \langle A^n \rangle_t = \frac{1}{\|\Psi(t)\|^2} \langle \Psi(t) | \hat{A}^n \Psi(t) \rangle$$

Naturalmente la asignación del operador cuántico no puede ser arbitraria. Debemos mantener unas mínimas *reglas de correspondencia* entre operadores representativos y magnitudes. En particular, si A y B son dos magnitudes físicas y \hat{A} y \hat{B} sus operadores lineales simétricos respectivos, tendremos necesariamente que

$$F = \alpha A + \beta B \quad \rightarrow \quad \hat{F} = \alpha \hat{A} + \beta \hat{B} \quad (\text{con } \alpha, \beta \in \mathbb{R})$$

$$G = AB \quad \rightarrow \quad \hat{G} = \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}) \quad (5.11)$$

$$A^n \quad \rightarrow \quad \hat{A}^n \quad (\text{con } n \in \mathbb{N})$$

(observe que así definido el operador \hat{G} es simétrico, independientemente de que el producto de \hat{A} y \hat{B} sea conmutativo o no).

En general, si $A = A(\mathbf{r}; \mathbf{p})$ es una magnitud dinámica de la partícula, su operador representativo \hat{A} debe obedecer la igualdad operacional formal $\hat{A} = A(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}; \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$, aunque la función A debe escribirse de manera tal que el operador \hat{A} resultante sea simétrico. Por ejemplo, el observable r (coordenada radial de la partícula) está representado por el operador \hat{r} dado por

$$\hat{r}\Psi(\mathbf{r}) = r\Psi(\mathbf{r}) = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \Psi(\mathbf{r}),$$

cuyo carácter simétrico es inmediato de comprobar.

§ 3. Aplicando las reglas de correspondencia (5.11) tendremos que

$$L_z = xp_y - yp_x \quad \rightarrow \quad \hat{L}_z = \frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p}_y + \hat{p}_y\hat{x} - \hat{y}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{y}) = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x,$$

puesto que los productos de operadores que aparecen son conmutativos de acuerdo con las reglas canónicas (5.6). Los operadores correspondientes a las tres componentes del *momento angular* \mathbf{L} de la partícula se obtienen entonces por sustitución operacional directa sobre sus expresiones clásicas:

$$\begin{aligned}\hat{L}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ \hat{L}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ \hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)\end{aligned}\quad (5.12)$$

EJEMPLO 5.b. (!) Otra expresión para la incertidumbre de A

Demuestre que la incertidumbre de una magnitud A está dada también por

$$(\Delta A)_t = \frac{\|(\hat{A} - \bar{a})\Psi(t)\|}{\|\Psi(t)\|}, \quad \text{con } \bar{a} \equiv \langle A \rangle_t, \quad (5.13)$$

donde $\|(\hat{A} - \bar{a})\Psi(t)\|$ es la norma de la función $(\hat{A} - \bar{a})\Psi(\mathbf{r}, t)$.

Solución:

Partamos de la definición probabilística de incertidumbre

$$(\Delta A)_t = \sqrt{\langle (A - \bar{a})^2 \rangle_t} \quad \text{con } \bar{a} = \langle A \rangle_t.$$

Si \hat{A}^2 representa a la magnitud A^2 es evidente que $(\hat{A} - \bar{a}\hat{I})^2$ está asociado a $(A - \bar{a})^2$, ya que \bar{a} es una mera constante aditiva. Por tanto

$$(\Delta A)_t = \sqrt{\langle (A - \bar{a})^2 \rangle_t} = \sqrt{\frac{1}{\|\Psi(t)\|^2} \langle \Psi(t) | (\hat{A} - \bar{a}\hat{I})^2 \Psi(t) \rangle}.$$

Ahora bien, si \hat{A} es simétrico entonces $\hat{A} - \bar{a}\hat{I}$ también lo es (\bar{a} es real), por lo que podemos pasarlo al otro lado del producto escalar:

$$(\Delta A)_t = \sqrt{\frac{1}{\|\Psi(t)\|^2} \langle (\hat{A} - \bar{a}\hat{I})\Psi(t) | (\hat{A} - \bar{a}\hat{I})\Psi(t) \rangle} = \frac{\|(\hat{A} - \bar{a})\Psi(t)\|}{\|\Psi(t)\|}$$

donde en el último paso hemos usado la definición de norma y escrito $\bar{a}\hat{I} = \bar{a}$.

EJEMPLO 5.c. (*) La componente radial del momento lineal

En mecánica clásica la componente radial del momento lineal está dada por

$$p_r = \frac{1}{r} \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}$$

La obtención del operador cuántico correspondiente \hat{p}_r es delicada debido a que el producto de operadores de posición y de momento lineal no es commutativo.

- a) Obtenga el operador correspondiente a la magnitud física $\Pi_r \equiv \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}$.
- b) Exprese el resultado anterior en coordenadas esféricas y, a partir del mismo, obtenga la regla de actuación de \hat{p}_r .

Solución:

- a) Como $\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} = xp_x + yp_y + zp_z$, usando las reglas de correspondencia (5.11),

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \longrightarrow \frac{1}{2} (\hat{x}\hat{p}_x + \hat{p}_x\hat{x} + \hat{y}\hat{p}_y + \hat{p}_y\hat{y} + \hat{z}\hat{p}_z + \hat{p}_z\hat{z}) = \hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z - \frac{3i\hbar}{2} \hat{I} \equiv \hat{\Pi}_r$$

donde en el último paso hemos utilizado las reglas de conmutación canónicas. Si ahora sustituimos los operadores por sus expresiones,

$$\hat{\Pi}_r \Psi(\mathbf{r}) = -\frac{i\hbar}{2} \left[3 + 2x \frac{\partial}{\partial x} + 2y \frac{\partial}{\partial y} + 2z \frac{\partial}{\partial z} \right] \Psi(\mathbf{r}) = -\frac{i\hbar}{2} (3\Psi(\mathbf{r}) + 2\mathbf{r} \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r})).$$

- b) En coordenadas esféricas (cfr. el Apéndice A)

$$\mathbf{r} \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}) = r \frac{\partial}{\partial r} \Psi(\mathbf{r})$$

por lo que

$$\hat{\Pi}_r \Psi(\mathbf{r}) = -\frac{i\hbar}{2} \left(3\Psi(\mathbf{r}) + 2r \frac{\partial}{\partial r} \Psi(\mathbf{r}) \right).$$

La actuación del operador que representa a $1/r$ es, lógicamente, $(1/r)\Psi(\mathbf{r})$. De esta forma

$$p_r = \frac{1}{r} \Pi_r \longrightarrow \hat{p}_r \Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r} \left(\hat{\Pi}_r \Psi(\mathbf{r}) \right) + \hat{\Pi}_r \left(\frac{1}{r} \Psi(\mathbf{r}) \right) \right)$$

y sustituyendo

$$\begin{aligned} \hat{p}_r \Psi(\mathbf{r}) &= \frac{-i\hbar}{4} \frac{1}{r} \left(3\Psi(\mathbf{r}) + 2r \frac{\partial}{\partial r} \Psi(\mathbf{r}) \right) + \frac{-i\hbar}{4} \left(3 \frac{\Psi(\mathbf{r})}{r} + 2r \frac{\partial}{\partial r} \frac{\Psi(\mathbf{r})}{r} \right) = \\ &= -\frac{3i\hbar}{2} \frac{\Psi(\mathbf{r})}{r} - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial r} - \frac{i\hbar r}{2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\Psi(\mathbf{r})}{r} \right) = -i\hbar \left(\frac{\Psi(\mathbf{r})}{r} + \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial r} \right). \end{aligned}$$

En suma (compruebe el último paso),

$$\hat{p}_r \Psi(\mathbf{r}) = -i\hbar \left(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \right) \Psi(\mathbf{r}) = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial \{r\Psi(\mathbf{r})\}}{\partial r}. \quad (5.14)$$

5.3. ESPECTRO PUNTUAL DE UNA MAGNITUD FÍSICA

§ 1. Empecemos con unas definiciones esenciales. Sea A una magnitud de una partícula representada por el operador simétrico \hat{A} . Si en un instante dado de tiempo la partícula está en un estado cuántico, éste será un *estado propio* o *autoestado* de A si al medir A obtendremos con toda certeza un único resultado a . En este caso, a es un *autovalor* o *valor propio* de \hat{A} . Como consecuencia, *en un estado propio el valor medio de A es igual al autovalor a y su incertidumbre es nula*.² Se dice que a pertenece al *espectro puntual* de \hat{A} , $\sigma_p(\hat{A})$.

Nada garantiza que si el estado de la partícula en un instante t_0 es propio de \hat{A} lo siga siendo en un instante posterior. Por ello omitiremos en esta sección cualquier mención a la evolución temporal de los estados cuánticos dando así por supuesto que hemos “congelado” el tiempo. El problema de la evolución temporal se tratará en el Tema 6.

§ 2. Supongamos que el estado $|\Psi\rangle$ de la partícula está representado por la función de onda normalizable $\Psi(\mathbf{r})$. Si tal estado es propio de \hat{A} con autovalor a , entonces $\langle A \rangle = a$ y $\Delta A = 0$. Recordando que

$$\Delta A = \frac{1}{\|\Psi\|} \|(\hat{A} - \langle A \rangle)\Psi\|$$

y que la norma sólo es cero para la función nula, tenemos el importantísimo resultado

$|\Psi\rangle$ es propio de \hat{A} con autovalor $a \Leftrightarrow \hat{A}\Psi(\mathbf{r}) = a\Psi(\mathbf{r}).$

(5.15)

La función de onda $\Psi(\mathbf{r})$ del autoestado es así solución de la *ecuación de autovalores* $\hat{A}\Psi(\mathbf{r}) = a\Psi(\mathbf{r})$, y se dice que $\Psi(\mathbf{r})$ es una *autofunción* del operador \hat{A} con autovalor a .

En el álgebra lineal, el espectro puntual $\sigma_p(\hat{A})$ de un operador se define como el conjunto de escalares a para los que la ecuación de autovalores tiene soluciones normalizables no nulas. Por consiguiente, *el espectro puntual de una magnitud física coincide con el espectro puntual del operador representativo*. Usaremos entonces el símbolo σ_p para designar indistintamente uno u otro y, para no

² Naturalmente, todo dispositivo de medida tiene una precisión limitada, por lo que al medir A hay una inevitable indefinición $\delta a > 0$. Así, cuando afirmamos que un cierto estado es propio de A con autovalor a , estamos señalando que una medida con un dispositivo idealizado, en el que $\delta a \rightarrow 0$, dará con toda certeza el resultado $A = a$.

cargar las expresiones, sólo en caso de necesidad señalaremos explícitamente a qué magnitud (o a qué operador) nos estamos refiriendo.

El espectro puntual de un operador simétrico \hat{A} es real, de manera que no existen soluciones no nulas con autovalores no reales ($a \neq a^*$) de la ecuación $\hat{A}\Psi(\mathbf{r}) = a\Psi(\mathbf{r})$.

En efecto, si $\Psi(\mathbf{r})$ es autofunción no nula de a

$$\langle \Psi | \hat{A} \Psi \rangle = \langle \hat{A} \Psi | \Psi \rangle \Rightarrow \langle \Psi | a \Psi \rangle = \langle a \Psi | \Psi \rangle \Rightarrow a \langle \Psi | \Psi \rangle = a^* \langle \Psi | \Psi \rangle$$

y como $\langle \Psi | \Psi \rangle \neq 0$ entonces $a = a^*$: cualquier autovalor de \hat{A} es real.

§ 3. La ecuación de autovalores es lineal. Ello implica que, fijado a , el conjunto de soluciones normalizables de la ecuación de autovalores constituye un subespacio del espacio de funciones de onda al que llamaremos *subespacio propio* y que designaremos como \mathcal{W}_a :

$$\mathcal{W}_a = \left\{ \Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \quad \text{tal que} \quad \hat{A}\Psi(\mathbf{r}) = a\Psi(\mathbf{r}) \right\}. \quad (5.16)$$

La dimensión algebraica g_a de \mathcal{W}_a , finita o infinita numerable, es la *multiplicidad o degeneración* del autovalor a y, por extensión, del subespacio propio \mathcal{W}_a .

Designemos por $\{\Psi_{a,n}(\mathbf{r})\}$ con $n = 1, 2, \dots, g_a$ una base ortonormal arbitraria de \mathcal{W}_a . Entonces toda función $\Psi(\mathbf{r})$ de \mathcal{W}_a puede escribirse como

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{g_a} c_n \Psi_{a,n}(\mathbf{r}) \quad \text{con} \quad c_n = \langle \Psi_{a,n} | \Psi \rangle. \quad (5.17)$$

Si $g_a = 1$ diremos que el subespacio propio es *no degenerado*; entonces hay un único autoestado con tal autovalor, representado por cualquier función de onda de \mathcal{W}_a (excepto la nula,³ naturalmente) ya que todas son proporcionales entre sí. Por el contrario, si $g_a > 1$ (subespacio propio g_a -degenerado) existirán entonces infinitos estados propios de a , pero únicamente podremos encontrar un máximo de g_a autofunciones de \mathcal{W}_a ortogonales entre sí o, equivalentemente, de g_a autoestados completamente diferentes entre sí.

§ 4. Consideremos ahora dos autofunciones del operador \hat{A} , $\Psi_{a_1}(\mathbf{r})$ y $\Psi_{a_2}(\mathbf{r})$, con $a_1 \neq a_2$, que representan sendos estados propios de A . Hay una propiedad

³ Si la única solución a la ecuación de autovalores es $\Psi(\mathbf{r}) = 0$, entonces por convenio el subespacio propio está formado únicamente por dicha función que, recuerde, habíamos asignado al “estado imposible”. Ahora vemos el porqué de tal interpretación: si $\hat{A}\Psi(\mathbf{r}) = a\Psi(\mathbf{r})$ sólo se cumple para $\Psi(\mathbf{r}) = 0$ entonces no hay un estado de la partícula en el que A tome el valor a con total certidumbre.

físicamente medible, el valor de A , que con toda seguridad es diferente para estos dos estados: es así muy razonable afirmar que estos dos estados son *completamente* distintos. De acuerdo con nuestro criterio de similitud basado en el producto escalar (véase el § 4.1.4) tendríamos que $\langle \Psi_{a_1} | \Psi_{a_2} \rangle = 0$ y, en efecto, ello queda garantizado gracias a que el operador \hat{A} es simétrico. Veámoslo. Como \hat{A} es simétrico se cumple que

$$\langle \Psi_{a_1} | \hat{A} \Psi_{a_2} \rangle - \langle \hat{A} \Psi_{a_1} | \Psi_{a_2} \rangle = 0$$

y al ser $\Psi_{a_1}(\mathbf{r})$ y $\Psi_{a_2}(\mathbf{r})$ autofunciones con autovalores reales

$$\langle \Psi_{a_1} | a_2 \Psi_{a_2} \rangle - \langle a_1 \Psi_{a_1} | \Psi_{a_2} \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad (a_2 - a_1) \langle \Psi_{a_1} | \Psi_{a_2} \rangle = 0.$$

Pero, por hipótesis, $a_1 \neq a_2$, y no queda más remedio que $\langle \Psi_{a_1} | \Psi_{a_2} \rangle = 0$.

Podemos entonces afirmar que *los subespacios propios correspondientes a autovalores distintos son ortogonales entre sí*:

$a_1 \neq a_2 \quad \Leftrightarrow \quad \mathcal{W}_{a_1} \perp \mathcal{W}_{a_2}.$

(5.18)

Esto tiene una consecuencia importante: *el espectro puntual de una magnitud es numerable*,

$$\sigma_p = \{a_1, a_2, \dots\} \subset \mathbb{R}. \quad (5.19)$$

Efectivamente, si no lo fuese podríamos construir un conjunto no numerable de funciones de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ ortogonales entre sí simplemente escogiendo una por cada autovalor de σ_p , lo que es imposible para espacios de Hilbert separables de acuerdo con el teorema de Riesz-Fischer.

De esta manera, *si una magnitud física puede tomar valores bien definidos en estados cuánticos realizables, esos valores estarán necesariamente cuantizados*.

La cuantización aparece de manera natural en el formalismo que estamos exponiendo como el resultado de las tres condiciones siguientes:

1. El principio de incertidumbre (el valor de una magnitud A no está definido a priori en un estado cuántico);
2. La interpretación probabilística (los valores medios de A se obtienen de la función de onda) y
3. El principio de superposición (el carácter lineal de las leyes básicas de la mecánica cuántica se traduce en que A está representado por un operador lineal).

EJEMPLO 5.d. (!) La cuantización del momento angular

La regla de actuación del operador \hat{L}_z es especialmente sencilla si expresamos $\Psi(\mathbf{r})$ en coordenadas esféricas, $\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(r, \theta, \varphi)$. En efecto, usando las relaciones (A.17) y (A.31) del **Apéndice A** no es difícil comprobar que

$$\hat{L}_z \Psi(\mathbf{r}) = -i\hbar \left(x \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial y} - y \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial \varphi} \quad (5.20)$$

y el operador de la componente z del momento angular sólo actúa sobre la coordenada esférica φ .

- a) Obtenga el espectro puntual de L_z .
- b) ¿Cuál es la multiplicidad de cada autovalor de L_z ?

Solución:

a) Puesto que L_z tiene dimensiones de acción, podemos notar los autovalores de \hat{L}_z como $m\hbar$, donde m es un número adimensional. Así, la ecuación de autovalores correspondiente a \hat{L}_z es:

$$\hat{L}_z \Psi(\mathbf{r}) = m\hbar \Psi(\mathbf{r}) \Rightarrow -i \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial \varphi} = m\Psi(\mathbf{r})$$

que es satisfecha por toda función de onda de la forma

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \Theta(r, \theta) \exp(im\varphi). \quad (5.21)$$

Ahora bien, por la propia definición de la coordenada azimutal φ ,

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \Psi(r, \theta, \varphi + 2\pi) \Rightarrow \exp(2\pi im) = 1$$

lo que implica necesariamente que m ha de ser entero. Por tanto

$$\sigma(\hat{L}_z) = \sigma_p(\hat{L}_z) = \{m\hbar \text{ con } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots\}. \quad (5.22)$$

Observamos entonces que los valores que puede tomar L_z en un estado cuántico en el que el valor de L_z esté bien definido (y, por simetría, el de cualquier componente del momento angular de una partícula) están cuantizados, siendo múltiplos enteros de la constante de Planck racionalizada \hbar . En el contexto de la teoría cuántica antigua éste no es otro que el **postulado de cuantización de Bohr** del momento angular.

- b) Fijado un valor de m , existen infinitas funciones de onda normalizadas ortogonales entre sí cuya forma es la dada por (5.21). Podemos entonces concluir que la degeneración de cada autovalor $m\hbar$ de L_z es infinita, aunque este infinito es numerable como consecuencia del teorema de Riesz-Fischer.

§ 5. La cuantización es un fenómeno importante pero no es general ya que, por ejemplo, las componentes de la posición, el momento lineal o la energía cinética son magnitudes físicas no cuantizadas ($\sigma_p = \{\emptyset\}$).

Como ilustración, las ecuaciones de autovalores y sus soluciones generales para \hat{x} y \hat{p}_x son

$$\begin{aligned}\hat{x}\Psi(\mathbf{r}) &= a_x\Psi(\mathbf{r}) \quad \Rightarrow \quad x\Psi(\mathbf{r}) = a_x\Psi(\mathbf{r}) \quad \Rightarrow \quad \Psi(\mathbf{r}) = \delta(x - a_x)\psi(y, z) \\ \hat{p}_x\Phi(\mathbf{r}) &= q_x\Phi(\mathbf{r}) \quad \Rightarrow \quad -i\hbar \frac{\partial\Phi(\mathbf{r})}{\partial x} = q_x\Phi(\mathbf{r}) \quad \Rightarrow \quad \Phi(\mathbf{r}) = \exp(iq_xx/\hbar)\varphi(y, z)\end{aligned}$$

donde $\psi(y, z)$ y $\varphi(y, z)$ son funciones arbitrarias. Vemos que $\Psi(\mathbf{r})$ y $\Phi(\mathbf{r})$ no son normalizables, por lo que al no existir autofunciones de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ para valores genéricos de la posición a_x o del momento lineal q_x , el espectro puntual de estos operadores es el conjunto vacío.

Para estas magnitudes existen, sin embargo, estados en los que la incertidumbre es *prácticamente cero*. Pensemos en la función de ondas

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{e^{ik_0x}}{(\pi\beta^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(x - x_0)^2}{2\beta^2}\right] \varphi(y, z) \quad \text{con } \beta \in \mathbb{R}^+,$$

para la que (compruébelo)

$$\langle x \rangle = x_0 \quad ; \quad \langle p_x \rangle = \hbar k_0 \quad ; \quad \Delta x = \frac{\beta}{\sqrt{2}} \quad ; \quad \Delta p_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\beta}.$$

Si $\beta \simeq 0$ entonces la incertidumbre en la componente x de la posición es despreciable, mientras que si $\beta \gg 0$ la incertidumbre en p_x es muy pequeña. En ambos casos no podemos hablar de genuinos estados propios porque la incertidumbre no es estrictamente igual a cero, pero sí de *cuasi-autoestados*. El tratamiento de estas situaciones en el formalismo exige introducir nuevas herramientas, que analizaremos en la sección siguiente.

5.4. ESPECTRO CONTINUO DE UNA MAGNITUD FÍSICA

§ 1. Sea A una magnitud física y \hat{A} su operador representativo. Un valor real α no perteneciente a σ_p forma parte del *espectro continuo*, $\sigma_c(\hat{A})$, de \hat{A} , si podemos encontrar estados realizables en los que $\langle A \rangle = \alpha$ y que ΔA sea tan

pequeña como se quiera, aunque no nula⁴

$$\alpha \in \sigma_c(\hat{A}) \Leftrightarrow \begin{cases} \alpha \notin \sigma_p(\hat{A}), \text{ pero para todo } \epsilon > 0 \text{ existe un} \\ \text{estado } |\Phi\rangle \text{ de } \mathcal{E} \text{ tal que } \langle A \rangle = \alpha \text{ y } 0 < \Delta A < \epsilon. \end{cases}$$

Si tenemos un cuasi-autoestado de A con valor α del espectro continuo σ_c e incertidumbre ΔA muy pequeña, toda medida de A realizada sobre tal estado con un dispositivo cuya imprecisión δa sea mayor que ΔA dará con toda seguridad un resultado igual a α dentro del margen de error característico del aparato de medida. Únicamente se manifestará que el estado no es un genuino estado propio de A si efectuamos una medida con un aparato muy preciso ($\delta a \ll \Delta A$), ya que entonces es posible que la medida dé como resultado un valor netamente distinto de α , aunque necesariamente muy cercano. Puesto que, desde el punto de vista de los resultados de una medida de A , los significados físicos del espectro puntual y del continuo son muy similares, llamaremos también *autovalores* a los elementos de $\sigma_c(\hat{A})$.

Si ahora usamos la expresión (5.13) para la incertidumbre de \hat{A} y suponemos que la función de onda $\Phi(\mathbf{r})$ del estado $|\Phi\rangle$ está normalizada, la definición anterior es completamente equivalente a

$$\alpha \in \sigma_c(\hat{A}) \Leftrightarrow \begin{cases} \alpha \notin \sigma_p(\hat{A}), \text{ pero para todo } \epsilon > 0 \text{ existe} \\ \text{una } \Phi(\mathbf{r}) \text{ normalizada (esto es, } \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})) \\ \text{tal que } 0 < \|(\hat{A} - \alpha)\Phi\| < \epsilon \end{cases}$$

(5.23)

que es la condición que, matemáticamente, caracteriza al *espectro continuo del operador* \hat{A} : el número real α pertenece a $\sigma_c(\hat{A})$ si la ecuación de autovalores $\hat{A}\Phi(\mathbf{r}) = \alpha\Phi(\mathbf{r})$ es satisfecha por funciones normalizadas salvo con un error arbitrariamente pequeño (aunque nunca nulo).

A su vez, tal y como hemos definido el espectro continuo, si $\alpha \in \sigma_c$ entonces existirá un valor α' arbitrariamente próximo que también verifica la condición (5.23). Como consecuencia *el espectro continuo no puede tener valores aislados*, lo que justifica su denominación. En general, σ_c estará formado por uno o varios subintervalos de la recta real.⁵

⁴ Si ΔA fuera nula, α formaría parte de σ_p .

⁵ En rigor la estructura del espectro continuo puede ser más complicada. Por ejemplo, debe contener los posibles *puntos de acumulación* del espectro puntual. Así, si A es adimensional y $\sigma_p = \{1, 1/2, 1/4, 1/8, \dots\}$, el valor 0 pertenece al espectro continuo de A . Ahora bien, este tipo de autovalores

§ 2. Aunque el criterio (5.23) es físicamente transparente, no resulta muy práctico a la hora de obtener el espectro continuo de una cierta magnitud. Sin embargo, consideremos un cierto cuasi-autoestado de A con autovalor α , cuya función de onda normalizada es $\Phi(\mathbf{r})$, e introduzcamos la función auxiliar $\Lambda(\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r})/\sqrt{\Delta A}$. Puesto que

$$\|(\hat{A} - \alpha)\Lambda\| = \frac{1}{\sqrt{\Delta A}} \|(\hat{A} - \alpha)\Phi\| = \sqrt{\Delta A}$$

en el límite $\Delta A \rightarrow 0$ la función $(\hat{A} - \alpha)\Lambda(\mathbf{r})$ será igual a cero aun a pesar de que $\Lambda(\mathbf{r})$ tienda a una función no normalizable. De esta manera:

$$\alpha \in \sigma_c(A) \Rightarrow \begin{cases} \text{existe } \Lambda(\mathbf{r}) \text{ no normalizable tal que} \\ \hat{A}\Lambda(\mathbf{r}) = \alpha\Lambda(\mathbf{r}) \end{cases} \quad (5.24)$$

y podemos así obtener el espectro continuo de la magnitud A relajando la imposición de que la autofunción sea de cuadrado integrable. Ahora bien, el operador \hat{A} se ha definido para funciones de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ y puede ocurrir que la ecuación $\hat{A}\Lambda(\mathbf{r}) = \alpha\Lambda(\mathbf{r})$ tenga soluciones espurias en las que el hipotético autovalor no pertenece realmente a $\sigma_c(A)$. Acudiendo a argumentos físicos, $\Lambda(\mathbf{r})$ representa la dependencia espacial de la función de onda de un cuasi-autoestado en el límite de incertidumbre nula, por lo que podemos entonces discriminar las soluciones físicamente significativas imponiendo que cuando $r \rightarrow \infty$ el módulo $|\Lambda(\mathbf{r})|$ de la autofunción se mantenga acotado. Es lógico que así sea: es posible que la posición de la partícula en un cuasi-autoestado esté más y más deslocalizada a medida que la incertidumbre ΔA sea menor, pero nunca se puede admitir que la probabilidad de encontrar la partícula aumente indefinidamente a medida que r tienda a infinito.

En lenguaje más técnico, los autovalores del espectro continuo se obtienen a partir de soluciones de la ecuación de autovalores en *sentido de distribuciones* (cfr. el **Apéndice B**). Si \hat{A} es un operador simétrico cuyo dominio contiene todas las funciones de Schwartz (restricción matemática lógica si \hat{A} representa una magnitud física) entonces

$$\alpha \in \sigma_c(A) \Rightarrow \begin{cases} \alpha \notin \sigma_p(A) \text{ pero existe } \Lambda(\mathbf{r}) \text{ no normalizable tal que} \\ \langle \Lambda | \hat{A} \Psi \rangle = \alpha \langle \Lambda | \Psi \rangle \quad \text{para toda } \Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3) \end{cases} \quad (5.25)$$

de σ_c son el resultado de una estructura muy peculiar del espectro puntual y los cuasi-autoestados correspondientes serán combinación lineal de autoestados genuinos de la magnitud A . En otras palabras, estos valores bien definidos *pero no aislados* del espectro continuo no tienen un significado físico en sí mismo ya que su existencia depende únicamente de cómo sea el espectro puntual.

donde el producto escalar ha de tomarse en sentido literal,

$$\langle \Lambda | \Psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \Lambda^*(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \in \mathbb{C}.$$

Vemos entonces que las autofunciones $\Lambda(\mathbf{r})$ han de ser funciones no normalizables “adecuadas” al formalismo cuántico, tal y como las que definimos en el epígrafe **§4.2.3**, ecuaciones (4.5) y (4.8).

§ 3. Las autofunciones correspondientes al espectro continuo de A cumplen las mismas relaciones de ortogonalidad que las de los autoestados *genuinos* de A . Específicamente,

$$\text{si } \hat{A}\Lambda_1(\mathbf{r}) = \alpha_1 \Lambda_1(\mathbf{r}) \quad \text{y} \quad \hat{A}\Lambda_2(\mathbf{r}) = \alpha_2 \Lambda_2(\mathbf{r}) \quad \text{con} \quad \alpha_1 \neq \alpha_2 \Rightarrow \langle \Lambda_1 | \Lambda_2 \rangle = 0 \quad (5.26)$$

donde ahora resulta irrelevante que $\Psi(\mathbf{r})$ y $\Phi(\mathbf{r})$ sean normalizables o no (dando por supuesto que son funciones no normalizables que cumplen (5.25)). La demostración es idéntica a las que nos llevó a (5.18) aunque debe sobreentenderse que las diferentes expresiones son límites si aparecen involucradas autofunciones no normalizables.

A su vez, puesto que la ecuación de autovalores es lineal, el conjunto de autofunciones $\Lambda(\mathbf{r})$ con autovalor $\alpha \in \sigma_c(A)$ formarán también un subespacio lineal, sólo que no perteneciente a $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$. La dimensión algebraica g_α de tal subespacio es la *multiplicidad* del autovalor α y podemos construir en él una base *ortonormal* (ortonormal es imposible) formada por g_α funciones $\Lambda_{\alpha,i}(\mathbf{r})$ con $i = 1, 2, \dots, g_\alpha$ de modo que

$$\hat{A}\Lambda(\mathbf{r}) = \alpha\Lambda(\mathbf{r}) \quad \Leftrightarrow \quad \Lambda(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{g_\alpha} u_i \Lambda_{\alpha,i}(\mathbf{r}) \quad \text{con} \quad u_i \in \mathbb{C}. \quad (5.27)$$

§ 4. Como ilustración, consideremos los operadores posición y momento de una partícula que se mueve en una dimensión espacial. Las ecuaciones de autovalores correspondientes serán

$$\hat{x}\Lambda(x) = \alpha\Lambda(x) \quad ; \quad \hat{p}_x\vartheta(x) = q\vartheta(x)$$

y usando las reglas de actuación de los operadores posición y momento,

$$(x - \alpha)\Lambda(x) = 0 \quad ; \quad -i\hbar \frac{d}{dx}\vartheta(x) = q\vartheta(x).$$

Estas ecuaciones tienen solución no normalizable para cualquier autovalor real,

$$\Lambda(x) = \mathcal{A}\delta(x - \alpha) = \mathcal{A}\delta_a(x) \quad ; \quad \vartheta(x) = \mathcal{B} \frac{\exp(iqx/\hbar)}{(2\pi\hbar)^{1/2}} = \mathcal{B}\theta_q(x) \quad (5.28)$$

siendo \mathcal{A}, \mathcal{B} constantes multiplicativas no nulas arbitrarias.

Por tanto, el espectro de \hat{x} y \hat{p}_x es continuo e igual a todo \mathbb{R} , la multiplicidad de cada autovalor es la unidad, y las autofunciones respectivas son las deltas de Dirac $\delta_a(x)$ y las funciones de De Broglie $\theta_q(x)$, cuyo significado físico ya conocemos.

§ 5. Denominaremos **espectro** de una magnitud física A al conjunto $\sigma(\hat{A})$ resultado de la unión de los espectros puntual y continuo, $\sigma(\hat{A}) = \sigma_p(\hat{A}) \cup \sigma_c(\hat{A})$. De acuerdo con la discusión que hemos hecho en estas dos secciones (5.3 y 5.4), *el espectro puede definirse físicamente como el subconjunto de \mathbb{R} formado por aquellos valores que puede tomar la magnitud física A en un estado cuántico con incertidumbre arbitrariamente pequeña* (y exactamente nula para los elementos del espectro puntual). A los elementos del espectro de una magnitud se les llama también *valores espectrales* y *valores permitidos*.

5.5. BASES PROPIAS. INTERPRETACIÓN PROBABILÍSTICA

§ 1. Los estados propios, realizables o límites ideales, de una magnitud A son indudablemente importantes porque en ellos puede afirmarse que A toma un valor bien definido: una medida de A realizada sobre tales estados dará con toda certeza un único resultado a (con las matizaciones ya discutidas en el caso de que hablemos de un valor del espectro continuo). También vimos que estos estados son completamente diferentes entre sí, lo que se refleja en la ortogonalidad entre funciones de onda representativas.

Designemos por $\{\Phi_{a,n}(\mathbf{r})\}$ con $n = 1, \dots, g_a$ una base ortonormal del subespacio propio \mathcal{W}_a formado por las autofunciones normalizables de \hat{A} con autovalor $a \in \sigma_p$ y por $\{\Lambda_{\alpha,i}(\mathbf{r})\}$ con $i = 1, \dots, g_\alpha$ una base ortogonal del subespacio de las autofunciones no normalizables de \hat{A} con autovalor $\alpha \in \sigma_c$. Todas estas funciones son ortogonales entre sí, pero como α toma valores continuos podemos multiplicar cada $\Lambda_{\alpha,i}(\mathbf{r})$ por un factor adecuado, al que llamaremos *constante de regularización*, de tal manera que en el producto escalar entre las autofunciones

no normalizables aparezca una delta de Dirac:

$$\boxed{\begin{aligned}\langle \Phi_{a,n} | \Phi_{a',n'} \rangle &= \delta_{a,a'} \delta_{n,n'} \\ \langle \Phi_{a,n} | \Lambda_{\alpha,i} \rangle &= 0 \\ \langle \Lambda_{\alpha,i} | \Lambda_{\alpha',i'} \rangle &= \delta(\alpha - \alpha') \delta_{i,i'}\end{aligned}} \quad (5.29)$$

donde $\delta(\alpha - \alpha')$ debe interpretarse de la forma habitual

$$\int_{\sigma_c} g(\alpha) \delta(\alpha - \alpha') d\alpha = g(\alpha'). \quad (5.30)$$

Entonces (vea la [sección 4.3](#)) estas autofunciones $\Phi_{a,n}(\mathbf{r})$ y $\Lambda_{\alpha,i}(\mathbf{r})$ de \hat{A} pueden formar parte de una base de representación de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$. Ahora bien, si el operador simétrico \hat{A} es además autoadjunto, entonces el llamado *teorema espectral* garantiza que el conjunto de funciones ortogonales que acabamos de construir es completo y, por tanto, constituye por sí mismo una base de representación de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ a la que llamaremos **base de representación propia o sencillamente base propia** de A .⁶

Pudiera parecer que imponer que los operadores simétricos representativos de una magnitud física sean también autoadjuntos es una condición bastante fuerte. En realidad no lo es tanto. Ya hemos visto que los operadores básicos de posición y momento son autoadjuntos, no siendo difícil demostrar que los operadores de energía cinética y de momento angular también lo son. A su vez, si $V(\mathbf{r})$ es una energía potencial que no tiene un comportamiento singular, \hat{V} también es autoadjunto. En general, los dominios de definición de los operadores simétricos utilizados habitualmente en física cuántica son tan amplios que su carácter autoadjunto es casi inmediato y, a partir de ahora, lo daremos por supuesto.

⁶ La demostración del teorema espectral es más tediosa que complicada para espacios de Hilbert de dimensión finita. Sin embargo, su demostración rigurosa general en espacios de Hilbert de dimensión infinita es un problema matemático nada desdeñable, especialmente si el operador tiene espectro continuo.

Como consecuencia, toda función *normalizable* $\Psi(\mathbf{r})$ puede escribirse como

$$\boxed{\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{a \in \sigma_p} \left[\sum_{n=1}^{g_a} c_{a,n} \Phi_{a,n}(\mathbf{r}) \right] + \int_{\sigma_c} \left[\sum_{i=1}^{g_\alpha} c_{\alpha,i} \Lambda_{\alpha,i}(\mathbf{r}) \right] d\alpha}$$

$$\text{con } \begin{cases} c_{a,n} = \langle \Phi_{a,n} | \Psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \Phi_{a,n}^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \\ c_{\alpha,i} = \langle \Lambda_{\alpha,i} | \Psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \Lambda_{\alpha,i}^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \end{cases} \quad (5.31)$$

Los números complejos $\{c_{a,n}\}, \{c_{\alpha,i}\}$ son así las coordenadas de $\Psi(\mathbf{r})$ en esta base.

Los *números cuánticos* correspondientes a las funciones de la base propia son el autovalor de cada autofunción y un *índice de degeneración*, que es necesario para distinguir las distintas funciones en el caso de que los subespacios propios tengan multiplicidad mayor que uno. Por tanto, la base de representación propia no es única excepto si todas las multiplicidades g_a y g_α son igual a uno, ya que entonces existirá una única función por autovalor (salvo constante multiplicativa de módulo unidad, físicamente irrelevante).

§ 2. Como para las funciones de la base propia se tiene que

$$\hat{A}\Phi_{a,n}(\mathbf{r}) = a\Phi_{a,n}(\mathbf{r}) \quad , \quad \hat{A}\Lambda_{\alpha,i}(\mathbf{r}) = \alpha\Lambda_{\alpha,i}(\mathbf{r})$$

y el operador \hat{A} es lineal, entonces

$$\hat{A}\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{a \in \sigma_p} a \left[\sum_{n=1}^{g_a} c_{a,n} \Psi_{a,n}(\mathbf{r}) \right] + \int_{\sigma_c} \alpha \left[\sum_{n=1}^{g_\alpha} c_{\alpha,i} \Lambda_{\alpha,i}(\mathbf{r}) \right] d\alpha \quad (5.32)$$

Por consiguiente, $\{ac_{a,n}\}, \{\alpha c_{\alpha,i}\}$ son las coordenadas de $\hat{A}\Psi(\mathbf{r})$ en esta base.⁷

⁷ La igualdad (5.32) puede parecer forzada ya que extiende la linealidad de \hat{A} a una suma infinita en la que, además, hay involucradas funciones no normalizables, pero ello se puede hacer en este caso porque $\hat{A}\Lambda_{\alpha,i}(\mathbf{r}) = a\Lambda_{\alpha,i}(\mathbf{r})$ en sentido de distribuciones. De hecho, en formulaciones más rigurosas de la mecánica cuántica, se usa la ecuación (5.32) para *definir* el operador \hat{A} representativo de la magnitud observable.

Aplicando las expresiones para el cálculo de productos escalares y normas en una base de representación vistas en la **sección 4.3**,

$$\|\Psi\|^2 = \sum_{a \in \sigma_p} \left[\sum_{n=1}^{g_a} |c_{a,n}|^2 \right] + \int_{\sigma_c} \left[\sum_{n=1}^{g_\alpha} |c_{\alpha,i}|^2 \right] d\alpha \quad (5.33)$$

$$\langle \Psi | \hat{A} \Psi \rangle = \sum_{a \in \sigma_p} a \left[\sum_{n=1}^{g_a} |c_{a,n}|^2 \right] + \int_{\sigma_c} \alpha \left[\sum_{n=1}^{g_\alpha} |c_{\alpha,i}|^2 \right] d\alpha. \quad (5.34)$$

El *valor medio* de A se expresa entonces como

$$\langle A \rangle = \sum_{a \in \sigma_p} a \left[\frac{1}{\|\Psi\|^2} \sum_{n=1}^{g_a} |c_{a,n}|^2 \right] + \int_{\sigma_c} \alpha \left[\frac{1}{\|\Psi\|^2} \sum_{i=1}^{g_\alpha} |c_{\alpha,i}|^2 \right] d\alpha. \quad (5.35)$$

Análogamente, dado que

$$\hat{A}^n \Phi_{a,n}(\mathbf{r}) = a^n \Phi_{a,n}(\mathbf{r}) \quad , \quad \hat{A}^n \Lambda_{\alpha,i}(\mathbf{r}) = \alpha^n \Lambda_{\alpha,i}(\mathbf{r}),$$

y razonando de idéntica manera, el valor medio de A^n está dado por

$$\langle A^n \rangle = \sum_{a \in \sigma_p} a^n \left[\frac{1}{\|\Psi\|^2} \sum_{n=1}^{g_a} |c_{a,n}|^2 \right] + \int_{\sigma_c} \alpha^n \left[\frac{1}{\|\Psi\|^2} \sum_{i=1}^{g_\alpha} |c_{\alpha,i}|^2 \right] d\alpha. \quad (5.36)$$

La evaluación de valores medios e incertidumbres de una magnitud A es así especialmente sencilla si trabajamos en una base propia de \hat{A} .

§ 3. Estos resultados nos van a permitir formular la *interpretación probabilística* de la física cuántica con toda generalidad. Supongamos que el conjunto de los posibles resultados de una medida de A tiene una parte discreta y una parte continua. La definición probabilística del valor medio de A^n es

$$\langle A^n \rangle = \sum_a a^n \Pr_A(a) + \int \alpha^n \rho_A(\alpha) d\alpha \quad (5.37)$$

donde $\Pr_A(a)$ es la *probabilidad [de ocurrencia]* de que al medir A en el estado $|\Psi\rangle$ se obtenga un valor discreto a mientras que $\rho_A(\alpha)$ es una *densidad de probabilidad* y $\rho_A(\alpha)d\alpha$ nos da la probabilidad de que una medida de A dé un resultado dentro de un intervalo infinitesimal de anchura $d\alpha$ centrado en un valor continuo α . Naturalmente, (5.37) y (5.36) han de dar igual resultado para cualquier función

de onda $\Psi(\mathbf{r})$, por lo que no queda más remedio que la parte discreta sea el espectro puntual σ_p y la parte continua sea el espectro continuo σ_c . En resumen,

$$\begin{aligned}\Pr_A(a) &= \frac{1}{\|\Psi\|^2} \sum_{n=1}^{g_a} |c_{a,n}|^2 = \frac{1}{\|\Psi\|^2} \sum_{n=1}^{g_a} |\langle \Phi_{a,n} | \Psi \rangle|^2 \\ \rho_A(\alpha) &= \frac{1}{\|\Psi\|^2} \sum_{i=1}^{g_\alpha} |c_{\alpha,i}|^2 = \frac{1}{\|\Psi\|^2} \sum_{i=1}^{g_\alpha} |\langle \Lambda_{\alpha,i} | \Psi \rangle|^2\end{aligned}\quad (5.38)$$

llegando al principal resultado de esta sección:

El **espectro** de una magnitud física A es el conjunto de posibles resultados de realizar una medida de tal magnitud.

Las **probabilidades de ocurrencia** en una medida de A se obtienen directamente de las coordenadas de la función de onda de la partícula en una base propia de A .

Las probabilidades (5.38) nos van a permitir calcular cualquier probabilidad de ocurrencia. De acuerdo con los principios básicos de la teoría de la probabilidad, si \mathbb{S} es un subconjunto de \mathbb{R} entonces la probabilidad de que al medir A se obtenga un valor dentro de \mathbb{S} es

$$\Pr(A \subset \mathbb{S}) = \sum_{a \in \mathbb{S}_p} \Pr_A(a) + \int_{\mathbb{S}_c} \rho_A(\alpha) d\alpha \quad \text{con} \begin{cases} \mathbb{S}_p = \mathbb{S} \cap \sigma_p(A) \\ \mathbb{S}_c = \mathbb{S} \cap \sigma_c(A) \end{cases} \quad (5.39)$$

y usando (5.33) y (5.38)

$$\Pr(A \subset \mathbb{R}) = \sum_{a \in \sigma_p} \Pr_A(a) + \int_{\sigma_c} \rho_A(\alpha) d\alpha = 1. \quad (5.40)$$

Esto es lo que cabía esperar: la probabilidad de que al medir A obtengamos *algún valor* tiene que ser igual a la unidad.⁸

⁸ En otras palabras, la interpretación probabilística que hemos desarrollado es consistente con los tres *axiomas de Kolmogorov* sobre la probabilidad \Pr , que en este caso se expresarían como:

- i) $\Pr(A \subset \mathbb{S}) \geq 0$
- ii) $\Pr(A \subset \mathbb{R}) = 1$
- iii) $\Pr(A \subset \mathbb{S}) = \Pr(A \subset \mathbb{S}_1) + \Pr(A \subset \mathbb{S}_2)$ si $\mathbb{S} = \mathbb{S}_1 \cup \mathbb{S}_2$ y $\mathbb{S}_1 \cap \mathbb{S}_2 = \{\emptyset\}$.

§ 4. Consideremos ahora la magnitud física $F = F(A)$, que es función de A . Su valor medio será

$$\langle F \rangle = \sum_{a \in \sigma_p} F(a) \Pr_A(a) + \int_{\sigma_c} F(\alpha) \rho_A(\alpha) d\alpha \quad (5.41)$$

donde damos por supuesto que $F(a)$ es real y finito para cualquier $a \in \sigma(A)$. Como toda base de representación de A lo es también de $F(A)$, la regla de actuación del operador representativo \hat{F} es

$$\hat{F}\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{a \in \sigma_p} F(a) \left[\sum_{n=1}^{g_a} c_{a,n} \Phi_{a,n}(\mathbf{r}) \right] + \int_{\sigma_c} F(\alpha) \left[\sum_{n=1}^{g_\alpha} c_{\alpha,i} \Lambda_{\alpha,i}(\mathbf{r}) \right] d\alpha \quad (5.42)$$

lo que formalmente se expresa como $\hat{F} = F(\hat{A})$.

Nota: Esta igualdad generaliza entonces la correspondencia

$$F(A) = \sum_{n=1}^N F_n A^n \quad \longrightarrow \quad \hat{F} = \sum_{n=1}^N F_n \hat{A}^n$$

que se introdujo en la sección 5.2 para cualquier función $F(A)$ con las condiciones indicadas.

§ 5. Naturalmente, la interpretación probabilística para la posición y el momento lineal que vimos en la **sección 3.3** es un caso particular de esta teoría general. Si consideramos una partícula de masa M que se mueve en una dimensión espacial, las funciones $\delta_a(x)$ y $\theta_q(x)$ forman sendas bases de representación de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ compuestas por autofunciones de \hat{x} y \hat{p}_x , respectivamente. Toda función $\Phi(x)$ puede escribirse como

$$\Phi(x) = \int_{\mathbb{R}} \Phi(a) \delta_a(x) da = \int_{\mathbb{R}} \tilde{\Phi}(q) \theta_q(x) dq$$

por lo que

$$\rho(a) = \frac{|\Phi(a)|^2}{\|\Phi\|^2} \quad ; \quad \rho_{\text{mom}}(q) = \frac{|\tilde{\Phi}(q)|^2}{\|\Phi\|^2}$$

son las densidades de probabilidad relativas a una medida de la posición y del momento, respectivamente. La aplicación de (5.39) nos daría las probabilidades de detectar a la partícula en una zona finita $[a, b]$ o de que una medida del momento lineal dé un resultado dentro de un rango $[p_0, p_1]$ de valores de p_x .

Igualmente, si tenemos una magnitud física $V(x)$ dependiente exclusivamente de la posición, de acuerdo con (5.42) su regla de actuación será

$$\hat{V}\Phi(x) = \int_{\mathbb{R}} V(a)\Phi(a)\delta_a(x) da = V(x)\Phi(x)$$

en completa correspondencia con (5.9).

EJEMPLO 5.e. Probabilidades en la medida de una magnitud

Se sabe que al medir una magnitud A sólo pueden obtenerse los valores $a_n = na$, donde n es un entero, y que todos los autovalores tienen multiplicidad dos. En un instante dado la función de onda de una partícula es

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{3} \times [\sqrt{3}\Phi_{-1,1}(\mathbf{r}) + \Phi_{0,1}(\mathbf{r}) - i\Phi_{0,2}(\mathbf{r}) + 2\Phi_{1,1}(\mathbf{r})]$$

donde $\Phi_{n,i}(\mathbf{r})$ son autofunciones de onda normalizadas de \hat{A} con autovalor a_n en una base de representación propia de A . El número cuántico i es el índice de degeneración.

- a) Compruebe que $\Psi(\mathbf{r})$ está normalizada.
- b) Al medir A ¿qué valores pueden obtenerse y con qué probabilidad?
- c) Evalúe el valor medio $\langle A \rangle$ y la incertidumbre ΔA .

Solución:

- a) Como $\Psi(\mathbf{r})$ está expandida sobre una base ortonormal,

$$\|\Psi\|^2 = \frac{1}{9} \times (\sqrt{3}|^2 + |1|^2 + |-i|^2 + |2|^2) = \frac{1}{9} \times 9 = 1$$

y, en efecto, $\Psi(\mathbf{r})$ está normalizada.

- b) Por inspección directa de $\Psi(\mathbf{r})$, al medir A sólo pueden obtenerse los valores $\{-a, 0, +a\}$. Aplicando (5.38) y que $\|\Psi\|^2 = 1$,

$$\Pr_A(-a) = \left| \frac{\sqrt{3}}{3} \right|^2 = \frac{1}{3} \quad ; \quad \Pr_A(0) = \left| \frac{1}{3} \right|^2 + \left| \frac{-i}{3} \right|^2 = \frac{2}{9} \quad ; \quad \Pr_A(a) = \left| \frac{2}{3} \right|^2 = \frac{4}{9}$$

(la suma de las probabilidades es 1, como debe ser).

- c) De acuerdo con (5.37) y (5.41)

$$\langle A \rangle = (-a) \times \Pr_A(-a) + 0 \times \Pr_A(0) + a \times \Pr_A(a) = \frac{1}{9}a$$

y

$$\langle A^2 \rangle = (-a)^2 \times \Pr_A(-a) + 0^2 \times \Pr_A(0) + a^2 \times \Pr_A(a) = \frac{7}{9}a^2.$$

Entonces

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} = \frac{\sqrt{62}}{9}a.$$

PROBLEMAS PROPUESTOS

PROBLEMA 5.1. *Unicidad del operador de una magnitud*

Consideremos una magnitud física A . Demuestre que el operador representativo \hat{A} es único, esto es, que no puede haber otro operador \hat{A}' que reproduzca los valores medios de A para un estado cuántico arbitrario.

Ayuda: Use este teorema: $\hat{B} = \hat{0} \Leftrightarrow \langle \Psi | \hat{B} \Psi \rangle = 0$ para toda $\Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$

PROBLEMA 5.2. *Dominio de un operador e incertidumbre*

Sea \hat{A} el operador autoadjunto representativo de una cierta magnitud física A . Demuestre que si $\Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{D}(\hat{A})$ entonces el valor medio de A y la incertidumbre ΔA son finitas en el estado cuántico dado por la función de onda $\Psi(\mathbf{r})$.

PROBLEMA 5.3. *Incertidumbre máxima en un subespacio propio*

Simbolicemos como $\mathcal{W}_{[a,b]}$ al subconjunto de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ formado por las funciones de onda correspondientes a estados realizables en los que al medir una magnitud A se obtiene con certeza un valor dentro del intervalo $[a, b]$, donde $b > a$.

- a) Demuestre que $\mathcal{W}_{[a,b]}$ es un subespacio de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, al que se denomina *subespacio propio* de A correspondiente al intervalo $[a, b]$.
- b) Pruebe que

$$0 \leq \Delta A \leq \frac{b-a}{2} \quad \text{si } \Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{W}_{[a,b]}, \quad (5.43)$$

donde ΔA es la incertidumbre de A en el estado $|\Psi\rangle$.

- c) Demuestre que las desigualdades son estrictas (esto es, que las \leq se convierten en $<$) si $[a, b] \subset \sigma_c(A)$.
- d) Obtenga bajo qué condiciones se satura alguna de las desigualdades en (5.43).

Sugerencia: Razone en términos físicos en lugar de proceder con un planteamiento puramente matemático.

PROBLEMA 5.4. *Propiedades del operador de energía cinética*

En una dimensión espacial, el operador \hat{K} de energía cinética es

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2}.$$

- a) Obtenga su espectro, sus autofunciones y la degeneración de cada valor espectral.
- b) Demuestre que el valor medio de K en un estado $|\Psi\rangle$ es

$$\langle K \rangle = \frac{\hbar^2}{2M\|\Psi\|^2} \int_{\mathbb{R}} \left| \frac{d\Psi(x)}{dx} \right|^2 dx. \quad (5.44)$$

- c) Generalice el resultado (5.44) a tres dimensiones espaciales.
d) Demuestre que $\langle K \rangle > 0$ en cualquier estado cuántico realizable.

PROBLEMA 5.5. *Magnitudes positivas*

Demuestre que para cualquier estado realizable de una partícula, $\langle A \rangle \geq 0$. ¿Cuándo se puede saturar la desigualdad?

Demuestre igualmente que si $A = B^2$, donde B es otra magnitud física, entonces A es positiva.

Nota: Una magnitud se dice *positiva* si no tiene autovalores negativos.

PROBLEMA 5.6. *Espectro de algunos operadores*

Una partícula puntual de masa M se mueve en el espacio tridimensional. Obtenga el espectro, la forma general de sus autofunciones y la degeneración de cada autovalor de las siguientes magnitudes físicas:

- i) energía cinética K ;
- ii) coordenada radial r ;
- iii) componente x del momento lineal p_x ;
- iv) componente z de la posición;
- v) componente radial del momento lineal p_r .

Ayuda: En v) use funciones de onda proporcionales a $\exp(ikr)/r$ con $k \in \mathbb{R}$.

PROBLEMA 5.7. *Probabilidad de una medida de L_z*

Es sabido que toda función periódica $g(\varphi)$ con periodo 2π puede escribirse como el desarrollo de Fourier

$$g(\varphi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n \frac{\exp(in\varphi)}{\sqrt{2\pi}} \quad \text{con } g_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} g(\varphi) e^{-in\varphi} du. \quad (5.45)$$

A partir de este enunciado deduzca una expresión que nos permita expandir una función de onda arbitraria $\Psi(\mathbf{r})$ como suma de autofunciones de \hat{L}_z .

Como consecuencia, demuestre que la probabilidad de que al medir la componente z del momento angular de una partícula cuya función de onda normalizada es $\Psi(\mathbf{r})$ se obtenga un resultado $m\hbar$ está dada por

$$\Pr_{L_z}(m\hbar) = \frac{1}{2\pi} \left| \int_{\mathbb{R}^3} e^{-im\varphi} \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \right|^2 \quad \text{con } m \in \mathbb{Z}. \quad (5.46)$$

TEMA 6

EVOLUCIÓN TEMPORAL DETERMINISTA

Tras haber visto en los capítulos anteriores cómo se describen estados cuánticos y magnitudes físicas para una partícula puntual, abordaremos ahora el estudio de la dinámica cuántica. Nuestro escenario general será el de una partícula de masa M sujeta a una fuerza conservativa $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ que deriva de una energía potencial $V(\mathbf{r})$.

Iniciaremos el capítulo estudiando la dependencia temporal de la función de onda de una partícula libre usando el postulado de De Broglie y el principio de superposición. Los resultados nos proporcionarán suficientes argumentos de plausibilidad para enunciar la ecuación de onda que ha de satisfacer $\Psi(\mathbf{r}, t)$ en el caso de que la partícula esté sometida a una fuerza conservativa. Ésta es la ecuación de Schrödinger sobre la que se sustenta la llamada mecánica ondulatoria.

A continuación obtendremos una descripción hidrodinámica de la evolución cuántica en términos de la variación temporal de la densidad de probabilidad $\rho(\mathbf{r}, t)$ de la partícula.

El siguiente paso será la introducción del concepto de estado cuántico estacionario y la formulación de una técnica para resolver la ecuación de Schrödinger en su caso más general. Como ilustración, analizaremos dos problemas sencillos pero muy diferentes entre sí: una partícula sometida a una fuerza constante y una partícula que evoluciona libremente pero confinada en una región finita del espacio. Este segundo problema mostrará el importante fenómeno de la cuantización de la energía, del que ya hemos hablado en el Tema 5. También estudiaremos los llamados sistemas separables: problemas multidimensionales que se pueden reducir a un conjunto de problemas unidimensionales desacoplados.

Finalmente, obtendremos una ecuación de evolución para los valores medios que en algunas ocasiones nos permitirá calcular su dependencia temporal sin necesidad de resolver la ecuación de Schrödinger. En una última sección, de lectura optativa, discutiremos la correspondencia existente entre las dinámicas clásica y cuántica.

Orientaciones generales al plan de trabajo

La aplicación de los principales resultados de este capítulo exigen técnicas y procedimientos específicos, algunos de ellos nada inmediatos. Sugerimos así **20 horas** de trabajo personal distribuidas a partes iguales entre el estudio de los contenidos teóricos y la resolución de los ejemplos y problemas propuestos.

Objetivos del capítulo

- Ser capaz de resolver la dinámica cuántica de una partícula libre.
- Plantear a través de la ecuación de Schrödinger la ecuación de evolución del estado cuántico de una partícula sometida a una fuerza conservativa.
- Entender el concepto de estado estacionario y sus implicaciones. Saber usar tal concepto de manera instrumental para hallar una solución general a la ecuación de Schrödinger.
- Obtener probabilidades de ocurrencia para medidas de la energía mecánica a partir de la expresión de un estado cuántico en una base de representación formada por estados estacionarios.
- Simplificar la dinámica de un sistema separable en términos de las de sistemas más sencillos independientes entre sí.
- Saber obtener y resolver la ecuación de evolución temporal para valores medios en situaciones sencillas.

6.1. EVOLUCIÓN TEMPORAL DE UNA PARTÍCULA LIBRE

§ 1. Consideremos una partícula puntual de masa M no relativista que no está sometida a la acción de ningún agente exterior (esto incluye la interacción con hipotéticos dispositivos de medida). De acuerdo con el postulado de De Broglie, si la partícula tuviese un momento lineal bien definido su función de onda sería

$$\theta_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} e^{-i\omega t}, \quad \text{con } \omega = \frac{E_p}{\hbar} = \frac{|\mathbf{p}|^2}{2M\hbar}, \quad (6.1)$$

donde hemos incluido por mera conveniencia matemática el prefactor $(2\pi\hbar)^{-3/2}$. Ya que no hay una fuerza actuando sobre la partícula, (6.1) es una solución del problema dinámico correspondiente a una partícula libre.

Debido al principio de superposición, toda combinación lineal de funciones (6.1) de la forma

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} a(\mathbf{p}) \theta_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{p}$$

es también una solución admisible al problema [aquí, $a(\mathbf{p})$ son los coeficientes de tal combinación lineal]. Sustituyendo $\theta_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)$ por su expresión (6.1), tendríamos que

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \left\{ a(\mathbf{p}) e^{-iE_p t/\hbar} \right\} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} d^3\mathbf{p}. \quad (6.2)$$

Por otro lado, *cualquier* función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ puede escribirse en términos de su transformada de Fourier (representación en momentos) como

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} d^3\mathbf{p}. \quad (6.3)$$

De esta forma, y gracias a la unicidad de la transformada de Fourier, si identificamos (6.2) con (6.3) llegamos a la solución general del problema dinámico de una partícula libre en la representación en momentos:

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) = a(\mathbf{p}) e^{-iE_p t/\hbar} \quad \text{con } a(\mathbf{p}) = \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, 0),$$

(6.4)

que es especialmente sencilla. En la representación en posiciones, tal solución general es

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, 0) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-E_p t)/\hbar} d^3\mathbf{p} \quad \text{con } E_p = \frac{1}{2M} |\mathbf{p}|^2. \quad (6.5)$$

Observemos que la ecuación (6.4) nos dice que $|\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)|^2 = |\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, 0)|^2$, por lo que la densidad de probabilidad para el momento es independiente del tiempo:

$$\rho_{\text{mom}}(\mathbf{p}, t) = \rho_{\text{mom}}(\mathbf{p}, 0). \quad (6.6)$$

El resultado es lógico: aunque la función de onda no proporciona toda la información clásicamente accesible, no debe contradecirse el hecho básico de que el momento lineal de una partícula libre es una cantidad conservada en la evolución temporal. Como consecuencia, el valor medio y la incertidumbre de cualquier magnitud que sea función exclusiva de \mathbf{p} , como la energía cinética, han de ser constantes en el tiempo.

§ 2. La función de onda (6.5) de la partícula libre es así igual a la superposición de ondas planas de diferentes vectores de onda \mathbf{k} y frecuencias $\omega_k = \hbar|\mathbf{k}|^2/(2M)$, con “amplitudes” proporcionales a la función de onda en la representación en momentos $\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, 0)$ en el instante $t = 0$. Es entonces muy ilustrativo describir la evolución cuántica de la partícula como la propagación en el espacio del *paquete de ondas* expresado en (6.5).¹

Supongamos, por simplicidad, que la función de onda (6.5) está normalizada y que el movimiento de la partícula está restringido a una dimensión espacial. Definamos la posición del centro del paquete de ondas como

$$x_g(t) = \int_{\mathbb{R}} x |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx = \langle x \rangle_t \quad (6.7)$$

que, tal y como hemos indicado, coincide con el valor medio de la posición de acuerdo con la interpretación probabilística. Se define la *velocidad de grupo* $v_g(t)$ del paquete de ondas como la de desplazamiento de su centro $x_g(t)$, es decir,

$$v_g(t) = \frac{d}{dt} x_g(t) = \frac{d}{dt} \langle x \rangle_t = \frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}} x |\Psi(x, t)|^2 dx. \quad (6.8)$$

Operando,

$$v_g(t) = \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} x \Psi(x, t) + \Psi^*(x, t) x \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \right) dx$$

¹ Es tan ilustrativo como que la primera interpretación que dio Erwin Schrödinger a la función de onda en sus históricos trabajos de 1926 fue que era una descripción *directa* de una partícula elemental, siendo su distribución de carga proporcional a $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$. Fue Max Born quien propuso poco después que la función de onda estaba ligada a la probabilidad de ocurrencia de una medida de la posición.

y si ahora pasamos a la representación en momentos, usando el teorema de Parseval y la equivalencia $x \leftrightarrow i\hbar\partial_{p_x}$ al efectuar transformadas de Fourier, obtenemos

$$v_g(t) = i\hbar \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{\partial \tilde{\Psi}^*(p_x, t)}{\partial t} \frac{\partial \tilde{\Psi}(p_x, t)}{\partial p_x} - \frac{\partial \tilde{\Psi}^*(p_x, t)}{\partial p_x} \frac{\partial \tilde{\Psi}(p_x, t)}{\partial t} \right) dp_x.$$

Como para la partícula libre $\tilde{\Psi}(p_x, t) = \tilde{\Psi}(p_x, 0) \exp[-ip_x^2 t/(2M\hbar)]$, podemos efectuar explícitamente las derivadas. Tras operar y simplificar,

$$v_g(t) = \frac{-1}{2M} \int_{\mathbb{R}} p_x^2 \frac{\partial |\tilde{\Psi}(p_x, t)|^2}{\partial p_x} dp_x.$$

Como $|\tilde{\Psi}(p_x, t)| = 0$ si $p_x \rightarrow \pm\infty$ (de lo contrario la función de onda no podría ser normalizable), haciendo una integral por partes llegamos a que

$$v_g(t) = \frac{d}{dt} \langle x \rangle_t = \frac{1}{M} \int_{\mathbb{R}} p_x |\tilde{\Psi}(p_x, t)|^2 dp_x = \frac{1}{M} \langle p_x \rangle_t.$$

Tenemos entonces que la velocidad del paquete de ondas (igual a la variación temporal del valor medio de la posición) es igual al valor medio del momento lineal dividido por la masa de la partícula, es decir, el valor esperado de la velocidad de la partícula. Este resultado es muy razonable y puede verse como una confirmación de la bondad de la interpretación probabilística. Si extendemos el resultado a tres dimensiones llegamos a que para una partícula libre

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{r} \rangle_t = \frac{1}{M} \langle \mathbf{p} \rangle_t = \frac{1}{M} \langle \mathbf{p} \rangle_0$$

(6.9)

y el valor medio cuántico de la posición sigue la misma ley temporal que la posición clásica.²

² Se puede llegar a (6.9) mediante un razonamiento menos técnico que, sin embargo, adolece de falta de generalidad. Partimos del hecho de que cada componente del paquete de ondas (cada onda plana de De Broglie) se desplaza con una *velocidad de fase* dada por $\mathbf{v}_f(\mathbf{k}) = \hbar\mathbf{k}/2m$. Pero un resultado conocido de la teoría de ondas es que para paquetes *cuasiplanos* (para los que los vectores de onda de las ondas planas que lo constituyen están restringidos a un entorno muy pequeño de un valor \mathbf{k}_0), la velocidad de grupo está dada por $\mathbf{v}_g \simeq \nabla_{\mathbf{k}}[\omega(\mathbf{k})]|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0}$. En el caso que nos ocupa la relación de dispersión es $\omega(\mathbf{k}) = \hbar|\mathbf{k}|^2/(2M)$, por lo que

$$\mathbf{v}_g = \frac{d}{dt} \mathbf{r}_g(t) \simeq \frac{\hbar}{2M} \nabla_{\mathbf{k}}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} = \frac{\hbar\mathbf{k}_0}{M} = 2\mathbf{v}_f(\mathbf{k}) = \frac{1}{M} \mathbf{p}_0$$

donde \mathbf{p}_0 es el momento correspondiente a \mathbf{k}_0 que, en buena lógica, es el valor medio del momento lineal.

Como ilustración del resultado representamos en la **FIG. 6-1** un paquete de ondas en una dimensión, cuya velocidad de grupo es v_g , y que es igual a la superposición de ondas que se propagan con velocidades de fase distribuidas en torno al valor $v_g/2$.

§ 3. Otro hecho notable de la propagación libre es el *ensanchamiento del paquete de ondas*: a medida que la onda se propaga su extensión espacial aumenta. Ciñéndonos de nuevo a una dimensión se puede llegar a un resultado cualitativo de este ensanchamiento acudiendo al principio de incertidumbre. Imaginemos que en $t = 0$ el estado cuántico de la partícula libre es tal que $\langle x \rangle_0 = 0$. Llamemos p_0 y $(\Delta p)_0$ al valor esperado y a la incertidumbre del momento lineal (constantes en el tiempo), respectivamente, y $(\Delta x)_0$ a la incertidumbre en la posición de la partícula en el instante inicial. Teniendo en cuenta que, como acabamos de ver en el epígrafe anterior, hay una correspondencia entre la información probabilística que nos da la función de ondas y la evolución clásica de los valores medios, el momento lineal de la partícula está indeterminado en el intervalo aproximado $[p_0 - (\Delta p)_0, p_0 + (\Delta p)_0]$. Transcurrido un tiempo $t \gg 0$ la partícula estará entonces en la región

$$\left[\frac{(p_0 - (\Delta p)_0)t}{M}, \frac{(p_0 + (\Delta p)_0)t}{M} \right] = \left[\langle x \rangle_t - \frac{(\Delta p)_0 t}{M}, \langle x \rangle_t + \frac{(\Delta p)_0 t}{M} \right].$$

Si suponemos que en $t = 0$ la desigualdad de Heisenberg se satura, esto es, que $(\Delta x)_0(\Delta p)_0 = \hbar/2$,

$$(\Delta x)_t \sim \frac{(\Delta p)_0}{M} t \sim \frac{\hbar}{2M(\Delta x)_0} t \quad \text{si } t \gg 0. \quad (6.10)$$

El resultado (6.10) es cualitativo, pero nos indica que $(\Delta x)_t$ aumenta linealmente con t . Abordemos en el siguiente ejemplo un tratamiento más preciso que, además, nos servirá para ver un caso paradigmático de evolución temporal de un estado cuántico.

EJEMPLO 6.a. (*) Propagación libre de un paquete gaussiano

Suponga que en el instante $t = 0$ la función de onda normalizada de una partícula de masa M sin espín que se mueve libremente en una dimensión espacial es

$$\Psi(x, 0) = \frac{\exp[-x^2/(2a^2)]}{(\pi a^2)^{1/4}} \exp(ip_0 x/\hbar),$$

donde p_0 y a son reales y, además, $a > 0$. Obtenga la densidad de probabilidad $\rho(x, t)$ en un instante de tiempo t arbitrario y, a partir de este resultado, la evolución temporal del valor esperado y de la incertidumbre de la posición.

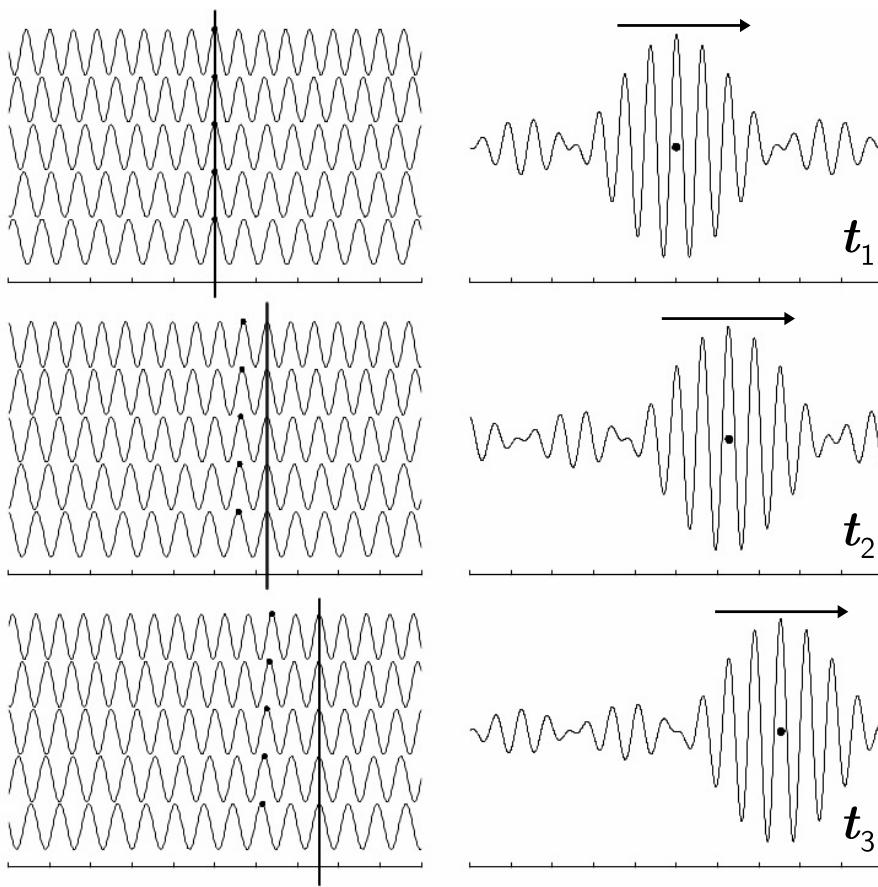


Figura 6-1. Propagación de un paquete de ondas compuesto por cinco ondas planas en una dimensión (en la parte izquierda de la figura únicamente se representan las partes reales; las abscisas corresponden al espacio). El centro del paquete se sitúa en aquel punto en el que los máximos de las ondas planas están alineados. Como se puede observar en la parte derecha, la velocidad de grupo es el doble que la media de las velocidades de fase de las ondas constitutivas del paquete.

Ayuda: $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\beta^2(p-q)^2/2} e^{-i\gamma p^2/2} du = \frac{1}{\sqrt{\beta^2 + i\gamma}} \exp\left(-\frac{i\beta^2\gamma q^2}{2(\beta^2 + i\gamma)}\right)$

Solución:

Como hemos visto en el **ejemplo 3.e**, la función de onda en $t = 0$, $\Psi(x, 0)$ es un paquete gaussiano en el que

$$\langle x \rangle_{t=0} = 0 \quad , \quad (\Delta x)_{t=0} = \frac{a}{\sqrt{2}} \quad , \quad \langle p_x \rangle_{t=0} = p_0 \quad , \quad (\Delta p_x)_{t=0} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}a},$$

y siendo su representación en momentos

$$\tilde{\Psi}(p_x, 0) = \frac{1}{(\pi\hbar^2/a^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{a^2(p_x - p_0)^2}{2\hbar^2}\right].$$

Si ahora usamos (6.4), en un instante arbitrario t la función de onda en momentos es

$$\tilde{\Psi}(p_x, t) = \frac{1}{(\pi\hbar^2/a^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{a^2(p_x - p_0)^2}{2\hbar^2}\right] \exp\left(-\frac{ip_x^2}{2M\hbar}t\right).$$

La función de onda correspondiente será, pues,

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{\Psi}(p_x, t) e^{ip_x x/\hbar} dp_x.$$

Sustituyendo y reagrupando términos,

$$\Psi(x, t) = \frac{e^{-x^2/(2a^2)}}{(\pi\hbar^2/a^2)^{1/4}} \frac{e^{+ip_0 x/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left[-\frac{a^2}{2\hbar^2} \left(p_x - p_0 - i\frac{\hbar x}{a^2}\right)^2 - \frac{it}{2M\hbar} p_x^2\right] dp_x.$$

Ya sólo queda usar la ayuda, operar y simplificar para llegar a que

$$\Psi(x, t) = \frac{e^{i\xi(x, t)}}{\pi^{1/4} \sqrt{a + i\hbar t/(Ma)}} \exp\left[-\frac{(x - (p_0 t/M))^2}{2(a^2 + (\hbar^2 t^2/M^2 a^2))}\right]. \quad (6.11)$$

donde $\xi(x, t)$ es una cierta función dependiente de la posición y el tiempo. La densidad de probabilidad en un instante t será, pues, la gaussiana

$$\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sqrt{\frac{a^2}{2} + \frac{\hbar^2 t^2}{2M^2 a^2}}} \exp\left[-\frac{(x - \frac{p_0}{M} t)^2}{2(\frac{a^2}{2} + \frac{\hbar^2 t^2}{2M^2 a^2})}\right],$$

cuya evolución temporal está representada esquemáticamente en la **FIG. 6-2**. Por otra parte, dado que la densidad de probabilidad gaussiana es

$$\rho_{\text{Gauss}}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}(\Delta x)} \exp\left[-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2(\Delta x)^2}\right] \quad (6.12)$$

podemos interpretar que $\rho(x, t)$ es una densidad de probabilidad gaussiana centrada en

$$\langle x \rangle_t = \frac{p_0}{M} t.$$

Naturalmente, se satisface (6.9), y la incertidumbre correspondiente será

$$(\Delta x)_t = \sqrt{\frac{a^2}{2} + \frac{\hbar^2 t^2}{2M^2 a^2}} = \sqrt{(\Delta x)_0^2 + \frac{\hbar^2}{4M^2(\Delta x)_0^2} t^2}, \quad (6.13)$$

que en el límite $t \gg 0$ coincide con el resultado cualitativo (6.10).

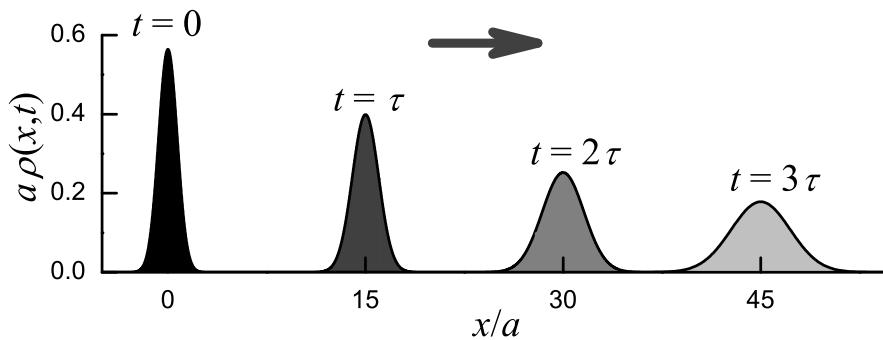


Figura 6-2. Evolución de la densidad de probabilidad de una partícula de masa M que se propaga libremente en una dimensión espacial (**ejemplo 6.a**). La velocidad media de la partícula es $v_0 = 15a/\tau$, siendo $\tau = Ma^2/\hbar$

Es importante darse cuenta de que la función de onda $\Psi(x, t)$ es estrictamente un paquete gaussiano sólo para $t = 0$, pues el término $\exp[i\xi(x, t)]$ la hace cambiar de forma. Aunque una de las propiedades características de los paquetes gaussianos es que en ellos se saturan las desigualdades de Heisenberg (esto es, que la desigualdad \leq se convierte entonces en la igualdad), en este caso no ocurre puesto que, para cualquier instante de tiempo,

$$\langle p_x \rangle_t = p_0 \quad ; \quad (\Delta p_x)_t = (\Delta p_x)_{t=0}$$

y a medida que transcurre el tiempo el producto $(\Delta x)_t(\Delta p_x)_t$ va aumentando de valor.

6.2. LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

§ 1. El postulado de De Broglie nos ha permitido obtener la dependencia temporal de la función de onda de una partícula libre. Sin embargo, si la partícula está bajo la acción de una fuerza conservativa $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ que deriva de una energía potencial $V(\mathbf{r})$ es obvio que las ondas planas de De Broglie (6.1) ya no son las soluciones básicas del problema dinámico.

El objetivo de esta sección es encontrar la ecuación de evolución que obedece la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$, ecuación que en última instancia ha de postularse pero que propondremos a partir de argumentos de plausibilidad.

Impongamos que la ecuación de evolución satisface las siguientes condiciones:

- i) Las ondas planas De Broglie (6.1) la satisfacen si $V(\mathbf{r}) = 0$.
- ii) Ha de ser lineal.

- iii) Ha de ser de primer orden en el tiempo.
- iv) Si el estado de la partícula está representado por una onda monocromática con frecuencia ω , $\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$, con $\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r}, 0)$, entonces $\langle H \rangle_t = \hbar\omega$ es el valor esperado de su energía.³

La condición **i**) garantiza la consistencia con los resultados vistos en la sección anterior. La hipótesis **ii**) es el resultado directo del principio de superposición. La imposición **iii**) es consecuencia de que estamos suponiendo que *toda* la información física de interés está contenida en $\Psi(\mathbf{r}, t)$, por lo que la evolución del estado cuántico de la partícula debe determinarse únicamente a partir del conocimiento de la función de onda en un instante inicial dado t_0 ; ello exige que la ecuación de onda sea de primer orden en el tiempo ya que de lo contrario sería imprescindible conocer también la variación temporal de Ψ en dicho instante t_0 . Finalmente, la condición **iv**) extiende la relación de De Broglie entre frecuencia de la onda de materia y energía al caso de una partícula no libre.

Una ecuación que cumple todas las hipótesis anteriores es la siguiente:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}, t)} \quad (6.14)$$

que es la denominada **ecuación de Schrödinger** para una partícula. Observe, además, que el segundo miembro de (6.14)

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}, t) \quad (6.15)$$

corresponde a la regla de actuación del **operador energía** u **operador hamiltoniano** de la partícula con energía potencial $V(\mathbf{r})$ (cfr. la **sección 5.2**, ecuación (5.10)). Por tanto, la ecuación de Schrödinger puede escribirse de manera más compacta como

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t). \quad (6.16)$$

Comprobemos que, efectivamente, la ecuación de Schrödinger satisface las cuatro condiciones que hemos impuesto. Por construcción, (6.14) es una ecuación lineal de primer orden en el tiempo, y es inmediato ver por sustitución directa que es satisfecha por las ondas planas de De Broglie si $V(\mathbf{r}) = 0$. Finalmente, si

³ Usaremos H para designar de manera genérica la energía, mientras que E representará valores específicos de la misma.

expresamos el valor medio de H en términos del operador \hat{H} y usamos la igualdad (6.16), tenemos que

$$\langle H \rangle_t = \frac{\int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r}}{\|\Psi(t)\|^2} = \frac{i\hbar}{\|\Psi(t)\|^2} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} d^3\mathbf{r} \quad (6.17)$$

Si $\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)$ es una solución monocromática normalizable de la ecuación de Schrödinger entonces $\partial_t \Psi(\mathbf{r}, t) = -i\omega \Psi(\mathbf{r}, t)$, sustituyendo en la igualdad anterior tenemos

$$\langle H \rangle_t = \frac{\hbar\omega}{\|\Psi(t)\|^2} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} = \hbar\omega$$

por lo que se cumple la hipótesis **iv**).

§ 2. Podemos escribir la ecuación de Schrödinger en la representación en momentos. Para ello basta obtener la transformada de Fourier de $\hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t)$,

$$\hat{H}\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} (\hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t)) d^3\mathbf{r},$$

donde seguimos la costumbre de usar el mismo símbolo para el operador hamiltoniano independientemente de la representación.⁴ Si en el segundo miembro sustituimos $\hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t)$ por su expresión (6.15), escribimos $\Psi(\mathbf{r}, t)$ en términos de $\Psi(\mathbf{q}, t)$ y operamos teniendo en cuenta las propiedades de la transformada de Fourier, llegamos a que

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)}{\partial t} &= \frac{|\mathbf{p}|^2}{2m} \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) + \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{V}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t) d^3\mathbf{q} = \hat{H}\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) \\ \text{con } \tilde{V}(\mathbf{p}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} d^3\mathbf{r} \end{aligned} \quad (6.18)$$

que es una ecuación integro-diferencial lineal.⁵ Si $V(\mathbf{r})$ no decrece a cero cuando $r \rightarrow \infty$ entonces la expresión para $\tilde{V}(\mathbf{p})$ no converge y la regla de actuación de

⁴ Algunos textos sí distinguen, por lo que no es extraño notar al operador energía como $\hat{H}(\mathbf{r})$ (posiciones) o $\hat{H}(\mathbf{p})$ (momentos). Sin embargo procuraremos dejar siempre clara la representación en la que se trabaja, por lo que creemos que tal matización no es estrictamente necesaria.

⁵ Como se ve, la función de onda $\tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t)$ aparece en la derivación temporal y en el integrando de la integral sobre $d^3\mathbf{q}$, en contraposición con el caso de la ecuación de Schrödinger diferencial, en la que a la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ se le aplican los operadores de derivación temporal y espaciales.

\hat{H} en la representación en momentos deberá obtenerse usando otras propiedades de la transformada de Fourier, tal y como vamos a ver en el siguiente ejemplo.

EJEMPLO 6.b. Ecuación de Schrödinger en la representación en momentos

Una partícula de masa M se mueve en una dimensión bajo la acción de una fuerza recuperadora que deriva de la energía potencial $V(x) = M\omega^2x^2/2$. Exprese la ecuación de Schrödinger en la representación en momentos.

Solución:

En términos de los operadores posición y momento,

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\hat{p}_x^2 + \frac{1}{2}M\omega^2\hat{x}^2.$$

En la representación en momentos tenemos que

$$\hat{p}_x\tilde{\Psi}(p, t) = p\tilde{\Psi}(p, t) \quad ; \quad \hat{x}\tilde{\Psi}(p, t) = +i\hbar\frac{\partial\tilde{\Psi}(p, t)}{\partial p},$$

de manera que

$$i\hbar\frac{\partial\tilde{\Psi}(p, t)}{\partial t} = \hat{H}\tilde{\Psi}(p, t) = \left[-\frac{M\omega^2\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial p^2} + \frac{1}{2M}p^2 \right] \tilde{\Psi}(p, t),$$

cuya estructura es similar (compruébelo) a la ecuación de Schrödinger en la representación en posiciones.

§ 3. Como discutimos en el capítulo anterior, el operador \hat{H} es autoadjunto. Ello implica que para cualquier par de funciones normalizables $\Psi(\mathbf{r})$ y $\Phi(\mathbf{r})$ pertenecientes al dominio de \hat{H} se cumple que

$$\int_{\mathbb{R}^3} \Phi^*(\mathbf{r})\hat{H}\Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \int_{\mathbb{R}^3} \left(\hat{H}\Phi(\mathbf{r}) \right)^* \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad \text{o} \quad \langle \Phi | \hat{H} \Psi \rangle = \langle \hat{H} \Phi | \Psi \rangle.$$

(6.19)

Esta propiedad va a garantizar que *la evolución temporal dictada por la ecuación de Schrödinger es unitaria*, esto es, *conserva el producto escalar*:

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle \Psi(t) | \Phi(t) \rangle = 0.}$$

(6.20)

En efecto, si derivamos respecto del tiempo $\langle \Psi(t) | \Phi(t) \rangle$ y usamos la ecuación de Schrödinger en su forma (6.16), vemos que

$$\begin{aligned}\frac{d\langle \Psi(t) | \Phi(t) \rangle}{dt} &= \int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{\partial \Psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \Phi(\mathbf{r}, t) + \Psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right) d^3\mathbf{r} \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} \left([\hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t)]^* \Phi(\mathbf{r}, t) - \Psi^*(\mathbf{r}, t) [\hat{H}\Phi(\mathbf{r}, t)] \right) d^3\mathbf{r}\end{aligned}$$

y de acuerdo con (6.19) la última expresión se anula. Como consecuencia, la norma $\|\Psi(t)\|$ de la función de onda es constante en el tiempo.

De similar manera se prueba que para cualquier estado cuántico $|\Psi(t)\rangle$,

$$\frac{d}{dt} \langle H \rangle_t = \frac{d}{dt} \frac{\langle \Psi(t) | \hat{H} \Psi(t) \rangle}{\|\Psi\|^2} = \frac{1}{\|\Psi\|^2} \frac{d}{dt} \left(\langle \Psi(t) | \hat{H} \Psi(t) \rangle \right) = 0 \quad (6.21)$$

donde ya hemos excluido la dependencia temporal en la norma de $|\Psi(t)\rangle$.

Tenemos así que el **principio de conservación de la energía** se mantiene en física cuántica. Igualmente, la incertidumbre de la energía ΔH y el valor medio de cualquier otra magnitud física que dependa exclusivamente de la energía de la partícula serán constantes en el tiempo.

En resumen:

- La evolución determinista del estado cuántico de una partícula no relativista de masa M sometida a la acción de una fuerza conservativa que deriva de la energía potencial $V(\mathbf{r})$ está dictada por la **ecuación de Schrödinger**

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right\} \Psi(\mathbf{r}, t) \equiv \hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t),$$

donde \hat{H} es un operador lineal autoadjunto, denominado **hamiltoniano** de la partícula.

- Este operador \hat{H} determina el valor esperado de la energía:

$$\langle H \rangle = \frac{1}{\|\Psi(t)\|^2} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r}$$

que es real y constante en el tiempo.

- La evolución temporal de la función de onda es unitaria en el sentido de que se conserva el producto escalar entre dos funciones de onda que cumplen la ecuación de Schrödinger:

$$\frac{d\langle \Psi(t)|\Phi(t)\rangle}{dt} = 0.$$

Por tanto, la norma de un estado cuántico es constante en el tiempo.

- En la representación en momentos la ecuación de Schrödinger es

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)}{\partial t} = \frac{|\mathbf{p}|^2}{2M} \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) + \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{V}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \tilde{\Psi}(\mathbf{q}, t) d^3\mathbf{q},$$

donde

$$\tilde{V}(\mathbf{p}) \equiv \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} d^3\mathbf{r}.$$

6.3. EL OPERADOR DE EVOLUCIÓN TEMPORAL

§ 1. Por construcción, la ecuación de Schrödinger nos permite obtener la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ conocida su dependencia espacial en un instante inicial t_0 . Realizando un desarrollo en serie de Taylor

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}, t_0) + \left. \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t} \right|_{t=t_0} (t - t_0) + \frac{1}{2!} \left. \frac{\partial^2 \Psi(r, t)}{\partial t^2} \right|_{t=t_0} (t - t_0)^2 + \dots$$

y como la ecuación de Schrödinger implica la igualdad operacional $\partial/\partial t = -(i/\hbar)\hat{H}$ tenemos que

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}, t_0) + \left(\frac{-i[t - t_0]}{\hbar} \right) \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t_0) + \frac{1}{2!} \left(\frac{-i[t - t_0]}{\hbar} \right)^2 \hat{H}^2 \Psi(\mathbf{r}, t_0) + \dots$$

o, lo que es lo mismo,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i[t - t_0]}{\hbar} \right)^n \hat{H}^n \Psi(\mathbf{r}, t_0)$$

Recordando la expansión en serie de Taylor de la función exponencial, la solución a la ecuación de Schrödinger puede escribirse como

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{U}(t - t_0)\Psi(\mathbf{r}, t_0)$$

$$\text{con } \hat{U}(\tau) \equiv \exp\left(-\frac{i\tau}{\hbar}\hat{H}\right) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i\tau}{\hbar}\right)^n \hat{H}^n \quad (6.22)$$

donde $\hat{U}(\tau)$ es el denominado ***operador de evolución temporal*** asociado a \hat{H} .

§ 2. Aunque el dominio de \hat{H} no tiene por qué ser todo el espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, puede demostrarse que el dominio de $\hat{U}(\tau)$ es todo $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$. Además, para cualquier par de funciones $\Psi(\mathbf{r})$ y $\Phi(\mathbf{r})$ de cuadrado integrable se tiene, por construcción, que

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \langle \hat{U}(\tau) \Psi | \hat{U}(\tau) \Phi \rangle$$

(basta identificar $\Psi(\mathbf{r})$ y $\Phi(\mathbf{r})$ como las funciones de onda de sendos estados cuánticos en $t = 0$, por lo que la actuación de $\hat{U}(\tau)$ nos da las funciones de onda en $t = \tau$). Esto implica que *el operador de evolución temporal es unitario* y, además,

$$(\hat{U}(\tau))^\dagger = \hat{U}(-\tau) = (\hat{U}(\tau))^{-1} \quad (6.23)$$

como resulta inmediato comprobar si recordamos las propiedades generales del operador adjunto vistas en §4.4.4.

§ 3. La expresión (6.22) de la solución general de la ecuación de Schrödinger en términos del operador de evolución temporal no sólo es formalmente importante sino que es el punto de partida de multitud de algoritmos numéricos relevantes en el estudio computacional de diferentes problemas de evolución.⁶ Imaginemos que somos capaces de evaluar numéricamente la actuación del operador hamiltoniano sobre una función de onda. Entonces, si definimos un *paso de tiempo* finito δt y truncamos el desarrollo del operador unitario $\hat{U}(\tau)$ a orden dos, podemos escribir que

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \delta t) \simeq \Psi(\mathbf{r}, t) - \frac{i\delta t}{\hbar} \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) - \frac{(\delta t)^2}{2!\hbar^2} \hat{H} \left(\hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) \right). \quad (6.24)$$

⁶ En este caso se considera la variable tiempo, ya que se estudia la evolución temporal del sistema cuántico. Pero lo que ahora vamos a esquematizar es un procedimiento general para resolver de manera aproximada ecuaciones diferenciales. Estos métodos (llamados métodos de *diferencias finitas*) se aplican comúnmente a las variables espaciales y no a la variable temporal, y muy habitualmente en sistemas que deben resolverse a la manera de la física clásica.

De esta forma, a partir de $\Psi(\mathbf{r}, t)$ obtendríamos $\Psi(\mathbf{r}, t + \delta t)$, que nos permitiría evaluar $\Psi(\mathbf{r}, t + 2\delta t)$ y así sucesivamente. Sin embargo este método tiene una limitación fundamental: la ecuación de Schrödinger es *reversible*, es decir, si obtenemos $\Psi(\mathbf{r}, t + \delta t)$ a partir de $\Psi(\mathbf{r}, t)$, deberíamos llegar a $\Psi(\mathbf{r}, t)$ si partimos de $\Psi(\mathbf{r}, t + \delta t)$ pero retrocediendo en el tiempo, cosa que no ocurre en esta aproximación. Además, el tercer término en este desarrollo requiere aplicar dos veces el hamiltoniano \hat{H} a la función, lo que puede resultar complicado y costoso en tiempo de computación.

Sin embargo, un desarrollo similar a (6.24), cambiando δt por $-\delta t$ da

$$\Psi(\mathbf{r}, t - \delta t) \simeq \Psi(\mathbf{r}, t) + \frac{i\delta t}{\hbar} \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) - \frac{(\delta t)^2}{2! \hbar^2} \hat{H} [\hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t)]$$

y restando esta expresión de la anterior resulta

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \delta t) \simeq -2 \frac{i\delta t}{\hbar} \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) + \Psi(\mathbf{r}, t - \delta t), \quad (6.25)$$

donde ha desaparecido el término molesto. Este algoritmo, en el que la función de onda en un instante $t + \delta t$ se evalúa a partir de las funciones de onda en los instantes t y $t - \delta t$, es numéricamente menos costoso que (6.24) y además preserva la reversibilidad de la evolución hamiltoniana para δt finito, como resulta evidente por una simple inspección de (6.25).⁷

A efectos prácticos, si partimos de un instante inicial t_0 la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t_0 + \delta t)$ se puede evaluar usando (6.24); con estos dos datos la aplicación sucesiva de (6.25) nos proporcionará las funciones de onda en los instantes $t_0 + 2\delta t$, $t_0 + 3\delta t$, etc. Obviamente el resultado será numéricamente más preciso cuanto menor sea el paso de tiempo δt . Habiendo otros algoritmos mucho más sofisticados, el que acabamos de presentar resulta bastante preciso dentro de su sencillez.

6.4. LA ECUACIÓN DE CONTINUIDAD

§ 1. La ecuación de Schrödinger rige la evolución dinámica del estado cuántico de una partícula de masa M y, por ende, de todas sus propiedades observables. Por

⁷ Desde un punto de vista puramente numérico, este algoritmo implica utilizar para el cálculo de la derivada temporal de una función en el instante t una aproximación en *diferencias finitas centradas*,

$$\frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \simeq \frac{\Psi(\mathbf{r}, t + \delta t) - \Psi(\mathbf{r}, t - \delta t)}{2\delta t},$$

que es una aproximación simétrica respecto a t y con un error de orden $\mathcal{O}(\delta t)^2$, en lugar de una aproximación en diferencias adelantadas

$$\frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \simeq \frac{\Psi(\mathbf{r}, t + \delta t) - \Psi(\mathbf{r}, t)}{\delta t},$$

que no es simétrica y que tiene un error $\mathcal{O}(\delta t)$ (mayor que la anterior aproximación si $\delta t < 1$).

su importancia en la aplicación de la interpretación probabilística es interesante obtener la variación temporal de la densidad de probabilidad relativa a medidas de la posición, que recordemos está dada por

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\|\Psi\|^2} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t).$$

Aplicando la ecuación de Schrödinger y recordando que $\|\Psi(t)\|^2$ es constante en el tiempo

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \frac{1}{\|\Psi\|^2} \left(\frac{\partial \Psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) + \Psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right) \\ &= \frac{i}{\hbar \|\Psi\|^2} \left(\Psi(\mathbf{r}, t) [\hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t)]^* - \Psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) \right). \end{aligned}$$

El término que contiene a la energía potencial $V(\mathbf{r})$ se cancela al evaluar la anterior expresión, por lo que sólo nos quedan los términos asociados a las derivadas espaciales:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2M\|\Psi\|^2} \left(\Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla^2 \Psi^*(\mathbf{r}, t) \right).$$

Particularizando la relación $\nabla \cdot (\Psi \mathbf{G}) = (\nabla \Psi) \cdot \mathbf{G} + \Psi (\nabla \cdot \mathbf{G})$ (véase el **Apéndice A**) al caso $\mathbf{G} = \nabla \Psi$, tenemos tras simplificar que

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \left[\frac{i\hbar}{2M\|\Psi\|^2} \left(\Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi^*(\mathbf{r}, t) - \Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) \right) \right].$$

La cantidad vectorial

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{i\hbar}{2M\|\Psi\|^2} \left(\Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi^*(\mathbf{r}, t) - \Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) \right)$$

(6.26)

se llama ***densidad de corriente de probabilidad*** de la partícula. La relación entre ésta y la densidad de probabilidad es, tal y como acabamos de ver,

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t),$$

(6.27)

expresión conocida como ***ecuación de continuidad***. El paralelismo formal con la ecuación de continuidad de la hidrodinámica o del electromagnetismo clásico es evidente, sólo que aquí $\rho(\mathbf{r}, t)$ no es, salvo constante multiplicativa, una densidad

real sino una probabilidad de ocurrencia relativa a la detección de la partícula en un punto \mathbf{r} dado.

§ 2. Consideremos ahora una región del espacio \mathcal{V} limitada por una superficie \mathcal{S} . La variación respecto del tiempo de la probabilidad de encontrar a la partícula en dicha región es:

$$\frac{d}{dt} \Pr_{|\Psi(t)\rangle} (\mathbf{r} \in \mathcal{V}) = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} \rho(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} = \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} d^3\mathbf{r}.$$

Si ahora aplicamos la ecuación de continuidad y el teorema de Gauss (véase, de nuevo, el **Apéndice A**), obtenemos

$$\int_{\mathcal{V}} \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} d^3\mathbf{r} = - \int_{\mathcal{V}} \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} = - \int_{\mathcal{S}} \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \cdot d\mathbf{S}. \quad (6.28)$$

Por tanto, *la variación respecto del tiempo de la probabilidad de detectar a una partícula en una región \mathcal{V} es igual al flujo de la densidad de corriente de probabilidad a través de la superficie \mathcal{S} que limita a dicha región*. Recuerde que el sentido positivo a efectos del cálculo de flujo de un campo vectorial es siempre hacia afuera de la región \mathcal{V} .

Si la partícula se moviese en una dimensión espacial, la corriente de probabilidad y la ecuación de continuidad serían

$$J_x(x, t) = \frac{i\hbar}{2M\|\Psi\|^2} \left[\Psi(x, t) \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} - \Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right] \quad (6.29)$$

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = - \frac{\partial J_x(x, t)}{\partial x} \quad (6.30)$$

y la integración de esta última daría inmediatamente que

$$\frac{d}{dt} \Pr_{|\Psi(t)\rangle} (x \in [a, b]) = \frac{d}{dt} \int_a^b \rho(x, t) dx = J_x(a) - J_x(b). \quad (6.31)$$

§ 3. Al igual que existe una estrecha relación entre $\rho(\mathbf{r}, t)$ y el valor medio de la posición, el valor medio del momento lineal se puede obtener directamente a partir de $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$. En efecto, tal y como vimos en el capítulo anterior,

$$\langle \mathbf{p} \rangle_t = - \frac{i\hbar}{\|\Psi\|^2} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r}$$

con $\langle \mathbf{p} \rangle_t = \langle p_x \rangle_t \mathbf{u}_x + \langle p_y \rangle_t \mathbf{u}_y + \langle p_z \rangle_t \mathbf{u}_z$. Dado que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ tiende a cero cuando $r \rightarrow \infty$, integrando por partes queda

$$\langle \mathbf{p} \rangle_t = \frac{i\hbar}{\|\Psi\|^2} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi^*(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r}.$$

Entonces, si sumamos miembro a miembro las dos igualdades anteriores, llegamos al importante resultado

$$\langle \mathbf{p} \rangle_t = M \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} ; \quad \langle \mathbf{r} \rangle_t = \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{r} \rho(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} \quad (6.32)$$

donde, por completitud, hemos incluido también la expresión para $\langle \mathbf{r} \rangle_t$. Veamos un sencillo ejemplo ilustrativo.

EJEMPLO 6.c. Corriente de probabilidad de una onda modulada

En un instante dado de tiempo, la función de onda normalizada de una partícula de masa M es $\Psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})$, donde $\varphi(\mathbf{r})$ es una función real. Evalúe la densidad de corriente de probabilidad y el valor esperado del su momento lineal.

Solución:

Como

$$\nabla \Psi(\mathbf{r}) = \nabla \{ \varphi(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} \} = e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} \nabla \varphi(\mathbf{r}) + \varphi(\mathbf{r}) \nabla e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} = e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} \nabla \varphi(\mathbf{r}) + i\mathbf{k}_0 \varphi(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}}$$

y por hipótesis $\varphi(\mathbf{r}) = \varphi^*(\mathbf{r})$ y $\|\Psi\|^2 = 1$, inmediatamente tenemos que

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \frac{i\hbar}{2M} (\Psi(\mathbf{r}) \nabla \Psi^*(\mathbf{r}) - \Psi^*(\mathbf{r}) \nabla \Psi(\mathbf{r})) = \frac{\hbar}{M} |\Psi(\mathbf{r})|^2 \mathbf{k}_0 = \frac{\hbar \mathbf{k}_0}{M} \rho(\mathbf{r}).$$

Aplicando (6.32)

$$\langle \mathbf{p} \rangle = M \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{J}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \hbar \mathbf{k}_0 \int_{\mathbb{R}^3} |\Psi(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r} = \hbar \mathbf{k}_0$$

(observe que si hacemos $\mathbf{k}_0 = \mathbf{0}$ entonces la función de onda $\Psi(\mathbf{r})$ es real, caso en el que siempre se tiene que $\langle \mathbf{p} \rangle = \mathbf{0}$).

§ 4. Si derivamos respecto del tiempo el valor medio de la posición $\langle \mathbf{r} \rangle_t$, usamos la ecuación de continuidad y procedemos a una integración por partes, no es complicado ver que

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{r} \rangle_t = \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} = \frac{1}{M} \langle \mathbf{p} \rangle_t, \quad (6.33)$$

relación que generaliza el resultado (6.9) a una partícula sometida a una fuerza conservativa $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r})$.

A su vez, si derivamos el valor medio del momento $\langle \mathbf{p} \rangle_t$ respecto del tiempo, expresamos la variación temporal de $\Psi(\mathbf{r}, t)$ en términos del operador hamiltoniano, integramos por partes y simplificamos, se llega a que⁸

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{p} \rangle_t = \frac{1}{M} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\partial \mathbf{J}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} d^3 \mathbf{r} = \int_{\mathbb{R}^3} [-\nabla V(\mathbf{r})] \rho(\mathbf{r}, t) d^3 \mathbf{r} = \langle \mathbf{F}(\mathbf{r}) \rangle_t. \quad (6.34)$$

Estas dos relaciones, (6.33) y (6.34), conocidas como **teoremas de Ehrenfest**, son así formalmente iguales a las leyes de Newton pero aplicadas a los *valores medios* cuánticos. Sin embargo, excepto si $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ depende linealmente de la posición, no se va a cumplir que $\langle \mathbf{F}(\mathbf{r}) \rangle_t \neq \mathbf{F}(\langle \mathbf{r} \rangle_t)$. Ello implica que las *soluciones* de las ecuaciones de Ehrenfest y de las de Newton no coincidirán salvo en los casos en los que la fuerza sea nula, uniforme o armónica.

6.5. ESTADOS ESTACIONARIOS. AUTOENERGÍAS

§ 1. Una solución particularmente interesante de la ecuación de Schrödinger es aquella en la que la función de onda es monocromática con frecuencia ω , es decir, $\Phi(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)$. Al estar la dependencia temporal desacoplada de la espacial, el estado cuántico correspondiente $|\Phi(t)\rangle$ es **estacionario** en el sentido de que físicamente no evoluciona en el tiempo.

Como se recordará, uno de los argumentos de plausibilidad que nos condujo a la ecuación de Schrödinger fue exigir que el valor medio de la energía en un estado de ese tipo sea $\langle H \rangle = \hbar\omega$. En concreto, para una función de onda monocromática $\Phi(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)$ se tiene que

$$\hat{H}\Phi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hbar\omega\Phi(\mathbf{r}, t) \Rightarrow \hat{H}\Phi(\mathbf{r}) = \hbar\omega\Phi(\mathbf{r}) \quad (6.35)$$

y que el valor medio del hamiltoniano es $\langle H \rangle = \hbar\omega$, como resultado de la cancelación de los factores $\exp(\pm i\omega t)$. Si hacemos la identificación $E = \hbar\omega$, tenemos entonces que la función de onda de un estado estacionario con energía E

⁸ Hemos omitido los detalles puesto que dentro de poco veremos una manera mucho más sencilla de llegar a estos resultados.

es

$$\boxed{\Phi(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}) \exp(-iEt/\hbar) \quad \text{cumpliendo que} \\ \hat{H}\Phi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Phi(\mathbf{r}) = E\Phi(\mathbf{r}).} \quad (6.36)$$

La ecuación $\hat{H}\Phi(\mathbf{r}) = E\Phi(\mathbf{r})$ se conoce como *ecuación de Schrödinger independiente del tiempo* y también como *ecuación de Schrödinger estacionaria*.

Desde la perspectiva del álgebra lineal, $\hat{H}\Phi(\mathbf{r}) = E\Phi(\mathbf{r})$ es la ecuación de autovalores correspondiente al operador autoadjunto \hat{H} , por lo que de satisfacerse es lógico llamar a $\Phi(\mathbf{r})$ *autofunción de la energía* siendo E la *autoenergía* (o *autovalor de la energía*) correspondiente.

En un estado estacionario la energía está completamente definida ($\Delta H = 0$) o, equivalentemente, *los estados estacionarios son los autoestados de la energía*. En efecto, tal y como vimos en el capítulo anterior

$$\Delta H = \frac{1}{\|\Phi\|} \left[\int_{\mathbb{R}^3} \left| (\hat{H} - \langle \hat{H} \rangle) \Phi(\mathbf{r}, t) \right|^2 d^3\mathbf{r} \right]^{1/2} = 0.$$

Por tanto, la condición necesaria y suficiente para que un estado sea estacionario (ecuación 6.35) es que la incertidumbre de su energía sea cero. Este es uno de los resultados más importantes de la teoría cuántica.

En un estado estacionario *todas* las probabilidades de ocurrencia son constantes en el tiempo ya que la evolución temporal no afecta a la dependencia espacial de la función de onda. El estado estacionario es así un concepto puramente cuántico completamente diferente a nuestra concepción clásica de *partícula estática*. Por ejemplo, el valor medio de la energía cinética de una partícula en un estado estacionario no es nulo, aunque el valor medio del momento lineal sí lo es: de acuerdo con el teorema de Ehrenfest $\langle \mathbf{p} \rangle_t = M d\langle \mathbf{r} \rangle_t / dt$ y como $\langle \mathbf{r} \rangle_t$ es constante en la evolución necesariamente $\langle \mathbf{p} \rangle_t = \mathbf{0}$. A lo sumo, el equivalente clásico más cercano sería el de *régimen estacionario*.

Veamos un primer ejemplo aparentemente académico pero de gran importancia.

EJEMPLO 6.d. (!) La cuantización de la energía

Una partícula de masa M se mueve libremente en una dimensión pero estrictamente confinada en un segmento de longitud L . Obtenga las funciones de onda normalizadas y las autoenergías de todos los estados estacionarios del sistema.

Solución:

Supongamos que la partícula se puede mover libremente entre los puntos $x = 0$ y $x = L$. De acuerdo con el enunciado es imposible hallar a la partícula fuera de este intervalo, lo que implica que $\Phi(x, t) = 0$ si $x \notin (0, L)$. Por otra parte ya hemos comentado que el requerimiento mínimo que ha de satisfacer toda función de onda físicamente razonable es que sea continua. Esto implica las siguientes condiciones de contorno

$$\Phi(x, t) = 0 \quad \text{si } x = 0 \text{ o } x = L.$$

Como no hay fuerza alguna que actúe sobre la partícula si está dentro del intervalo $(0, L)$, la ecuación de Schrödinger correspondiente es

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \Phi(x, t)}{\partial x^2} \quad \text{con } x \in (0, L),$$

con las mencionadas condiciones de contorno.

Para un estado estacionario de energía E cuya función de onda es $\Phi_E(x, t) = \Phi_E(x) \exp(-iEt/\hbar)$ la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 \Phi_E(x)}{dx^2} = E \Phi_E(x) \quad \text{con } \Phi_E(0) = \Phi_E(L) = 0.$$

La solución general de esta ecuación, sin imponer de momento el cumplimiento de las condiciones de contorno, es

$$\Phi_E(x) = \mathcal{A} \sin(kx) + \mathcal{B} \cos(kx) \quad \text{con } k \equiv \sqrt{2ME/\hbar^2} \geq 0.$$

Dado que $\Phi_E(0) = 0$, necesariamente $\mathcal{B} = 0$, por lo que

$$\Phi_E(x) = \mathcal{A} \sin(kx).$$

Impongamos ahora la segunda condición de contorno, $\Phi_E(L) = 0$, que implica

$$\sin(kL) = 0 \Rightarrow k = 0, \frac{\pi}{L}, \frac{2\pi}{L}, \dots$$

Sin embargo $k = 0$ no es admisible ya que lleva a la anulación de toda la función de onda. En definitiva los valores “permitidos” de k son

$$k = \frac{n\pi}{L} \quad \text{con } n = 1, 2, 3, \dots$$

y las posibles autoenergías (que etiquetamos con un subíndice n) son

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ML^2} n^2 \quad \text{con } n = 1, 2, 3, \dots$$

(6.37)

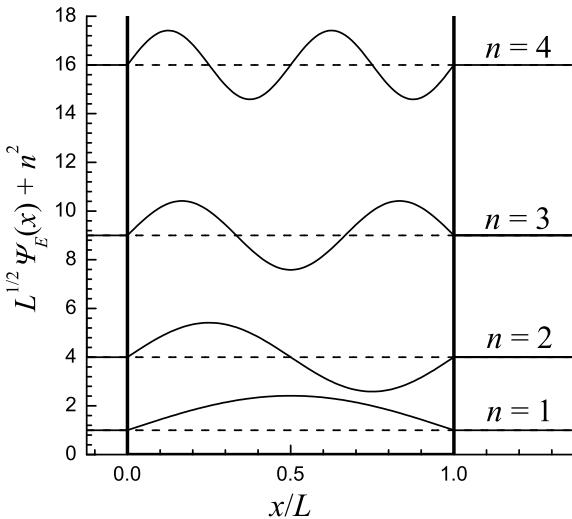


Figura 6-3. Primeras cuatro autofunciones de la energía para una partícula que se mueve libremente en el intervalo $0 \leq x \leq L$. Las autofunciones están desplazadas verticalmente para facilitar su visión

Como se ve, las autoenergías están **cuantizadas**, al poder tomar únicamente valores discretos.

Las autofunciones correspondientes serán $\Phi_{E_n}(x) = \mathcal{A} \sin(n\pi x/L)$ y la constante arbitraria \mathcal{A} puede evaluarse normalizando la autofunción:

$$1 = \langle \Phi_{E_n} | \Phi_{E_n} \rangle = \int_0^L |\Phi_{E_n}(x)|^2 dx = |\mathcal{A}|^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = |\mathcal{A}|^2 \frac{L}{2}$$

y salvo constante multiplicativa de módulo unidad completamente irrelevante

$$\Phi_{E_n}(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-iE_n t/\hbar} \quad \text{con } n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.38)$$

Las primeras de estas funciones están representadas en la **FIG. 6-3**. Fíjese que las longitudes de onda de estas ondas estacionarias son

$$\lambda_n = \frac{2\pi}{k_n} = \frac{2L}{n} \Rightarrow \frac{\lambda_n}{2} n = L,$$

por lo que la anchura L del intervalo en el que está confinada la partícula es igual a un múltiplo entero de las posibles semilongitudes de onda correspondientes a estados estacionarios. Las similitudes con los modos normales de vibración de una cuerda vibrante con extremos fijos son así más que evidentes.

§ 2. A pesar de lo que se ha expuesto en el ejemplo anterior, en multitud de sistemas físicos no hay estados estacionarios, lo que se reflejará en la inexistencia de autofunciones *normalizables* de la energía. El caso más claro es el de la partícula libre, para la que

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \Phi_E(\mathbf{r}) = E\Phi_E(\mathbf{r}) \quad \text{con } E \geq 0 \quad (6.39)$$

(si $V(\mathbf{r}) = 0$ la energía de la partícula no puede ser negativa). Esta ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tiene como soluciones a las funciones *no normalizables* tipo de De Broglie

$$\theta_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}/\hbar)}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \quad \text{con } |\mathbf{q}| = \sqrt{2ME}. \quad (6.40)$$

Ahora bien, ya hemos visto que las ondas de De Broglie representan estados límite ideales: si en un instante t_0 la dependencia espacial de la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t_0)$ de una partícula libre en un estado realizable es similar a (6.40) en una región muy amplia del sistema, siendo prácticamente nula fuera de la misma, tendremos que “casi” satisface la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (6.39). El estado cuántico de la partícula será así “muy parecido” a uno estacionario pudiendo calificarse de *cuasiestacionario*. Un caso ilustrativo sería el paquete gaussiano estudiado en el **ejemplo 6.a** en el límite $a \gg 0$.

Recordando lo visto en el **capítulo 5** al analizar el espectro continuo de un operador, una solución no normalizable $\Lambda_E(\mathbf{r})$ de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo describirá la dependencia espacial de la función de onda de un *cuasi-autoestado* de la energía en el límite $\Delta H \rightarrow 0$ si $|\Lambda_E(\mathbf{r})|$ se mantiene acotada cuando $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$.⁹

EJEMPLO 6.e. (*) *Partícula sometida a una fuerza constante I*

Consideremos una partícula de masa M que se mueve en una dimensión espacial sometida a una fuerza constante F_x . Obtenga las autofunciones de la energía.

Solución:

La energía potencial es $V(x) = -F_x x$, y la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} - F_x x \right) \Lambda_E(x) = E\Lambda_E(x). \quad (6.41)$$

⁹ La matización es importante puesto que pueden existir soluciones no normalizables cuyo módulo crezca indefinidamente a medida que $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$. Y estas autofunciones no tienen ningún sentido físico.

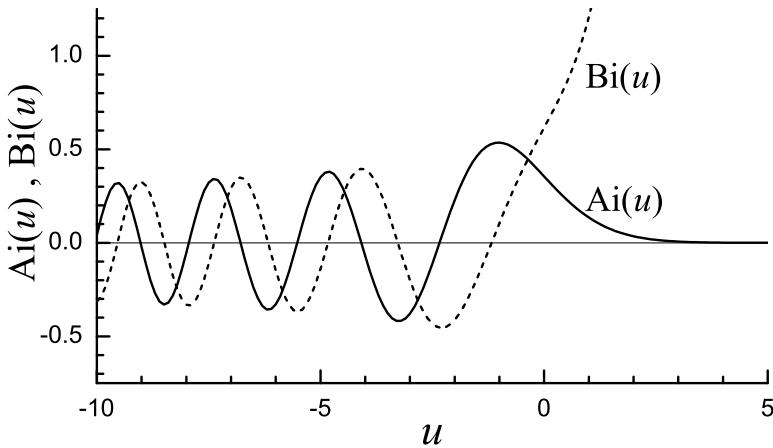


Figura 6-4. Funciones de Airy. La amplitud de sus oscilaciones y la distancia entre máximos decrecen a medida que $x \rightarrow -\infty$.

Definamos la longitud x_0 usando la igualdad $\hbar^2/(2Mx_0^3) = -F_x$. La ecuación (6.41) se puede reescribir como

$$\left[-x_0^2 \frac{d^2}{dx^2} + \frac{x}{x_0} - \frac{\hbar^2 E}{2M} \right] \Lambda_E(x) = 0.$$

Esto sugiere definir la variable adimensional

$$u = \frac{x - x_r}{x_0} \quad \text{con} \quad x_r = \frac{2Mx_0^3 E}{\hbar^2} = -\frac{E}{F_x}$$

(observe que x_r es el punto de retroceso clásico de la partícula con energía E dado por $V(x_r) = E$) y hacer el cambio de variable $x \rightarrow u$.

De esta manera, la ecuación de Schrödinger (6.41) es completamente equivalente a

$$\left(-\frac{d^2}{du^2} + u \right) \phi(u) = 0 \quad \text{con} \quad \Lambda_E(x) = \phi\left(\frac{x - x_r}{x_0}\right) \quad , \quad x_r = -\frac{E}{F_x}. \quad (6.42)$$

Todas las autofunciones son pues idénticas salvo traslación. Esto es lógico debido a la simetría del problema: en términos clásicos la única diferencia entre la dinámica de una partícula con energía E y otra con energía E' es la situación del punto clásico de retroceso; en términos cuánticos las autofunciones correspondientes están desplazadas entre sí.

La solución general de la ecuación diferencial (6.42) es $\phi(u) = \mathcal{A}Ai(u) + \mathcal{B}Bi(u)$, donde \mathcal{A}, \mathcal{B} son constantes arbitrarias y $Ai(u)$, $Bi(u)$ las llamadas funciones de Airy, no pertenecientes a $L^2(\mathbb{R})$ y que representamos en la FIG. 6-4. Como puede observarse, $Bi(u)$ diverge cuando $u \rightarrow \infty$ y no puede contribuir a la autofunción $\Lambda_E(x)$ ya que

entonces su módulo crecería indefinidamente. No queda más remedio que $\mathcal{B} = 0$, y las autofunciones con energía E son

$$\Lambda_E(x) = \mathcal{A} \text{Ai}\left(\frac{x - x_r}{x_0}\right) \quad \text{con} \quad \begin{cases} x_r = -E/F_x , \quad E \in \mathbb{R} \\ x_0 = -\left(\frac{\hbar^2}{2MF_x}\right)^{1/3} \end{cases} \quad (6.43)$$

siendo \mathcal{A} una constante multiplicativa arbitraria. Fíjese que ahora no hay ninguna cuantización de la energía, pudiendo ésta tomar cualquier valor real.

§ 3. En resumen, tenemos dos tipos de soluciones con interés físico de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo $\hat{H}\Psi_E(\mathbf{r}) = E\Psi_E(\mathbf{r})$:

- i) Autofunciones $\Phi_E(\mathbf{r})$ que son normalizables y que definen *genuinos* estados cuánticos estacionarios, representados por la función de onda $\Phi_E(\mathbf{r}) \exp(-iEt/\hbar)$, y en los cuales $\Delta H = 0$. Las autoenergías E pertenecen al espectro puntual de \hat{H} y, por tanto, están cuantizadas. A estos estados estacionarios se les denomina *estados ligados*.
- ii) Autofunciones $\Lambda_E(\mathbf{r})$ que no pertenecen al espacio de funciones $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ pero que proporcionan la dependencia espacial límite de la función de onda de un *estado cuasiestacionario* con valor medio de la energía igual a E cuando su incertidumbre tiende a cero. La autoenergía E forma parte del espectro continuo de \hat{H} . Por motivos que veremos en el **capítulo 10**, a estos estados estacionarios se les llama *estados de colisión*.

Ambos tipos de autofunciones de la energía deben satisfacer las relaciones de ortogonalidad que corresponden a todo operador autoadjunto:

$$\left. \begin{array}{l} \hat{H}\Phi_{E_1}(\mathbf{r}) = E_1\Phi_{E_1}(\mathbf{r}) \\ \hat{H}\Phi_{E_2}(\mathbf{r}) = E_2\Phi_{E_2}(\mathbf{r}) \end{array} \right\} \Rightarrow \langle \Phi_{E_1} | \Phi_{E_2} \rangle = 0 \quad \text{si } E_1 \neq E_2. \quad (6.44)$$

Finalmente, la terminología que introdujimos en el capítulo anterior se utiliza en la descripción de las propiedades espectrales de \hat{H} aunque con alguna pequeña variación:

- Los subespacios propios \mathcal{W}_E formados por autofunciones con una misma energía E se suelen llamar *niveles de energía*.

- El nivel con menor energía posible se denomina *nivel fundamental* mientras que los restantes son los *niveles excitados* (primero, segundo, etc.) usándose tales adjetivos también para los estados cuánticos correspondientes (o para el estado cuántico si la multiplicidad del nivel es uno) y para las autoenergías.

6.6. LA REPRESENTACIÓN EN ENERGÍAS

§ 1. La atención que hemos prestado a las autofunciones de la energía no ha sido gratuita. La interpretación probabilística de la energía se implementa de manera natural en una base de representación propia de la energía (véase su definición en la **sección 5.5**) pero, además, la evolución temporal de la función de onda será muy sencilla de obtener si trabajamos en esta representación.

Consideremos una partícula de masa M cuyo operador hamiltoniano es \hat{H} . A efectos de notación, llamaremos E a una autoenergía del espectro puntual σ_p de \hat{H} y $\{\Phi_{E,n}(\mathbf{r})\}$, con $n = 1, 2, 3, \dots, g_E$ (siendo g_E la multiplicidad de E), a un conjunto ortonormal de autofunciones de E que forman una base del subespacio correspondiente al nivel energético. Análogamente, si ε es autoenergía del espectro continuo σ_c con multiplicidad g_ε , designaremos por $\{\Lambda_{\varepsilon,j}(\mathbf{r})\}$ con $j = 1, 2, \dots, g_\varepsilon$ a una base ortogonal del correspondiente subespacio propio. Como ya sabemos, si cada autofunción $\Lambda_{\varepsilon,j}(\mathbf{r})$ está multiplicada por una constante de regularización adecuada se tiene que

$$\begin{aligned}\langle \Phi_{E_1,n_1} | \Phi_{E_2,n_2} \rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} \Phi_{E_1,n_1}^*(\mathbf{r}) \Phi_{E_2,n_2}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \delta_{E_1,E_2} \delta_{n_1,n_2} \\ \langle \Phi_{E,n} | \Lambda_{\varepsilon,j} \rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} \Phi_{E,n}^*(\mathbf{r}) \Lambda_{\varepsilon,j}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = 0 \\ \langle \Lambda_{\varepsilon_1,j_1} | \Lambda_{\varepsilon_2,j_2} \rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} \Lambda_{\varepsilon_1,j_1}^*(\mathbf{r}) \Lambda_{\varepsilon_2,j_2}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \delta(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \delta_{j_1,j_2},\end{aligned}\tag{6.45}$$

donde $\delta(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)$ es la delta de Dirac.

Para que estas autofunciones constituyan una base de representación de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^2)$, \hat{H} tiene que ser autoadjunto (algo que estamos dando por supuesto).

Entonces *toda* función $\Psi(\mathbf{r})$ de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ se puede escribir como

$$\boxed{\begin{aligned}\Psi(\mathbf{r}) &= \sum_{E \in \sigma_p} \sum_{n=1}^{g_E} c_{E,n} \Phi_{E,n}(\mathbf{r}) + \int_{\sigma_c} \sum_{j=1}^{g_\varepsilon} c_{\varepsilon,j} \Lambda_{\varepsilon,j}(\mathbf{r}) d\varepsilon \\ \text{con } c_{E,n} &= \langle \Phi_{E,n} | \Psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \Phi_{E,n}^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \\ \text{y } c_{\varepsilon,j} &= \langle \Lambda_{\varepsilon,j} | \Psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \Lambda_{\varepsilon,j}^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}\end{aligned}} \quad (6.46)$$

siendo $\{c_{E,n}\}, \{c_{\varepsilon,j}\}$ las coordenadas de $\Psi(\mathbf{r})$ en esta representación a la que, por motivos evidentes, llamaremos *en energías*.

Nótese que hemos escogido los *números cuánticos* en la forma general que vimos en el **capítulo 5**: la autoenergía y un *índice de degeneración* que toma valores desde 1 hasta la multiplicidad de dicha energía. Sin embargo, esta etiquetación no es la única posible. En muchos casos es conveniente identificar a las autofunciones de la base de representación mediante otros números cuánticos a partir de los cuales sea sencillo saber cuál es la autoenergía correspondiente. El ejemplo más claro es el de la partícula libre en tres dimensiones para la que una base de representación en energías es la dada por las funciones De Broglie

$$\theta_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \quad \text{con } E_{\mathbf{p}} = \frac{1}{2M} |\mathbf{p}|^2, \quad \langle \theta_{\mathbf{p}_1} | \theta_{\mathbf{p}_2} \rangle = \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)$$

siendo los números cuánticos los valores p_x, p_y, p_z .

§ 2. La solución general de la ecuación de Schrödinger se obtiene de manera prácticamente inmediata en la representación en energías. Ya que la dependencia temporal de las funciones de onda estacionarias es

$$\Phi_{E,n}(\mathbf{r}, t) = \Phi_{E,n}(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar} \quad ; \quad \Lambda_{\varepsilon,j}(\mathbf{r}, t) = \Lambda_{\varepsilon,j}(\mathbf{r}) e^{-i\varepsilon t/\hbar},$$

si la función $\Psi(\mathbf{r})$ dada en (6.46) es la función de onda de la partícula en $t = 0$, por la linealidad de la ecuación de Schrödinger la expresión para la evolución temporal de la función de onda es

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{E \in \sigma_p} \sum_{n=1}^{g_E} c_{E,n} \Phi_{E,n}(\mathbf{r}, t) + \int_{\sigma_c} \sum_{j=1}^{g_\varepsilon} c_{\varepsilon,j} \Lambda_{\varepsilon,j}(\mathbf{r}, t) d\varepsilon.$$

En consecuencia,

$$\boxed{\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{E \in \sigma_p} e^{-iEt/\hbar} \sum_{n=1}^{g_E} c_{E,n} \Phi_{E,n}(\mathbf{r}) + \int_{\sigma_c} e^{-i\varepsilon t/\hbar} \sum_{j=1}^{g_\varepsilon} c_{\varepsilon,j} \Lambda_{\varepsilon,j}(\mathbf{r}) d\varepsilon, \quad (6.47)}$$

donde $\{c_{E,n}\}, \{c_{\varepsilon,j}\}$ son las coordenadas de $\Psi(\mathbf{r}, 0)$. Hemos así obtenido en términos de la condición inicial $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ la evolución posterior de la función de onda. Alternativamente, $\Psi(\mathbf{r}, t)$ también puede escribirse en términos de coordenadas que dependen de t ,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{E \in \sigma_p} \sum_{n=1}^{g_E} c_{E,n}(t) \Phi_{E,n}(\mathbf{r}) + \int_{\sigma_c} \sum_{j=1}^{g_\varepsilon} c_{\varepsilon,j}(t) \Lambda_{\varepsilon,j}(\mathbf{r}) d\varepsilon, \quad (6.48)$$

$$\text{con } c_{E,n}(t) = \langle \Phi_{E,n} | \Psi(0) \rangle e^{-iEt/\hbar} \quad \text{y} \quad c_{\varepsilon,j}(t) = \langle \Lambda_{\varepsilon,j} | \Psi(0) \rangle e^{-i\varepsilon t/\hbar}.$$

Vemos que las coordenadas de una función de onda en una representación en energías son funciones complejas monocromáticas de frecuencia $\omega = E/\hbar$ ó $\omega = \varepsilon/\hbar$. Sus módulos, pues, son constantes.

§ 3. Consideremos ahora dos soluciones normalizables $\Psi(\mathbf{r}, t)$ y $\vartheta(\mathbf{r}, t)$ de la ecuación de Schrödinger. Su producto escalar puede evaluarse en términos de sus coordenadas respectivas $c_{E,n}(t)$ y $z_{E,n}(t)$:

$$\langle \vartheta(t) | \Psi(t) \rangle = \sum_{E \in \sigma_p} \sum_{n=1}^{g_E} z_{E,n}^*(t) c_{E,n}(t) + \int_{\sigma_c} \sum_{j=1}^{g_\varepsilon} z_{\varepsilon,j}^*(t) c_{\varepsilon,j}(t) d\varepsilon,$$

$$\text{y como } |\exp(-iEt/\hbar)|^2 = |\exp(-i\varepsilon t/\hbar)|^2 = 1,$$

$$\langle \vartheta(t) | \Psi(t) \rangle = \sum_{E \in \sigma_p} \sum_{n=1}^{g_E} z_{E,n}^* c_{E,n} + \int_{\sigma_c} \sum_{j=1}^{g_\varepsilon} z_{\varepsilon,j}^* c_{\varepsilon,j} d\varepsilon = \langle \vartheta(0) | \Psi(0) \rangle. \quad (6.49)$$

Este resultado confirma el carácter unitario de la evolución determinista. Haciendo $\vartheta = \Psi$, la norma al cuadrado de cualquier función de onda es:

$$\|\Psi(t)\|^2 = \|\Psi\|^2 = \sum_{E \in \sigma_p} \sum_{n=1}^{g_E} |c_{E,n}|^2 + \int_{\sigma_c} \sum_{j=1}^{g_\varepsilon} |c_{\varepsilon,j}|^2 d\varepsilon. \quad (6.50)$$

§ 4. Puesto que los módulos de las coordenadas de $\Psi(\mathbf{r}, t)$ no cambian en el tiempo, *las probabilidades de ocurrencia relativas a una medida de la energía son constantes en el tiempo*. Específicamente, las probabilidades básicas son

$$\boxed{\begin{aligned}\Pr_H(E) &= \frac{1}{\|\Psi\|^2} \sum_{n=1}^{g_E} |c_{E,n}|^2 = \frac{1}{\|\Psi\|^2} \sum_{n=1}^{g_E} |\langle \Phi_{E,n} | \Psi \rangle|^2 \\ \rho_H(\varepsilon) d\varepsilon &= \frac{d\varepsilon}{\|\Psi\|^2} \sum_{j=1}^{g_\varepsilon} |c_{\varepsilon,j}|^2 = \frac{d\varepsilon}{\|\Psi\|^2} \sum_{j=1}^{g_\varepsilon} |\langle \Lambda_{\varepsilon,j} | \Psi \rangle|^2\end{aligned}} \quad (6.51)$$

donde hemos excluido la variable t al ser irrelevante.

El valor medio de la energía es entonces

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \Psi | \hat{H} \Psi \rangle}{\|\Psi\|^2} = \sum_{E \in \sigma_p} E \Pr_H(E) + \int_{\sigma_c} \varepsilon \rho_H(\varepsilon) d\varepsilon \quad (6.52)$$

y su incertidumbre está dada por

$$\begin{aligned}\Delta H &= \frac{\|(\hat{H} - \langle H \rangle)\Psi\|}{\|\Psi\|} = \left(\frac{\langle \Psi | \hat{H}^2 \Psi \rangle}{\|\Psi\|^2} - \langle H \rangle^2 \right)^{1/2} \\ &= \left[\sum_{E \in \sigma_p} (E - \langle H \rangle)^2 \Pr_H(E) + \int_{\sigma_c} (\varepsilon - \langle H \rangle)^2 \rho_H(\varepsilon) d\varepsilon \right]^{1/2}. \quad (6.53)\end{aligned}$$

En general, el valor medio de cualquier magnitud $g(H)$ será

$$\langle g(H) \rangle = \frac{\langle \Psi | g(\hat{H}) \Psi \rangle}{\|\Psi\|^2} = \sum_{E \in \sigma_p} g(E) \Pr_H(E) + \int_{\sigma_c} g(\varepsilon) \rho_H(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (6.54)$$

que es una aplicación directa de lo que se discutió en la **sección 5.5**.

EJEMPLO 6.f. Ilustración de la interpretación probabilística para H

En un instante de tiempo, $t_0 = 0$, la función de onda de una partícula que se mueve bajo la acción de una fuerza conservativa $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ es

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = \mathcal{A} [\phi_1(\mathbf{r}) + \phi_{2,a}(\mathbf{r}) + 2\phi_{2,b}(\mathbf{r})],$$

donde $\phi_1(\mathbf{r})$, $\phi_{2,a}(\mathbf{r})$ y $\phi_{2,b}(\mathbf{r})$ son tres autofunciones reales y ortonormales de la energía, con autovalores E_1 , E_2 y E_2 , respectivamente. Supóngase que $E_2 > E_1$.

- a) Obtenga la constante de normalización \mathcal{A} .
- b) Halle el valor esperado y la incertidumbre de la energía de la partícula.
- c) Analice la evolución temporal del valor medio del momento lineal.

Solución:

- a) Como las tres autofunciones forman un conjunto ortonormal, usando (6.50)

$$1 = \|\Psi\|^2 = \langle \Psi | \Psi \rangle = |\mathcal{A}|^2 [|1|^2 + |1|^2 + |2|^2] = 6|\mathcal{A}|^2 \Rightarrow |\mathcal{A}| = \frac{1}{\sqrt{6}}.$$

- b) Aplicando los resultados del epígrafe §4,

$$\langle H \rangle = \frac{1}{6}E_1 + \frac{1}{6}E_2 + \frac{4}{6}E_2 = \frac{E_1 + 5E_2}{6}$$

$$\langle H^2 \rangle = \frac{1}{6}E_1^2 + \frac{1}{6}E_2^2 + \frac{4}{6}E_2^2 = \frac{E_1^2 + 5E_2^2}{6}$$

$$\Delta H = (\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2)^{1/2} = \frac{\sqrt{5}}{6}(E_2 - E_1).$$

- c) La evolución temporal de la función de onda es

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{6}} \left[\phi_1(\mathbf{r}) e^{-iE_1 t/\hbar} + (\phi_{2,a}(\mathbf{r}) + 2\phi_{2,b}(\mathbf{r})) e^{-iE_2 t/\hbar} \right],$$

que también puede escribirse como

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{e^{-iE_1 t/\hbar}}{\sqrt{6}} \left[\phi_1(\mathbf{r}) + \sqrt{5}\phi_2(\mathbf{r}) e^{-i\Omega t} \right] \quad \text{con} \quad \begin{cases} \Omega = (E_2 - E_1)/\hbar \\ \phi_2(\mathbf{r}) = \frac{\phi_{2,a}(\mathbf{r}) + 2\phi_{2,b}(\mathbf{r})}{\sqrt{5}} \end{cases}$$

El valor medio del momento lineal es

$$\langle \mathbf{p} \rangle_t = -i\hbar \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r}$$

y sustituyendo y operando (las autofunciones son reales)

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} \rangle_t &= \frac{-i\hbar}{6} \int_{\mathbb{R}} \phi_1(\mathbf{r}) \nabla \phi_1(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} + \frac{-5i\hbar}{6} \int_{\mathbb{R}} \phi_2(\mathbf{r}) \nabla \phi_2(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} + \\ &+ \frac{-\sqrt{5}i\hbar}{6} \left[e^{i\Omega t} \int_{\mathbb{R}^3} \phi_1(\mathbf{r}) \nabla \phi_2(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} + e^{-i\Omega t} \int_{\mathbb{R}^3} \phi_2(\mathbf{r}) \nabla \phi_1(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \right]. \end{aligned}$$

Las dos primeras integrales son cero (basta integrar por partes para verlo). A su vez, si integramos por partes en la última integral

$$\langle \mathbf{p} \rangle_t = \frac{\sqrt{5}\hbar}{6} \frac{e^{i\Omega t} - e^{-i\Omega t}}{i} \int_{\mathbb{R}^3} \phi_1(\mathbf{r}) \nabla \phi_2(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \left[\frac{\sqrt{5}\hbar}{3} \int_{\mathbb{R}^3} \phi_1(\mathbf{r}) \nabla \phi_2(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \right] \sin(\Omega t)$$

e identificando el término entre paréntesis cuadrados como \mathbf{p}_A , tenemos que $\langle \mathbf{p} \rangle_t = \mathbf{p}_A \sin(\Omega t)$.

Podemos concluir que para toda función de onda que es combinación lineal de autofunciones de dos niveles, los valores medios oscilan armónicamente en el tiempo con frecuencia $\Omega = (E_2 - E_1)/\hbar$ independientemente de cuál sea la naturaleza específica de la fuerza a la que está sometida la partícula. Este resultando en absoluto viola los teoremas de Ehrenfest, ya que según estos

$$\frac{d\langle \mathbf{r} \rangle_t}{dt} = \frac{\langle \mathbf{p} \rangle_t}{M} \Rightarrow \langle \mathbf{r} \rangle_t = \langle \mathbf{r} \rangle_0 - \frac{\mathbf{p}_A [\cos(\Omega t) - 1]}{M\Omega} ; \quad \langle \mathbf{F}(\mathbf{r}) \rangle_t = \frac{d\langle \mathbf{p} \rangle_t}{dt} = \mathbf{p}_A \Omega \cos(\Omega t)$$

y a partir de estas expresiones no se puede inferir nada respecto de $\mathbf{F}(\mathbf{r})$.

EJEMPLO 6.g. Evolución temporal de una partícula confinada

Consideremos una partícula de masa M que se mueve libremente en una dimensión, pero confinada en el intervalo $[0, L]$. En el instante $t = 0$ su función de onda normalizada es

$$\Psi(x, 0) = \frac{2\sqrt{3}}{L^{3/2}} \times \begin{cases} x & \text{si } x \in (0, L/2) \\ (L-x) & \text{si } x \in (L/2, L) \end{cases}$$

cuyo perfil, como es inmediato comprobar, es triangular.

- a) Obtenga el valor medio de la energía de la partícula.
- b) Exprese la función de onda $\Psi(x, t)$ en un instante cualquiera t .
- c) Al medir la energía de la partícula ¿qué valores pueden obtenerse y con qué probabilidad? Compruebe que la suma de las probabilidades de ocurrencia es igual a la unidad.
- d) Usando el resultado del apartado anterior, evalúe de nuevo $\langle H \rangle$ y compruebe que coincide con el obtenido en el apartado a).

Ayudas: $\sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{(2s+1)^4} = \frac{1}{96}\pi^4$; $\sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{(2s+1)^2} = \frac{1}{8}\pi^2$

Solución:

- a) Aunque académico, este ejemplo es bastante ilustrativo en lo referente a la evolución temporal de una función de onda. El operador hamiltoniano es

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

y nos restringimos a funciones que sólo son no nulas en el intervalo $[0, L]$ siendo cero en los extremos. El valor esperado de la energía es

$$\langle H \rangle = \int_0^L \Psi^*(x, 0) \hat{H} \Psi(x, 0) dx = -\frac{\hbar^2}{2M} \int_0^L \Psi^*(x, 0) \frac{\partial^2 \Psi(x, 0)}{\partial x^2} dx.$$

La primera derivada de $\Psi(x, 0)$ es discontinua, pero si hacemos una integral por partes y usamos que $\Psi(0, 0) = \Psi(L, 0) = 0$

$$\langle H \rangle = +\frac{\hbar^2}{2M} \int_0^L \left| \frac{\partial \Psi(x, 0)}{\partial x} \right|^2 dx = \frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{2\sqrt{3}}{L^{3/2}} \right)^2 L = \frac{6\hbar^2}{ML^2}$$

(también podríamos haber efectuado la segunda derivada de $\Psi(x, 0)$ en el sentido de distribuciones discutido en el **apéndice B**, obteniendo el mismo resultado).

Nota: Observe que $\Psi(x, 0)$ no es una función de onda 100% admisible al exhibir una discontinuidad en su derivada. Esto lleva a que $\Psi(x, 0)$ no pertenezca al dominio de \hat{H} y a que ΔH sea infinita (compruébelo). A pesar de ello, podremos resolver formalmente la ecuación de Schrödinger para esta condición inicial.

b) Las autofunciones y autoenergías del sistema son¹⁰

$$\Phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} ; \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ML^2} n^2 \equiv \hbar\Omega n^2 \quad \text{con } n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

y para aplicar (6.47) necesitamos evaluar $\langle \Phi_n | \Psi(0) \rangle$ (fíjese que n es un número cuántico asociado al nivel, no a la multiplicidad que es uno para todas las autoenergías). Operando y teniendo en cuenta que n es un número natural

$$\begin{aligned} c_n \equiv \langle \Phi_n | \Psi(0) \rangle &= \frac{2\sqrt{6}}{L^2} \left[\int_0^{L/2} x \sin \left(\frac{n\pi x}{L} \right) dx + \int_{L/2}^L (L-x) \sin \left(\frac{n\pi x}{L} \right) dx \right] = \\ &= 2\sqrt{6} \left[\int_0^{1/2} u \sin(n\pi u) du + \int_{1/2}^1 (1-u) \sin(n\pi u) dx \right] = 2\sqrt{6} \frac{2 \sin(n\pi/2)}{n^2 \pi^2}. \end{aligned}$$

Usando que $\sin(n\pi/2)$ es igual a cero si n es par y a $(-1)^{(n-1)/2}$ si n es impar,

$$\Psi(x, t) = \frac{8\sqrt{3}}{\pi^2 \sqrt{L}} \sum_n^{\text{impar}} \frac{(-1)^{(n-1)/2} e^{-in^2 \Omega t}}{n^2} \sin \left(\frac{n\pi x}{L} \right) \quad \text{con } \Omega = \frac{\pi^2 \hbar}{2ML^2}.$$

En la **FIG. 6-5** representamos la evolución de la densidad de probabilidad $\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$ que resulta ser temporalmente periódica con un tiempo de oscilación $\tau = ML^2/(2\pi\hbar)$. Puede apreciar cómo $\rho(x, t)$ sigue ciclos de expansión-contracción.

c) Para cualquier instante de tiempo, de acuerdo con (6.51):

$$\Pr_H(E_n) = |\langle \Phi_n | \Psi(t) \rangle|^2 = |\langle \Phi_n | \Psi(0) \rangle|^2 = \begin{cases} \frac{96}{\pi^4} \frac{1}{n^4} & \text{si } n = 1, 3, 5, \dots \\ 0 & \text{si } n = 2, 4, 6, \dots \end{cases}$$

¹⁰ Es evidente que las autofunciones de la energía *no son* una base ortonormal de $L^2(\mathbb{R})$. Debido al confinamiento de la partícula el espacio de Hilbert de las funciones de onda es $L^2([0, L])$, esto es, el conjunto de las funciones de cuadrado integrable definidas en el intervalo $[0, L]$.

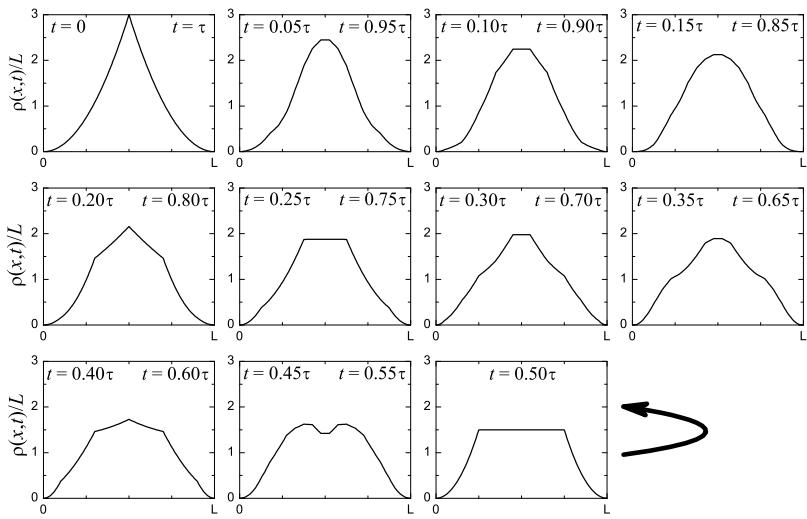


Figura 6-5. Densidad de probabilidad $\rho(x, t)$ correspondiente al **ejemplo 6.g**

y al medir la energía sólo se pueden obtener los valores E_1, E_3, E_5, \dots con probabilidad proporcional a $1/n^4$. Además, y como debe ser,

$$\sum_{n=1}^{\infty} \Pr_H(E_n) = \frac{96}{\pi^4} \sum_n^{\text{impar}} \frac{1}{n^4} = \frac{96}{\pi^4} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{(2s+1)^4} = 1.$$

d) El valor medio de la energía es

$$\langle H \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \Pr_H(E_n) = \frac{48\hbar^2}{\pi^2 M L^2} \sum_n^{\text{impar}} \frac{1}{n^2} = \frac{48\hbar^2}{\pi^2 M L^2} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{(2s+1)^2}$$

y usando la ayuda reproducimos el resultado ya calculado en el apartado a).

6.7. SISTEMAS SEPARABLES

§ 1. En mecánica clásica un sistema con N grados de libertad es *separable* si es posible desacoplar la evolución temporal de cada uno de ellos. Para una partícula bajo la acción de una fuerza conservativa, su dinámica será separable si la energía potencial puede escribirse como

$$V(\mathbf{r}) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z). \quad (6.55)$$

Cuánticamente, la separabilidad se refleja en que el operador hamiltoniano es

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z \quad \text{con} \quad \begin{cases} \hat{H}_x = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_x(x) \\ \hat{H}_y = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_y(y) \\ \hat{H}_z = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z) \end{cases} \quad (6.56)$$

esto es, el hamiltoniano es igual a la suma de operadores hamiltonianos “parciales” que dependen de una única coordenada.

Para un sistema separable, se cumple la siguiente propiedad

$$\text{Si } \Phi(\mathbf{r}) = \varphi_{E_x}(x) \xi_{E_y}(y) \eta_{E_z}(z) \text{ con} \quad \begin{cases} \hat{H}_x \varphi_{E_x}(x) = E_x \varphi_{E_x}(x) \\ \hat{H}_y \xi_{E_y}(y) = E_y \xi_{E_y}(y) \\ \hat{H}_z \eta_{E_z}(z) = E_z \eta_{E_z}(z) \end{cases}$$

entonces $\Phi(\mathbf{r})$ es autofunción de \hat{H} con autoenergía $E = E_x + E_y + E_z$.

(6.57)

En efecto, puesto que \hat{H}_x únicamente depende de la coordenada x ,

$$\hat{H}_x \Phi(\mathbf{r}) = \hat{H}_x (\varphi_{E_x}(x) \xi_{E_y}(y) \eta_{E_z}(z)) = (\hat{H}_x \varphi_{E_x}(x)) \xi_{E_y}(y) \eta_{E_z}(z).$$

Y ya que $\varphi_{E_x}(x)$ es autofunción de \hat{H}_x con autoenergía E_x ,

$$\hat{H}_x \Phi(\mathbf{r}) = (E_x \varphi_{E_x}(x)) \xi_{E_y}(y) \eta_{E_z}(z) = E_x \Phi(\mathbf{r}),$$

se tienen igualdades análogas para $\hat{H}_y \Phi(\mathbf{r})$ y $\hat{H}_z \Phi(\mathbf{r})$. Por tanto,

$$\hat{H} \Phi(\mathbf{r}) = \hat{H}_x \Phi(\mathbf{r}) + \hat{H}_y \Phi(\mathbf{r}) + \hat{H}_z \Phi(\mathbf{r}) = (E_x + E_y + E_z) \Phi(\mathbf{r}),$$

tal y como habíamos anticipado.

A su vez, puesto que cada hamiltoniano unidimensional define una base de representación de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, podemos aplicar directamente la teoría del producto tensorial de espacios de Hilbert que estudiamos en la **sección 4.7**. Si para

simplificar suponemos que los espectros de \hat{H}_x , \hat{H}_y y \hat{H}_z son enteramente puntuales y no degenerados, la base de representación en energías del sistema tridimensional estará formada por las autofunciones

$$\Phi_{E_x E_y, E_z}(\mathbf{r}) = \varphi_{E_x}(x) \xi_{E_y}(y) \eta_{E_z}(z), \text{ con } \begin{cases} E_x \in \sigma_p(H_x) \\ E_y \in \sigma_p(H_y) \\ E_z \in \sigma_p(H_z) \end{cases} \quad (6.58)$$

donde los números cuánticos son aquí las energías de cada subsistema. La autoenergía será, como hemos indicado anteriormente, la suma de estas tres autoenergías parciales. La generalización de este resultado al caso en que alguno de los hamiltonianos tenga un espectro con parte continua o niveles degenerados es inmediata.

§ 2. Veamos dos ejemplos ilustrativos que, pareciendo académicos, en absoluto lo son. Desde hace ya bastantes años, y mediante técnicas de crecimiento epitaxial, se pueden construir *heteroestructuras* de tamaño nanométrico dentro de las cuales la dinámica de un electrón queda razonablemente bien descrita por potenciales simples como los que vamos a analizar. El primer caso correspondería a un *punto cuántico* (una partícula confinada en una región finita del espacio) mientras que el segundo representa un *pozo cuántico bidimensional*, en el que la partícula está confinada en una región plana con espesor L finito.

EJEMPLO 6.h. Partícula confinada en un caja

El movimiento unidimensional libre de una partícula de masa M pero confinada al intervalo $[0, L]$ puede describirse mediante la energía potencial

$$V(x) = V_{\text{pci}}(L, x) \equiv \begin{cases} 0 & \text{si } x \in (0, L) \\ \infty & \text{si } x \notin (0, L) \end{cases}$$

ya que, independientemente de la energía de la partícula, los puntos clásicos de retroceso estarán siempre en $x = 0$ y $x = L$. Debido a la forma de su representación gráfica, esta energía potencial se denomina *pozo cuadrado infinito* [en una dimensión]. Consecuentemente, si la partícula se moviea libremente en tres dimensiones pero confinada en una caja de dimensiones $L_x \times L_y \times L_z$, el sistema sería separable puesto que la energía potencial es

$$V(\mathbf{r}) = V_{\text{pci}}(L_x, x) + V_{\text{pci}}(L_y, y) + V_{\text{pci}}(L_z, z)$$

Teniendo esto en cuenta:

- a) Obtenga las autofunciones de la energía de la partícula y sus autoenergías.
 b) Halle las multiplicidades de los cinco niveles energéticos con menor energía si $L_x = L_y = L_z$.

Solución:

a) Como el hamiltoniano es separable, cada autofunción es igual al producto de las autofunciones de cada uno de los tres hamiltonianos unidimensionales. Basta entonces recordar cómo son las autofunciones y autoenergías para el pozo cuadrado infinito unidimensional para obtener que

$$\Phi_{n_x, n_y, n_z}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sqrt{\frac{2}{L_y}} \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \sqrt{\frac{2}{L_z}} \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L_z}\right),$$

donde los tres números cuánticos n_x, n_y, n_z toman los valores 1, 2, 3, ... y, naturalmente, $\Psi_{n_x, n_y, n_z}(\mathbf{r})$ se anula fuera de la caja. La autoenergía correspondiente será la suma de las autoenergías:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ML_x^2} n_x^2 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ML_y^2} n_y^2 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ML_z^2} n_z^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2M} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right).$$

b) Para hallar los niveles energéticos tenemos que ordenar y agrupar las autoenergías. Si $L_x = L_y = L_z \equiv L$

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ML^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \equiv (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \varepsilon$$

y entonces

Nivel	Energía	números cuánticos	multiplicidad
1	3ε	(1, 1, 1)	1
2	6ε	(2, 1, 1), (1, 2, 1), (1, 1, 2)	3
3	9ε	(2, 2, 1), (1, 2, 2), (2, 1, 2)	3
4	11ε	(3, 1, 1), (1, 3, 1), (1, 1, 3)	3
5	12ε	(2, 2, 2)	1

A efectos de nomenclatura, si el nivel 1 es el fundamental, 2 es el primer excitado, 3 es el segundo excitado y así sucesivamente.

Este ejemplo muestra cómo es posible “diseñar” niveles energéticos con multiplicidades dependientes de la geometría del sistema, ya que si cambia una de las longitudes L_i las nuevas multiplicidades serán muy diferentes. Esta propiedad resulta relevante en aplicaciones nanotecnológicas.

EJEMPLO 6.i. El pozo cuántico bidimensional

Una partícula de masa M se puede mover libremente sobre el plano XY pero estando estrictamente confinada en la región $z \in (-L/2, +L/2)$. Obtenga las energías de los estados cuasiestacionarios del sistema.

Solución:

La evolución correspondiente a las coordenadas x e y es libre, mientras que la asociada a la coordenada z es la de un pozo cuadrado infinito en una dimensión. Por tanto las autofunciones (no normalizables) del sistema son

$$\Lambda_{p_x, p_y, n}(\mathbf{r}) = \frac{\exp(ip_x x/\hbar)}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \frac{\exp(ip_y y/\hbar)}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \Phi_n(z) \quad \text{con} \quad \begin{cases} p_{x,y} \in \mathbb{R} \\ n = 1, 2, 3, \dots \end{cases}$$

siendo

$$\Phi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi(z + L/2)}{L}\right) \quad \text{con} \quad z \in \left(-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right)$$

la autofunción de un pozo cuadrado infinito unidimensional con paredes en $\pm L/2$ (observe que nos hemos limitado a hacer una traslación de la autofunción obtenida en el **ejemplo 6.h**). La autoenergía estará dada por

$$E_{p_x, p_y, n} = \frac{p_x^2}{2M} + \frac{p_y^2}{2M} + \frac{\pi^2\hbar^2}{2ML^2}n^2 = \frac{1}{2M} \left(|\mathbf{p}_{\parallel}|^2 + \frac{\hbar^2\pi^2}{L^2}n^2 \right) \equiv E_{\mathbf{p}_{\parallel}, n},$$

donde $\mathbf{p}_{\parallel} \equiv p_x \mathbf{u}_x + p_y \mathbf{u}_y$ es un momento lineal contenido en el plano XY .

Las autofunciones se han definido así mediante tres números cuánticos $\{p_x, p_y, n\}$ de manera que la relación de ortogonalidad entre ellas es

$$\langle \Lambda_{p_x, p_y, n} | \Lambda_{p'_x, p'_y, n'} \rangle = \delta(p_x - p'_x) \delta(p_y - p'_y) \delta_{n, n'} = \delta(\mathbf{p}_{\parallel} - \mathbf{p}'_{\parallel}) \delta_{n, n'}$$

Observe que esta asignación de números cuánticos es mucho más cómoda que la que se tendría a partir de las energías, ya que para una partícula libre en una dimensión cada nivel energético tiene multiplicidad dos.

Las autoenergías del sistema son entonces iguales a las de una partícula libre en dos dimensiones más un término asociado al confinamiento en las cercanías del plano XY . Cada valor de n determina lo que se denomina una subbanda de energías. Fíjese a su vez que si

$$E_{\mathbf{p}_{\parallel}, n} < E_{0,2} = \frac{2\hbar^2\pi^2}{ML^2}$$

entonces $n = 1$. Como resultado, para energías suficientemente bajas la dependencia en z de la función de onda será siempre $\Phi_1(z) = \sqrt{2/L} \sin(\pi z/L + \pi/2) = \sqrt{2/L} \cos(\pi z/L)$ y la dinámica de la partícula será bidimensional para todos los efectos prácticos .

6.8. EVOLUCIÓN TEMPORAL DE VALORES MEDIOS

§ 1. En esta sección estudiaremos cómo evolucionan en el tiempo los valores medios de una magnitud física $A \equiv A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ representada por el operador autoadjunto \hat{A} .

En principio, tal dependencia temporal es inmediata si conocemos la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$, que supondremos normalizada:

$$\langle A \rangle_t = \langle \Psi(t) | \hat{A} \Psi(t) \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{A} \Psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r}. \quad (6.59)$$

Para encontrar una ecuación de evolución para el valor medio, derivemos respecto del tiempo (6.59) recordando que el operador \hat{A} no depende explícitamente de t ,

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_t = \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \hat{A} \Psi(t) \rangle = \left\langle \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} | \hat{A} \Psi(t) \right\rangle + \langle \Psi(t) | \hat{A} \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} \rangle.$$

Si ahora sustituimos $\partial \Psi(t)/\partial t$ en términos de la actuación de \hat{H} y usamos que éste es autoadjunto,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A \rangle_t &= \left\langle -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi(t) | \hat{A} \Psi(t) \right\rangle + \langle \Psi(t) | \frac{-i}{\hbar} \hat{A} \hat{H} \Psi(t) \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \left(\langle \hat{H} \Psi(t) | \hat{A} \Psi(t) \rangle - \langle \Psi(t) | \hat{A} \hat{H} \Psi(t) \rangle \right) \\ &= \frac{i}{\hbar} \left(\langle \Psi(t) | \hat{H} \hat{A} \Psi(t) \rangle - \langle \Psi(t) | \hat{A} \hat{H} \Psi(t) \rangle \right) \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \Psi(t) | (\hat{H} \hat{A} - \hat{A} \hat{H}) \Psi(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi(t) | [\hat{H}, \hat{A}] \Psi(t) \rangle, \end{aligned}$$

donde hemos introducido el *comutador* $[\hat{H}, \hat{A}] = \hat{H} \hat{A} - \hat{A} \hat{H}$ (cfr. el epígrafe §4.4.5). Dado que esta igualdad es válida para cualquier función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$, podemos escribir la ecuación

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle A \rangle_t = \frac{i}{\hbar} \left\langle [\hat{H}, \hat{A}] \right\rangle_t} \quad (6.60)$$

que relaciona la variación temporal del valor medio de A con el valor medio de la magnitud representada por el operador $(i/\hbar)[\hat{H}, \hat{A}]$.

§ 2. Como primera aplicación, obtengamos a partir de (6.60) los *teoremas de Ehrenfest* (sección 6.4).

Consideremos una partícula de masa M bajo una fuerza $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r})$, siendo $V(\mathbf{r})$ la energía potencial. Para la coordenada x de la posición de la partícula se tiene que, aplicando las reglas de conmutación canónicas (cfr. §5.1.4) y las propiedades del álgebra de conmutadores vistas en §4.4.5,

$$\begin{aligned}\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{x}] &= \frac{i}{\hbar}[\hat{K}, \hat{x}] + \frac{i}{\hbar}[\hat{V}, \hat{x}] = \frac{i}{2M\hbar}[\hat{p}_x^2, \hat{x}] + \hat{0} = \\ &= \frac{i}{2M\hbar}(\hat{p}_x[\hat{p}_x, \hat{x}] + [\hat{p}_x, \hat{x}]\hat{p}_x) = \frac{1}{M}\hat{p}_x\end{aligned}$$

(hemos tenido en cuenta que x commuta con $V(\mathbf{r})$, p_y y p_z). En consecuencia

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle_t = \frac{1}{M}\langle p_x \rangle_t.$$

Para hallar la ecuación de evolución para p_x debemos evaluar $i\hbar^{-1}[\hat{H}, \hat{p}_x]$. Como \hat{K} y \hat{p}_x commutan,

$$\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{p}_x] = \frac{i}{\hbar}[\hat{V}, \hat{p}_x] = \frac{i}{\hbar}(\hat{V}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{V})$$

y podemos hallar la actuación de este operador usando explícitamente la representación en posiciones

$$\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{p}_x]\Psi(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})\frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial x} - \frac{\partial(V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}))}{\partial x} = \left(-\frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial x}\right)\Psi(\mathbf{r}) = F_x(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}).$$

Queda entonces que

$$\frac{d}{dt}\langle p_x \rangle_t = \langle F_x(\mathbf{r}) \rangle.$$

Extendiendo estos resultados para $d\langle x \rangle_t/dt$ y $d\langle p_x \rangle_t/dt$ a las componentes y , z recuperamos los teoremas de Ehrenfest (6.33) y (6.34).

§ 3. Conforme a la ecuación (6.60), si una magnitud A verifica $[\hat{H}, \hat{A}] = \hat{0}$, entonces los valores medios de A sobre cualquier estado $\Psi(\mathbf{r}, t)$, no necesariamente estacionario, no cambian en el tiempo. Diremos entonces que A es una **constante del movimiento** de la dinámica cuántica regida por el hamiltoniano \hat{H} :

A es constante del movimiento $\Leftrightarrow [\hat{H}, \hat{A}] = \hat{0} \Leftrightarrow \langle A \rangle_t = \langle A \rangle_0$

(6.61)

donde $\langle A \rangle_0$ es el valor medio de A en $t = 0$. Resulta entonces evidente que la propia energía H es constante del movimiento tal y como ya sabíamos.

Conviene hacer notar que en un estado estacionario *todos* los valores medios no cambian en el tiempo, incluyendo los de magnitudes que *no son* constantes del movimiento. Note que el hecho de que para una magnitud física B se cumpla que $\langle B \rangle_t = \text{constante}$ si la partícula está en un estado estacionario no da información relevante sobre la magnitud, puesto que esta invariancia temporal es debida a las propiedades del estado y no a las de la magnitud B .

§ 4. Las leyes de conservación típicas de la mecánica clásica de una partícula siguen siendo válidas si se trata cuánticamente. Por ejemplo, si la componente z de la fuerza que actúa sobre la partícula es cero, el segundo teorema de Ehrenfest implica que en cualquier estado $\langle p_z \rangle_t = \langle p_z \rangle_0$ por lo que p_z será una constante del movimiento. Veamos otro ejemplo en la misma línea.

EJEMPLO 6.j. (!) Conservación del momento angular

Una partícula de masa M se mueve bajo la acción de una fuerza central conservativa. Demuestre que las componentes del momento angular son constantes del movimiento.

Solución:

Probemos únicamente que $[\hat{H}, \hat{L}_z] = \hat{0}$ ya que para el resto de componentes de \mathbf{L} el procedimiento es idéntico. Partamos de

$$[\hat{K}, \hat{L}_z] = \frac{1}{2M} [\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2, \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x].$$

Usando álgebra de conmutadores y eliminando directamente aquellos conmutadores que van a ser nulos, tenemos que

$$\begin{aligned} [\hat{K}, \hat{L}_z] &= \frac{1}{2M} ([\hat{p}_x^2, \hat{x}\hat{p}_y] - [\hat{p}_y^2, \hat{y}\hat{p}_x]) = \frac{1}{2M} ([\hat{p}_x^2, \hat{x}]\hat{p}_y - [\hat{p}_y^2, \hat{y}]\hat{p}_x) = \\ &= \frac{\hat{p}_x[\hat{p}_x, \hat{x}]\hat{p}_y + [\hat{p}_x, \hat{x}]\hat{p}_x\hat{p}_y - \hat{p}_y[\hat{p}_y, \hat{y}]\hat{p}_x - [\hat{p}_y, \hat{y}]\hat{p}_y\hat{p}_x}{2M} \\ &= \frac{-i\hbar}{M} (\hat{p}_x\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{p}_x) = \hat{0}. \end{aligned}$$

Por otro lado, como \hat{L}_z sólo actúa sobre coordenadas esféricas angulares (recuerde el **ejemplo 5.d**), y la energía potencial sólo depende de la coordenada esférica radial r ,

$$(\hat{V}\hat{L}_z)\Psi(\mathbf{r}) = V(r) \left[-i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial \varphi} \right] = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} [V(r)\Psi(\mathbf{r})] = (\hat{L}_z\hat{V})\Psi(\mathbf{r}),$$

por lo que $[\hat{V}, \hat{L}_z] = \hat{0}$.

En definitiva, $[\hat{H}, \hat{L}_z] = [\hat{K}, \hat{L}_z] + [\hat{V}, \hat{L}_z] = \hat{0}$, de donde \hat{L}_z (y cualquier componente del momento angular) conmuta con \hat{H} . Este resultado se extiende a cualquier magnitud física función exclusivamente de \mathbf{L} .

Tal y como sucede en física clásica, el momento angular es una cantidad conservada en la evolución de una partícula cuántica sometida a una fuerza central conservativa.

Si la energía potencial no fuese central, tendríamos que

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = [\hat{V}, \hat{L}_z] = [\hat{V}, \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x] = \hat{x}[\hat{V}, \hat{p}_y] - \hat{y}[\hat{V}, \hat{p}_x] = -i\hbar(\hat{x}\hat{F}_y - \hat{y}\hat{F}_x),$$

donde hemos utilizado comutadores ya conocidos. Como consecuencia,

$$\frac{d}{dt}\langle L_z \rangle_t = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{L}_z] \rangle_t = \langle \hat{x}\hat{F}_y - \hat{y}\hat{F}_x \rangle_t = \langle M_z(\mathbf{r}) \rangle_t,$$

siendo $M_z(\mathbf{r})$ la componente z del par de fuerzas $\mathbf{r} \times \mathbf{F}(\mathbf{r})$.

Así, la ecuación clásica fundamental $d\mathbf{L}/dt = \mathbf{r} \times \mathbf{F}(\mathbf{r})$ se mantiene en mecánica cuántica al estudiar la evolución de los valores medios:

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{L} \rangle_t = \langle \mathbf{r} \times \mathbf{F}(\mathbf{r}) \rangle_t. \quad (6.62)$$

Ahora bien, puesto que en general $\langle \mathbf{r} \times \mathbf{F}(\mathbf{r}) \rangle_t \neq \langle \mathbf{r} \rangle_t \times \langle \mathbf{F}(\mathbf{r}) \rangle_t$ las soluciones específicas de las ecuaciones clásicas y cuánticas no coincidirán. La correspondencia que acabamos de ver es así formal, no efectiva.

6.9. CORRESPONDENCIA CON LA FÍSICA CLÁSICA(*)

En esta sección¹¹ faremos uso de la notación que indica la derivada temporal con un punto encima de la magnitud que se deriva, esto es, $\dot{A} \equiv \partial A / \partial t$.

§ 1. La ecuación de evolución de valores medios (6.60) sugiere definir la magnitud física \dot{A} como aquélla cuyo valor medio para cualquier estado $|\Psi(t)\rangle$ sea igual a la derivada respecto del tiempo de $\langle A \rangle_t$:

$$\langle \dot{A} \rangle_t = \frac{d}{dt}\langle A \rangle_t \quad \text{para todo estado } |\Psi(t)\rangle.$$

Esto queda garantizado automáticamente si su operador representativo es

$$\hat{\dot{A}} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}], \quad (6.63)$$

¹¹ Recuerde que esta sección es de lectura optativa

de manera que la magnitud \dot{A} dependerá del sistema físico específico, esto es, del operador hamiltoniano \hat{H} . Por ejemplo, de acuerdo con el segundo teorema de Ehrenfest $\dot{p}_x = F_x$, mientras que el operador asociado a \hat{L}_z será $\hat{x}\hat{F}_y - \hat{y}\hat{F}_x$.

§ 2. Analicemos ahora con un poco más de detalle esta correspondencia formal entre las mecánicas cuántica y clásica. Para no complicar la discusión supongamos momentáneamente que tenemos una partícula clásica de masa M que se mueve en una única dimensión espacial, siendo x su posición, p su momento lineal y $H = H(x, p)$ su función hamiltoniana. Como sabemos de cursos anteriores de mecánica, la evolución temporal de los valores de x y p está regida por las *ecuaciones de Hamilton* que, omitiendo como es habitual en mecánica clásica las dependencias temporales, se escriben como:

$$\boxed{\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad ; \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}.} \quad (6.64)$$

La variación temporal de una magnitud dinámica $A = A(x, p)$ se puede expresar como

$$\dot{A} = \frac{\partial A}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial A}{\partial p} \dot{p} = - \left(\frac{\partial H}{\partial x} \frac{\partial A}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial A}{\partial x} \right) \quad (6.65)$$

donde hemos aplicado la regla de la cadena y usado (6.64). Reordenando los productos, e introduciendo el llamado **corchete de Poisson** entre dos magnitudes dinámicas B y A ,

$$\{B, A\}_P \equiv \frac{\partial B}{\partial x} \frac{\partial A}{\partial p} - \frac{\partial B}{\partial p} \frac{\partial A}{\partial x}, \quad (6.66)$$

llegamos a

$$\dot{A} = -\{H, A\}_P. \quad (6.67)$$

La fórmula clásica (6.67) recibe el nombre de *ecuación de Liouville*. La ecuación cuántica análoga es la (6.63).

Podemos así establecer una correspondencia entre las dinámicas clásica y cuántica mediante la conexión formal

$$\boxed{(\text{clásica}) \quad \{A, B\}_P \quad \longleftrightarrow \quad \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}] \quad (\text{cuántica})} \quad (6.68)$$

§ 3. Observe que el corchete de Poisson entre la posición y el momento lineal es simplemente $\{x, p\}_P = 1$, ya que en el formalismo de Hamilton x y p son variables

independientes. El correspondiente cuántico a esta relación será, de acuerdo con (6.68), la **regla de commutación canónica** $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\hat{I}$, ya discutida en la sección 5.1, ecuación (5.6).

Para un sistema físico clásico descrito por N coordenadas generalizadas $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ y sus momentos canónicos conjugados $\{p_1, p_2, \dots, p_N\}$, el corchete de Poisson es

$$\{A, B\}_P \equiv \sum_{n=1}^N \left(\frac{\partial A}{\partial x_n} \frac{\partial B}{\partial p_n} - \frac{\partial A}{\partial p_n} \frac{\partial B}{\partial x_n} \right) \quad (6.69)$$

Es así fácil ver (inténtese) que para una partícula de masa M que se mueve en tres dimensiones se cumple que $\{L_x, L_y\}_P = L_z$. Esta relación clásica tendrá su reflejo cuántico en los operadores de momento angular ya que, como veremos en el próximo capítulo, se tiene que

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z \quad (6.70)$$

En general, las reglas de commutación canónicas garantizan que los resultados de los corchetes de Poisson clásicos y de los comutadores cuánticos sean iguales (salvo el factor $i\hbar$). Esto explica por qué las leyes de evolución clásicas y cuánticas, incluyendo los principios de conservación, sean formalmente idénticas.

§ 4. La correspondencia entre las dinámicas clásica y cuántica aparece también en la propia ecuación de Schrödinger. La función de onda de una partícula de masa M y energía potencial $V(\mathbf{r})$ puede escribirse como

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \mathcal{A}_0 e^{iW(\mathbf{r}, t)/\hbar} \quad \text{con} \quad W(\mathbf{r}, t) = -\frac{i}{\hbar} \ln \left(\frac{\Psi(\mathbf{r}, t)}{\mathcal{A}_0} \right) \in \mathbb{C}, \quad (6.71)$$

donde \mathcal{A}_0 es una constante arbitraria (con dimensiones de longitud elevada a $-3/2$) que se introduce por consistencia dimensional. Si ahora sustituimos (6.71) en la ecuación de Schrödinger y operamos, tenemos que la función compleja $W(\mathbf{r}, t)$ satisface la ecuación

$$-\frac{\partial W(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{1}{2M} \nabla W(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla W(\mathbf{r}, t) - \frac{i\hbar}{2M} \nabla^2 W(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}). \quad (6.72)$$

Descompongamos ahora $W(\mathbf{r}, t)$ en suma de sus partes real e imaginaria,

$$W(\mathbf{r}, t) = S(\mathbf{r}, t) + i\hbar B(\mathbf{r}, t) \quad (6.73)$$

siendo ahora las funciones S y B reales. Entonces

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \left(\mathcal{A}_0 e^{-B(\mathbf{r}, t)} \right) e^{iS(\mathbf{r}, t)/\hbar} = \sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)} e^{iS(\mathbf{r}, t)/\hbar},$$

donde hemos usado que $|\exp[iS(\mathbf{r}, t)/\hbar]|^2 = 1$ al ser S real. Así, $B(\mathbf{r}, t)$ está ligada directamente a la densidad de probabilidad (amplitud de la función de onda) mientras que $S(\mathbf{r}, t)$ está relacionada con la naturaleza ondulatoria de $\Psi(\mathbf{r}, t)$.

Si ahora sustituimos (6.73) en (6.72), operamos y sepáramos las partes real e imaginaria tenemos que

$$\begin{aligned} -\frac{\partial S(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \frac{1}{2M} |\nabla S(\mathbf{r}, t)|^2 + V(\mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{2M} |\nabla B(\mathbf{r}, t)|^2 + \frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 B(\mathbf{r}, t) \\ -\frac{\partial B(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \frac{1}{M} \nabla S(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla B(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{2M} \nabla^2 S(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (6.74)$$

Este es un sistema de dos ecuaciones diferenciales reales, completamente equivalente a la ecuación de Schrödinger.

Lo interesante de este resultado es que nos va a permitir obtener el límite clásico de la ecuación de Schrödinger, que se alcanzaría cuando $\hbar \rightarrow 0$. Tenemos así que la primera ecuación de (6.74) se reduciría a

$$-\frac{\partial S(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{1}{2M} |\nabla S(\mathbf{r}, t)|^2 + V(\mathbf{r}) \quad \text{si } \hbar \rightarrow 0, \quad (6.75)$$

mientras que la segunda no se vería afectada.

Por otra parte, según el postulado de De Broglie, la función de onda de una partícula libre es $\Psi(\mathbf{r}, t) = \mathcal{A}_0 \exp[iW(\mathbf{r}, t)/\hbar]$, con $W(\mathbf{r}, t) = S(\mathbf{r}, t)$. Admitamos que ésta es *también* la estructura de la función de onda cuando sobre la partícula actúa una fuerza conservativa $\mathbf{F}(\mathbf{r})$. Si elegimos $W(\mathbf{r}, t)$ dada por la ecuación (6.73), entonces podemos expresar la función de onda como

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \mathcal{A}_0 \exp[iW(\mathbf{r}, t)/\hbar], \quad \text{con } S(\mathbf{r}, t) = \lim_{\hbar \rightarrow 0} W(\mathbf{r}, t).$$

Este argumento fue usado por Erwin Schrödinger al justificar su ecuación.¹²

¹² Cuando **Erwin Schrödinger** (1887-1961) estableció las bases de la mecánica ondulatoria siendo profesor de la universidad de Zürich, ya era un científico experimentado que había ejercido en Jena, Stuttgart y Breslau (hoy Wrocław, Polonia). En 1927 ocupó la cátedra de física teórica de Berlín (una de las más codiciadas en el mundo de habla germana) sucediendo a Max Planck, pero con la ascensión del nazismo en 1933 abandonó Alemania iniciando un periplo de años (que incluyó una vuelta temporal a Austria desafortunada) que terminó en 1940 cuando se estableció en Dublín, desarrollando allí el resto de su carrera científica. Tras su jubilación retornó a su Viena natal, donde falleció en 1961. Schrödinger se caracterizó por sus posturas nada convencionales tanto en lo personal como en lo intelectual, y su famoso ensayo *¿Qué es la vida?* inspiró a Watson y Crick en su búsqueda del código genético.

§ 5. La formulación de la mecánica cuántica que hemos estado viendo en estos capítulos, en la que los estados cuánticos se representan por vectores de estado que dependen explícitamente del tiempo mientras que los operadores no lo hacen, se denomina *imagen de Schrödinger*.

Pero la relación (6.63) ofrece una formulación alternativa, llamada *imagen de Heisenberg*, en la que el estado de la partícula o del sistema físico se define mediante un vector independiente del tiempo (este vector representa las condiciones iniciales) pero en la que la evolución temporal de las propiedades observables se representa mediante operadores que dependen explícitamente del tiempo. Estos operadores que representan las magnitudes físicas evolucionan con el tiempo de acuerdo con la *ecuación de Heisenberg*, que se obtienen de la relación (6.63) teniendo en cuenta que el hamiltoniano es una constante del movimiento. El operador $\hat{A}_H(t)$ asociado a la magnitud física A obedecería

$$\boxed{\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}_H(t)].} \quad (6.76)$$

donde con el subíndice H enfatizamos que este operador $\hat{A}_H(t)$ es distinto al \hat{A} que hasta ahora hemos utilizado. El valor medio de A en un instante t sería

$$\langle A \rangle_t = \langle \Psi | \hat{A}_H(t) \Psi \rangle \quad \text{si } \|\Psi\| = 1. \quad (6.77)$$

En esta manera de plantear la dinámica cuántica (*imagen de Heisenberg*), si escogemos una representación algebraica para el espacio de los estados, tendremos que las magnitudes físicas están representadas por matrices dependientes del tiempo. Esta formulación fue la que adoptaron Werner Heisenberg, Max Born y Pascual Jordan en sus históricos trabajos de 1925.¹³

¹³ Werner Heisenberg (1901-1976) realizó su tesis doctoral bajo la supervisión de Arnold Sommerfeld (tesis que casi fue rechazada al ser incapaz de responder a preguntas realizadas por el tribunal sobre aspectos elementales de física experimental). Acto seguido, y con 23 años, empieza a trabajar como asistente de Max Born en Gottingen. Tras el desarrollo de la mecánica matricial se une al equipo de Niels Bohr en Copenhague, y es allí donde formula su principio de incertidumbre en 1927. Justo después, y con tan sólo 26 años, obtiene una plaza de profesor en Leipzig. Lideró el programa (fallido) de desarrollo de una bomba nuclear alemana durante la Segunda Guerra Mundial, algo que ha motivado multitud de análisis históricos y especulaciones sobre el compromiso que asumió realmente Heisenberg en aquel programa. También se ha escrito mucho sobre el hecho de que obtuviese en solitario el premio Nobel de 1932, olvidando la Academia Sueca las esenciales contribuciones de Max Born (quien a la postre fue galardonado en 1954) y de Pascual Jordan, quien nunca lo recibió.

PROBLEMAS PROPUESTOS

PROBLEMA 6.1. *Velocidades de fase y de grupo*

En un instante, que tomaremos como $t = 0$, la función de onda normalizada de una partícula de masa M que se mueve libremente en una dimensión es $\Psi(x, 0) = g(x) \exp(i k_0 x)$, donde $k_0 > 0$ y $g(x)$ es una función real, positiva, par [$g(x) = g(-x)$] y muy extendida sobre la recta real. Demuestre que la evolución temporal de la función de onda está dada aproximadamente por

$$\Psi(x, t) \simeq g(x - v_g t) e^{ik_0 x} e^{-i\omega_0 t}.$$

¿Cuáles son los valores de v_g y de ω_0 ?

PROBLEMA 6.2. *Inversión espacial en la ecuación de Schrödinger*

Una función $\Psi(\mathbf{r})$ es par o tiene paridad positiva si $\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(-\mathbf{r})$, mientras que es impar o tiene paridad negativa si $\Psi(\mathbf{r}) = -\Psi(-\mathbf{r})$. Demuestre que la posible paridad (positiva o negativa) de una función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ se mantiene en la evolución si su energía potencial $V(\mathbf{r})$ exhibe *simetría de inversión espacial*, esto es, si $V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$.

PROBLEMA 6.3. *Estados cuasiestacionarios*

En un instante dado t_0 , la función de onda normalizada de una partícula de masa M que se mueve libremente en una dimensión espacial es

$$\Psi(x) = \frac{\exp[-x^2/(2a^2)]}{(\pi a^2)^{1/4}} \exp(ip_0 x/\hbar) \quad \text{con } a, p_0 \in \mathbb{R}$$

Obtenga la incertidumbre ΔH en su energía, y discuta su dependencia en función de a .

PROBLEMA 6.4. *Densidad de probabilidad para medidas de E*

Si, en un instante dado, la representación en momentos de la función de onda normalizada de una partícula libre que se mueve en el espacio es $\tilde{\Psi}(\mathbf{p})$, obtenga la probabilidad de que al medir su energía se obtenga un resultado en el intervalo infinitesimal $(E, E + dE)$.

PROBLEMA 6.5. (!) *Acotación del valor medio de la energía*

Aunque resulte intuitivo, demuestre rigurosamente que el valor medio de la energía de una partícula bajo la acción de una fuerza conservativa es siempre mayor o igual que la energía E_{fund} del nivel fundamental del sistema:

$\langle H \rangle \geq E_{\text{fund.}}$

(6.78)

¿Cuándo se satura la desigualdad?

Nota: La solución es prácticamente idéntica a la del problema propuesto 5.6.

PROBLEMA 6.6. Valores medios en una onda modulada

Dando por supuesto un factor de modulación muy extendido, en un instante dado la función de onda de una partícula que se mueve libremente en una dimensión es:

$$\Psi(x) = \mathcal{A} [\sin(k_0x) \cos(k_0x) + 2 \sin(3k_0x)] \quad \text{con } k_0 > 0.$$

Halle los valores medios e incertidumbres del momento lineal y de la energía.

Sugerencia: Exprese $\Psi(x)$ como combinación lineal de funciones de De Broglie.

PROBLEMA 6.7. Bases de representación reales

Pensemos en una partícula de masa M que cuya energía potencial es $V(\mathbf{r})$.

- a) Demuestre que si $\Psi_E(\mathbf{r})$ es autofunción del hamiltoniano con energía E , entonces $\Psi_E^*(\mathbf{r})$ también lo es. Como consecuencia pruebe que siempre es posible encontrar una base de un nivel energético formada por funciones estrictamente reales y, en consecuencia, una base de representación del espacio $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ formada por autofunciones reales de la energía.
- b) Si además $V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$, demuestre que es posible construir una base de representación compuesta por autofunciones reales de la energía y con paridad definida, es decir, algunas de las autofunciones de la base serán pares y las restantes impares.
- c) Los resultados anteriores son aplicables a una partícula que se mueve en una dimensión espacial. Demuestre que el conjunto de funciones

$$\eta_{k,1}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin(kx) ; \quad \eta_{k,2}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos(kx) \quad \text{con } k \in \mathbb{R}^+$$

forman una base de representación de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ en la que la condición de ortogonalidad se expresa como $\langle \eta_{k,i} | \eta_{q,j} \rangle = \delta(k - q) \delta_{i,j}$. En los estados cuánticos ideales representados por estas funciones de onda ¿cuáles serán los valores medios y las incertidumbres de la componente x del momento lineal?

Ayuda para el apartado c): Desarrolle las funciones seno y coseno en términos de exponentiales complejas, resultando ya sencillo introducir la delta de Dirac en el producto escalar $\langle \eta_{k,i} | \eta_{q,j} \rangle$. Tenga en cuenta que k y q son positivos.

PROBLEMA 6.8. *El escalón infinito de potencial*

Una partícula de masa M se mueve libremente en una dimensión espacial pero confinada en la región $-\infty < x < 0$. Clásicamente, la partícula rebotaría elásticamente en el punto $x = 0$ sea cual sea su energía, lo que implica que su energía potencial es

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases}$$

lo que justifica el nombre de “escalón de potencial infinito”.

- a) Demuestre que las funciones de onda

$$\Psi_p(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \sin(px) \quad \text{con } p \in \mathbb{R}^+$$

son autofunciones de la energía con autovalor $E = p^2/(2M)$.

- b) Verifique que estas funciones están regularizadas en el sentido

$$\langle \Psi_p | \Psi_q \rangle = \frac{2}{\pi\hbar} \int_0^\infty \sin(px) \sin(qx) \, dx = \delta(p - q)$$

donde $\delta(p - q)$ es la delta de Dirac.

- c) ¿Cree Vd. que las soluciones a la ecuación de evolución *clásica* para la posición de la partícula siguen siendo válidas en este problema cuántico?

Ayuda para el apartado b): Puesto que el integrando en $\langle \Psi_p | \Psi_q \rangle$ es par, puede extender la integral a todo \mathbb{R} dividiéndola por dos. Siga entonces la sugerencia del problema propuesto 6.7.

PROBLEMA 6.9. (*) *Partícula sometida a una fuerza constante II*

Una partícula de masa M se mueve en una dimensión bajo la acción de una fuerza constante $\mathbf{F} = -F\mathbf{u}_x$ con $F > 0$. Sus autofunciones de la energía son

$$\Phi_E(x) = \mathcal{A} \operatorname{Ai}\left(\frac{x - x_r}{b_0}\right) \quad \text{con} \quad \begin{cases} x_r = E/F , \quad E \in \mathbb{R} \\ b_0 = \left(\frac{\hbar^2}{2MF}\right)^{1/3} \end{cases}$$

- a) Obtenga la constante de regularización \mathcal{A} para que se cumpla la relación usual de ortogonalidad $\langle \Phi_{E_1} | \Phi_{E_2} \rangle = \delta(E_1 - E_2)$.
- b) Usando los teoremas de Ehrenfest, obtenga los valores medios de la posición y el momento lineal en un instante de tiempo t arbitrario a partir de sus valores iniciales $x_0 \equiv \langle x \rangle_{t=0}$ y $p_0 \equiv \langle p_x \rangle_{t=0}$.

- c) Partiendo de la ecuación de Schrödinger en la representación en momentos demuestre que

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{\text{mom}}(p_x, t) = -F \frac{\partial}{\partial p_x} \rho_{\text{mom}}(p_x, t)$$

Como consecuencia, pruebe que la incertidumbre del momento lineal Δp_x es constante en el tiempo.

- d) En el instante $t = 0$ la función de onda normalizada de la partícula es

$$\Psi(x, 0) = \Psi(x, t_0) = \frac{1}{(\pi a^2)^{1/4}} \exp \left[-\frac{(x + b_0)^2}{2a^2} \right] \quad \text{con} \quad \begin{cases} b_0 = \left(\frac{\hbar^2}{2MF} \right)^{1/3} \\ a = \zeta b_0 ; \quad \zeta > 0 \end{cases}$$

Evalúe el valor medio de su energía. A partir de los resultados de los apartados b) y c) obtenga cómo evolucionan en el tiempo los valores medios de su posición, su momento lineal y su energía cinética. Discuta los resultados en los límites $\zeta \sim 0$ y $\zeta \gg 1$.

- e) Plantee la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en la representación en momentos y resuélvala. Mediante una transformada de Fourier obtenga las autofunciones de la energía en la representación en posiciones.

Ayudas:

$$\int_{\mathbb{R}} \text{Ai}(u-a) \text{Ai}(u-b) \, du = \delta(a-b) \quad \text{Ai}(u) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{ik^3/3} e^{iku} \, dk$$

$$\int_{\mathbb{R}} \exp(-u^2) \, du = \sqrt{\pi} \quad \int_{\mathbb{R}} u^2 \exp(-u^2) \, du = \frac{1}{2} \sqrt{\pi}$$

PROBLEMA 6.10. (!!) Penetración en una zona prohibida

Consideremos una partícula de masa M que se mueve en una dimensión y cuya energía potencial es $V(x)$. Clásicamente, el movimiento de la partícula está restringido a una zona en la que $E > V(x)$, siendo E la energía mecánica de la partícula (vea la FIG. 6-6). Sin embargo la función de onda de un estado estacionario realizable con energía E puede tomar valores no nulos en la zona o región clásicamente prohibida $E < V(x)$.

- a) Siendo este resultado sorprendente, argumente basándose en el principio de incertidumbre y en la interpretación probabilística que tal resultado no debe “preocuparnos”. (*Idea: lo preocupante sería que en una medición simultánea de la energía y la posición detectásemos a la partícula dentro de la zona prohibida que corresponde al valor de la energía obtenido en tal medida*)
- b) Si en un intervalo $[a, b]$ la energía potencial toma un valor V_0 constante, demuestre que el comportamiento más general posible de una autofunción de la energía en

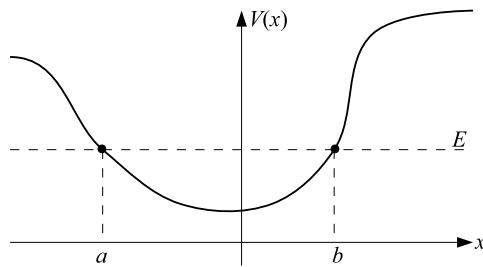


Figura 6-6. Esquema energético de una partícula de masa M y energía potencial $V(x)$. Si E es la energía mecánica de la partícula, su movimiento clásico está restringido a la región $a \leq x \leq b$, donde a y b son los puntos clásicos de retroceso.

dicho intervalo es

$$\Psi_E(x) = \begin{cases} \mathcal{A}e^{+ikx} + \mathcal{B}e^{-ikx} & \text{si } V_0 < E \\ \mathcal{C}e^{+kx} + \mathcal{D}e^{-kx} & \text{si } V_0 > E \end{cases} \quad \text{con } k \equiv \frac{\sqrt{2M|E - V_0|}}{\hbar} \quad (6.79)$$

donde \mathcal{A} , \mathcal{B} , \mathcal{C} , \mathcal{D} son constantes multiplicativas complejas.

TEMA 7

TEORÍA DE LA MEDIDA. POSTULADOS DE LA FÍSICA CUÁNTICA

Hasta ahora nos hemos centrado en la descripción cuántica de estados y magnitudes físicas, haciendo especial hincapié tanto en la interpretación probabilística de los resultados de una medida como en la evolución temporal determinista regida por la ecuación de Schrödinger. En este capítulo estudiaremos muy someramente qué sucede en una medida propiamente dicha.

Tras una introducción general, definiremos los llamados *proyectores espectrales* asociados a una magnitud física. A partir de los mismos será posible obtener la función de onda de una partícula tras haber efectuado sobre ella una medida ideal. Este cambio de la función de onda, conocido como *colapso*, será incompatible con las leyes de evolución deterministas que hemos visto hasta ahora ya que el estado cuántico tras la medida dependerá del resultado de la misma, que sabemos es estocástico por naturaleza.

Acto seguido hablaremos del esencial concepto de *compatibilidad* intentando dar respuesta a la pregunta ¿cuándo dos magnitudes físicas se pueden medir simultáneamente con precisión arbitraria? Esto nos llevará a una formulación más general del principio de incertidumbre de Heisenberg y a la discusión de la llamada relación de incertidumbre energía–tiempo.

Finalmente presentaremos muy superficialmente la base postulacional de la mecánica cuántica y unas breves ideas sobre el llamado problema de la medida en mecánica cuántica.

Orientaciones generales al plan de trabajo

Sugerimos unas **8 horas** de trabajo personal para este capítulo que deben estar repartidas a partes iguales entre el estudio de los conceptos teóricos y sus aplicaciones, que se muestran en los ejemplos resueltos y en los problemas propuestos.

Objetivos del capítulo

- Saber describir el proceso de *colapso* o *reducción* de una función de ondas resultado de una medida ideal sobre una partícula.
- Relacionar la compatibilidad entre magnitudes con la conmutación entre los operadores representativos. Interpretar dicha compatibilidad a la luz de las relaciones de Heisenberg generalizadas, incluyendo las reglas de conmutación canónicas.
- Conocer qué es un conjunto completo de observables compatibles y su relación con los procesos de preparación.
- Ser consciente del problema que supone la interpretación “estándar” del colapso de un estado cuántico y su incompatibilidad con las reglas de evolución determinista que se obtienen a partir de la ecuación de Schrödinger.

7.1. PROYECTORES ESPECTRALES. COLAPSO DEL ESTADO

§ 1. Podemos decir que los fenómenos que estudia la física cuántica responden sistemáticamente al siguiente esquema:

1. **Preparación.** Mediante un cierto procedimiento físico, la partícula (o en general el sistema sujeto a estudio) queda dispuesta en un estado cuántico representado por su función de onda $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ (o por un vector de estado $|\Psi(0)\rangle$ en la formulación abstracta de Dirac).
2. **Evolución determinista.** La partícula se propaga bajo la acción de una fuerza conocida $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ de manera que el estado cuántico $\Psi(\mathbf{r}, t)$ cambia en el tiempo. La función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ se obtiene sin ambigüedad a partir del conocimiento de $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ mediante la resolución de la ecuación de Schrödinger.
3. **Medida.** En un instante t se exploran las propiedades de la partícula. El resultado de la medida no está únicamente determinado por la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$, aunque sí lo están las probabilidades de ocurrencia.

Planteadas así las cosas no hay especial problema en el estudio cuántico, salvo la natural sorpresa que deben producirnos los muchos y peculiares fenómenos que aparecen en la descripción del micromundo. La teoría cuántica que hemos desarrollado en los tres capítulos anteriores para una partícula puntual, da buena cuenta de estos fenómenos con una capacidad de predicción inusitada, superior a la de cualquier otra teoría física. Ello es debido en gran medida a su rigor epistemológico (sólo se contemplan propiedades realmente medibles, eliminando cualquier aproximación apriorística) y a la robustez de su formulación matemática. Estos dos aspectos se complementan y no pueden entenderse el uno sin el otro. Por ello hemos intentado ser muy cuidadosos explicando tanto el cómo (las herramientas) como el porqué (el motivo por el cual esas herramientas son necesarias).

§ 2. Sin embargo, una presentación de los principios básicos de la física cuántica es incompleta si no se analiza la medida de una cierta magnitud física A entendida como un proceso físico en sí mismo. Sin profundizar en demasiado podemos decir que una medida se realiza mediante la interacción entre un dispositivo macroscópico \mathcal{M} y la partícula, infiriéndose el resultado de la medida a partir de una transformación en el estado macroscópico de \mathcal{M} .

Esta interacción puede resultar extremadamente compleja: el estado de la partícula condiciona al del dispositivo y viceversa, y el proceso tiene un carácter

irreversible que queda fuera del alcance de una simple ecuación de Schrödinger correspondiente a una fuerza efectiva actuando sobre la partícula. Más aún, una vez culminada la medida (el cambio en el estado macroscópico de \mathcal{M}) lo más normal es que el estado de la partícula sea impredecible. Puede incluso ocurrir que la partícula quede “destruida”, entendiendo por ello que el dispositivo la ha absorbido dejando así de ser realista el tratarla como un ente individual desacoplado de su entorno. Esto es lo que ocurre, por ejemplo, en la detección de una partícula a resultas de su impacto contra una pantalla.

Una *medida ideal* es aquella en la que la interacción entre el aparato de medida \mathcal{M} y la partícula es la mínima posible. Por supuesto, por pequeña que sea la interacción del aparato de medida con la partícula, tenemos que aceptar que, en general, la medida puede cambiar el estado cuántico de la partícula. De hecho, la interpretación probabilística que vimos en el Capítulo 5, junto con un razonable requisito de consistencia, nos lleva a una curiosa conclusión sobre las consecuencias de una medida. En efecto, según la interpretación probabilista expuesta en el Capítulo 5, la probabilidad de obtener en una medida un valor a del espectro de A se obtiene a partir de las coordenadas de la función de onda en una base propia de A . Supongamos entonces que sobre la partícula en un estado arbitrario descrito por una función de onda Ψ_{antes} hemos hecho una primera medida de A y hemos obtenido el valor a . La medida ha proporcionado una información sobre el estado dinámico de la partícula, que antes no teníamos, y la función de onda resultante $\Psi_{\text{después}}$ ha de ser consistente con dicha información.

Supongamos ahora que, inmediatamente después de la primera medida, hacemos una segunda medida de A sobre la partícula. Parece razonable que una medida ideal debería dar con certeza el mismo valor a .¹ Pero, una vez más según la interpretación probabilística, esto quiere decir que la segunda medida se ha hecho sobre una partícula en el estado cuántico Φ_a correspondiente al autovalor a de A . Es decir, la primera medida ha convertido instantáneamente el estado Ψ_{antes} en un estado $\Psi_{\text{después}} = \Phi_a$. A este cambio instantáneo se le llama *reducción o colapso del estado cuántico*.

El resultado de una medida ideal es equivalente a una *preparación*: si hay un único estado cuántico $|\Psi_{\text{después}}\rangle$ consistente con tal resultado $\Psi_{\text{después}}(\mathbf{r})$ será, salvo constante multiplicativa, la función de onda colapsada de la partícula. Y eso es así independientemente de cómo fuera $\Psi(\mathbf{r})$. El concepto de estado cuántico

¹ Con más generalidad, si hemos medido una magnitud física A y el resultado ha sido “ A toma un valor dentro de un subconjunto \mathbb{S} de \mathbb{R} ”, una segunda medida (ideal) inmediata de A debe dar con certeza un valor dentro de ese subconjunto \mathbb{S} .

está así estrechamente relacionado con el de preparación, puesto que *todo estado cuántico realizable es el resultado de una preparación o de cualquier otro proceso conceptualmente equivalente.*

§ 3. Para proceder con una exposición más cuantitativa, recordemos que una magnitud física A está representada por un operador autoadjunto \hat{A} cuyo espectro, en el caso más general, está formado por una parte puntual $\sigma_p(A)$ y otra continua $\sigma_c(A)$.

Si a es un autovalor del espectro puntual y \mathcal{W}_a es el subespacio propio formado por las autofunciones normalizables de \hat{A} con dicho autovalor, la regla de actuación del proyector $\hat{\mathcal{P}}_a$ sobre \mathcal{W}_a está dada por

$$\hat{\mathcal{P}}_a \Psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{g_a} \langle \Phi_{a,n} | \Psi \rangle \Phi_{a,n}(\mathbf{r}) \quad \text{con } a \in \sigma_p(A), \quad (7.1)$$

donde $\{\Phi_{a,1}(\mathbf{r}), \dots, \Phi_{a,g_a}(\mathbf{r})\}$ es una base ortonormal de \mathcal{W}_a . Recordemos que los subespacios \mathcal{W}_a son ortogonales entre sí, lo que implica que

$$\langle \Phi_{a,n} | \Phi_{a',n'} \rangle = \delta_{a,a'} \delta_{n,n'}.$$

Análogamente, si \mathcal{W}_α es el subespacio formado por las autofunciones (no normalizables) de \hat{A} con autovalor $\alpha \in \sigma_c(A)$, podemos definir un operador lineal $\hat{\mathcal{P}}(\alpha)$ cuya regla de actuación es

$$\hat{\mathcal{P}}(\alpha) \Psi(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{g_\alpha} \langle \Lambda_{\alpha,i} | \Psi \rangle \Lambda_{\alpha,i}(\mathbf{r}) \quad \text{con } \alpha \in \sigma_c(A), \quad (7.2)$$

donde ahora $\{\Lambda_{\alpha,1}(\mathbf{r}), \dots, \Lambda_{\alpha,g_\alpha}(\mathbf{r})\}$ es una base ortogonal de \mathcal{W}_α cuyas funciones de onda obedecen la condición de regularización

$$\langle \Lambda_{\alpha,i} | \Lambda_{\alpha',i'} \rangle = \delta(\alpha - \alpha') \delta_{i,i'},$$

y, además, son ortogonales a todas las autofunciones $\Phi_{a,n}(\mathbf{r})$. Es entonces fácil comprobar que

$$\hat{\mathcal{P}}_{a_1} \hat{\mathcal{P}}_{a_2} = \delta_{a_1, a_2} \hat{\mathcal{P}}_{a_1} \quad ; \quad \hat{\mathcal{P}}(\alpha_1) \hat{\mathcal{P}}(\alpha_2) = \delta(\alpha_1 - \alpha_2) \hat{\mathcal{P}}(\alpha_1) \quad ; \quad \hat{\mathcal{P}}_a \hat{\mathcal{P}}(\alpha) = \hat{0}$$

$$\langle \Psi | \hat{\mathcal{P}}_a \Psi \rangle = \langle \hat{\mathcal{P}}_a \Psi | \Psi \rangle = \langle \hat{\mathcal{P}}_a \Psi | \hat{\mathcal{P}}_a \Psi \rangle \quad ; \quad \langle \Psi | \hat{\mathcal{P}}(\alpha) \Psi \rangle = \langle \hat{\mathcal{P}}(\alpha) \Psi | \Psi \rangle. \quad (7.3)$$

A diferencia de los $\hat{\mathcal{P}}_a$, los operadores $\hat{\mathcal{P}}(\alpha)$ no son genuinos proyectores ortogonales ya que el resultado de su aplicación no es en general una función

normalizable. Sin embargo, y como puede ver en (7.3), sí verifican algunas de sus propiedades formales. Por ello se les llama a veces *proyectores generalizados*.

§ 4. Escojamos ahora un subconjunto arbitrario \mathbb{S} de \mathbb{R} y definamos el *proyector espectral*

$$\hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}} = \sum_{\sigma_p \cap \mathbb{S}} \hat{\mathcal{P}}_a + \int_{\sigma_c \cap \mathbb{S}} \hat{\mathcal{P}}(\alpha) d\alpha. \quad (7.4)$$

Las relaciones (7.3) garantizan que $\hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}}$ es un proyector ortogonal de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, cuya actuación sobre una función de onda $\Psi(\mathbf{r})$ es

$$\hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}}\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma_p \cap \mathbb{S}} \sum_{n=1}^{g_a} c_{a,n} \Phi_{a,n}(\mathbf{r}) + \int_{\sigma_c \cap \mathbb{S}} \sum_{i=1}^{g_a} c_{\alpha,i} \Lambda_{\alpha,i}(\mathbf{r}) d\alpha, \quad (7.5)$$

donde $c_{a,n} = \langle \Phi_{a,n} | \Psi \rangle$ y $c_{\alpha,i} = \langle \Lambda_{\alpha,i} | \Psi \rangle$ son las coordenadas de $\Psi(\mathbf{r})$ en la base de representación, propia de A , formada por las autofunciones $\Phi_{a,n}(\mathbf{r})$ y $\Lambda_{\alpha,i}(\mathbf{r})$. Vemos entonces que $\hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}}$ proyecta sobre un subespacio de Hilbert $\mathcal{W}_{\mathbb{S}}$ de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ formado por todas las funciones cuyas coordenadas no nulas en una base propia de A corresponden a autofunciones con autovalores dentro de \mathbb{S} . Físicamente, una medida de A sobre una partícula cuya función de onda pertenezca a $\mathcal{W}_{\mathbb{S}}$ dará con toda seguridad un resultado dentro de \mathbb{S} , por lo que es natural llamar a $\mathcal{W}_{\mathbb{S}}$ el *subespacio propio* correspondiente al subconjunto \mathbb{S} .

Si tenemos en cuenta la expansión de $\Psi(\mathbf{r})$ en la base de representación propia de A y que $\hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}}$ es un proyector, vemos que

$$\|\hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}}\Psi\|^2 = \langle \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}}\Psi | \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}}\Psi \rangle = \langle \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}}\Psi | \Psi \rangle = \sum_{\sigma_p \cap \mathbb{S}} \sum_{n=1}^{g_a} |c_{a,n}|^2 + \int_{\sigma_c \cap \mathbb{S}} \sum_{i=1}^{g_a} |c_{\alpha,i}|^2 d\alpha$$

Por otro lado, si usamos los resultados del epígrafe §5.4.2,

$$\Pr(A \subset \mathbb{S}) = \frac{1}{\|\Psi\|^2} \left[\sum_{\sigma_p \cap \mathbb{S}} \sum_{n=1}^{g_a} |c_{a,n}|^2 + \int_{\sigma_c \cap \mathbb{S}} \sum_{i=1}^{g_a} |c_{\alpha,i}|^2 d\alpha \right]$$

y la probabilidad de que al medir A se obtenga un resultado dentro de \mathbb{S} es

$$\Pr(A \subset \mathbb{S}) = \frac{\|\hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}}\Psi\|^2}{\|\Psi\|^2} = \frac{\langle \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}}\Psi | \Psi \rangle}{\|\Psi\|^2} = \frac{|\langle \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}}\Psi | \Psi \rangle|^2}{\|\Psi\|^2 \|\hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}}\Psi\|^2}. \quad (7.6)$$

Vemos así que $\Pr(A \subset \mathbb{S})$ es igual al grado de similitud entre $\Psi(\mathbf{r})$ y su proyección ortogonal sobre el subespacio propio $\mathcal{W}_{\mathbb{S}}$. La importante expresión (7.6) sirve entonces para dar un significado físico completo al criterio de similitud entre funciones de onda basado en probabilidades de ocurrencia.

Fíjese además que $\hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}}\Psi(\mathbf{r})$ es el resultado de “filtrar” la función de onda $\Psi(\mathbf{r})$, dejándola reducida a aquellas componentes que son compatibles con el resultado de la medida: intuitivamente $\hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}}\Psi(\mathbf{r})$ es la función de onda más parecida a $\Psi(\mathbf{r})$ que satisface la propiedad “ A toma con certeza un valor de \mathbb{S} ”. Como consecuencia, y de acuerdo con la discusión previa del epígrafe §2, tendremos que la **función de onda colapsada** $\Psi_{\text{después}}(\mathbf{r})$, resultado de una medida ideal de A con un valor en \mathbb{S} , es igual a la proyección ortogonal de la función de onda de la partícula $\Psi(\mathbf{r})$ sobre el subespacio propio $\mathcal{W}_{\mathbb{S}}$.

Este es el famoso **postulado de reducción** de von Neumann, según el cual la medida ideal es equivalente a una transformación estocástica de un estado inicial $\Psi(\mathbf{r})$ en otro final $\Psi_{\mathbb{S}}(\mathbf{r}) = \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}}\Psi(\mathbf{r})$ con valores de una medida de A en \mathbb{S} . Simbólicamente, esto se expresa como:

$$\boxed{\Pr(A \subset \mathbb{S}) = \Pr(|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi_{\mathbb{S}}\rangle) = \frac{|\langle \Psi_{\mathbb{S}} | \Psi \rangle|^2}{\|\Psi_{\mathbb{S}}\|^2 \|\Psi\|^2} \quad \text{con} \quad \Psi_{\mathbb{S}}(\mathbf{r}) = \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}}\Psi(\mathbf{r}).} \quad (7.7)$$

§ 5. La consistencia lógica del postulado de reducción es evidente, pero el precio que se paga es muy elevado. La medida ideal induce una transformación del estado cuántico que resulta ser claramente incompatible con el carácter determinista y unitario de la evolución temporal correspondiente a la ecuación de Schrödinger.

En efecto, la función de onda colapsada depende de la función de onda inicial $\Psi(\mathbf{r})$ y del resultado de la medida que, de acuerdo con la interpretación probabilística, es en esencia estocástico. Por ejemplo, pensemos en las funciones de onda normalizadas

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi_1(\mathbf{r}) + \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi_2(\mathbf{r}) \quad ; \quad \vartheta(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi_1(\mathbf{r}) - \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi_2(\mathbf{r}),$$

donde $\Phi_i(\mathbf{r})$ es una autofunción normalizada de la magnitud A con autovalor $a_i \in \sigma_p(A)$. Como $\Phi_1(\mathbf{r})$ y $\Phi_2(\mathbf{r})$ son ortonormales, es inmediato comprobar que $\langle \Psi | \vartheta \rangle = 0$, por lo que los estados $|\Psi\rangle$ y $|\vartheta\rangle$ son completamente distintos. Sin embargo, las funciones de onda colapsadas $\Psi_{\text{después}}(\mathbf{r})$ y $\vartheta_{\text{después}}(\mathbf{r})$ correspondientes tanto al resultado “ $A = a_1$ ” como al “ $A = a_2$ ” son, salvo constante multiplicativa, iguales entre sí: la evolución resultado de una medida de

A puede transformar dos estados cuánticos completamente distintos en dos estados físicamente iguales, rompiéndose así la unitariedad típica de la evolución definida por la ecuación de Schrödinger. A este respecto, nótese la cercanía entre esta discusión y la que se hizo de la similitud entre estados **sección 4.1**, especialmente la definición de semejanza en la ecuación (4.4).

En resumen, el postulado (7.7) introduce *un segundo tipo* de evolución temporal en la física cuántica, completamente diferente al que hemos estudiado en el capítulo anterior. Este es el llamado **problema de la medida** en física cuántica: la coexistencia de dos tipos de transformaciones de un estado cuántico, una determinista y unitaria (la dictada por la ecuación de Schrödinger) y otra estocástica y no unitaria (la medida ideal). Lo único que tienen en común es la linealidad, reflejo del principio de superposición que permea toda la teoría cuántica. Volveremos a este problema al final del capítulo.

7.2. COMPATIBILIDAD ENTRE OBSERVABLES

§ 1. Se dice que una magnitud física es un **observable** si es medible, estando los resultados de una medida sujetos a la interpretación probabilística que hemos estudiado en el **capítulo 5**. A su vez, dos observables A y B son **compatibles** si pueden ser medidos simultáneamente con precisión arbitraria. Para que ello sea posible debe existir un dispositivo \mathcal{M} capaz de realizar las dos medidas, una de A y otra de B , sin que éstas interfieran entre sí. La forma más sencilla de que esto sea así es que \mathcal{M} realice primero una medida ideal de A y, justo a continuación, otra de B . Las magnitudes serán compatibles si la medida de B no ha cambiado las probabilidades de ocurrencia correspondientes a A , lo que se traduce en que una hipotética nueva medida de A sobre el estado colapsado tras la medición de B dé con toda certeza el mismo resultado que la primera.

Sea $|\Psi\rangle$ el estado inicial de la partícula sobre la que se efectúan las medidas. Si la primera medida de A ha dado como resultado “ $A \subset \mathbb{S}_a$ ”, donde \mathbb{S}_a es un cierto subconjunto de los números reales, la función de onda colapsada es

$$\Psi_1(\mathbf{r}) = \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}_a}^{(A)} \Psi(\mathbf{r}),$$

donde $\hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}_a}^{(A)}$ es el proyector sobre el subespacio propio $\mathcal{W}_{\mathbb{S}_a}^{(A)}$ formado por las funciones de onda de los estados en los que A toma con certeza un valor dentro de \mathbb{S}_a . Si ahora efectuamos la medida ideal de B , la función $\Psi_1(\mathbf{r})$ sufre un segundo colapso transformándose en

$$\Psi_2(\mathbf{r}) = \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}_b}^{(B)} \Psi_1(\mathbf{r}) = \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}_b}^{(B)} \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}_a}^{(A)} \Psi(\mathbf{r}).$$

Por la definición de compatibilidad, $\Psi_2(\mathbf{r})$ debe seguir perteneciendo al subespacio propio $\mathcal{W}_{\mathbb{S}_a}^{(A)}$, esto es,

$$\hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}_a}^{(A)} \Psi_2(\mathbf{r}) = \Psi_2(\mathbf{r}) \quad \Rightarrow \quad \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}_a}^{(A)} \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}_b}^{(B)} \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}_a}^{(A)} \Psi(\mathbf{r}) = \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}_b}^{(B)} \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}_a}^{(A)} \Psi(\mathbf{r}).$$

Siendo esto válido para cualquier función de onda, A y B serán compatibles si y sólo si

$$\hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}_a}^{(A)} \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}_b}^{(B)} \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}_a}^{(A)} = \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}_b}^{(B)} \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}_a}^{(A)}.$$

Como los proyectores ortogonales son autoadjuntos, si tomamos el adjunto de la anterior igualdad el primer miembro no cambia pero en el segundo se intercambia el orden de los operadores. Tenemos así que

$$\hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}_b}^{(B)} \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}_a}^{(A)} = \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}_a}^{(A)} \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}_b}^{(B)},$$

y entonces:

La condición necesaria y suficiente para que dos observables sean compatibles es que el producto de sus proyectores espectrales respectivos sea conmutativo.

§ 2. Analicemos ahora el proceso de medida simultánea de A y B desde otro punto de vista. Imaginemos que el dispositivo \mathcal{M} , además de ideal, tiene indefiniciones δa y δb que, en la práctica, son despreciables. Independientemente del estado cuántico $|\Psi\rangle$ de la partícula sobre el que se efectúa la medida, la función de onda colapsada será autofunción tanto de \hat{A} como de \hat{B} (o quasi-autofunción si alguno de los dos resultados forma parte de los espectros continuos). La interpretación probabilística garantiza entonces que toda función de onda se puede expresar como combinación lineal de autofunciones simultáneas de \hat{A} y de \hat{B} y entonces existe una base de representación que es propia de A y de B simultáneamente. La afirmación recíproca es también cierta: si existe tal base de representación, entonces todo estado cuántico de la partícula se puede expresar como la superposición de autoestados (o quasi-autoestados) en los que A y B están simultáneamente definidos (o definidos a voluntad). Siendo estos estados realizables, se tiene inmediatamente la existencia de procesos de preparación de los mismos, procesos en los que entonces se han medido A y B con precisión arbitraria. En suma:

Dos observables A y B son compatibles si y sólo si existe una base de representación de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ formada por autofunciones comunes de los operadores \hat{A} y \hat{B} .

§ 3. Simbolicemos por $\Psi_{a,b,n}(\mathbf{r})$ a los elementos de esta base de representación, donde a y b indican que $\Psi_{a,b,n}(\mathbf{r})$ es autofunción de los operadores \hat{A} y \hat{B} simultáneamente y n es un posible índice de degeneración. Tenemos entonces que

$$\hat{A}\hat{B}\Psi_{a,b,n}(\mathbf{r}) = \hat{A}(b\Psi_{a,b,n}(\mathbf{r})) = b\hat{A}\Psi_{a,b,n}(\mathbf{r}) = ba\Psi_{a,b,n}(\mathbf{r})$$

y, análogamente, $\hat{B}\hat{A}\Psi_{a,b,n}(\mathbf{r}) = ab\Psi_{a,b,n}(\mathbf{r})$. Como el producto de números reales es commutativo tenemos que la actuación de $\hat{A}\hat{B}$ y $\hat{B}\hat{A}$ es la misma para todos los elementos de una base de representación de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ y, por tanto, para cualquier función de onda: si A y B son compatibles, entonces $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. La afirmación recíproca también es cierta. Consideremos una base de representación formada por autofunciones $\Phi_{a,i}(\mathbf{r})$ de \hat{A} , sin importar que a pertenezca al espectro continuo o al puntual. Entonces para cualquier función de esta base

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \quad \Rightarrow \quad \hat{A}\hat{B}\Phi_{a,i}(\mathbf{r}) = \hat{B}\hat{A}\Phi_{a,i}(\mathbf{r}) \quad \Rightarrow \quad \hat{A}(\hat{B}\Phi_{a,i}(\mathbf{r})) = a\hat{B}\Phi_{a,i}(\mathbf{r}),$$

donde $i = 1, 2, \dots, g_a$. La anterior igualdad nos dice que $\hat{B}\Phi_{a,i}(\mathbf{r})$ es autofunción de \hat{A} con autovalor a o, en términos matemáticos, que *todo subespacio propio del operador \hat{A} es invariante bajo la actuación del operador \hat{B}* . Tiene entonces sentido hablar de la *restricción* del operador \hat{B} sobre cada subespacio propio de \hat{A} y, usando resultados básicos del álgebra lineal, *todo subespacio propio de \hat{A} admite una base de representación formada por autofunciones de \hat{B}* . En consecuencia, hay una base de representación formada por autofunciones simultáneas de \hat{A} y \hat{B} , lo que garantiza la compatibilidad entre A y B . Como consecuencia:

A y B son compatibles $\Leftrightarrow \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$

(7.8)

§ 4. Uniendo estos tres resultados tenemos el *teorema de compatibilidad*:

TEOREMA DE COMPATIBILIDAD:

Las siguientes afirmaciones son equivalentes:

- (a) A y B pueden medirse simultáneamente con precisión arbitraria.
- (b) El producto de cualquier proyector sobre un subespacio propio de A con cualquier proyector sobre un subespacio propio de B es commutativo.
- (c) Existe una base de representación del espacio de los estados de una partícula formada por autoestados simultáneos de A y B .
- (d) El producto de \hat{A} y \hat{B} es commutativo: $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$.

§ 5. Las reglas de commutación canónicas garantizan que se puedan medir simultáneamente dos componentes cualesquiera de la posición, sucediendo lo mismo para el momento lineal. Tiene entonces sentido hablar de los observables vectoriales \mathbf{r} y \mathbf{p} .

Por ejemplo, como vimos en el capítulo anterior al analizar los teoremas de Ehrenfest, los commutadores entre las componentes de la posición y la energía cinética son

$$[\hat{x}, \hat{K}] = \frac{i\hbar}{M} \hat{p}_x \quad ; \quad [\hat{y}, \hat{K}] = \frac{i\hbar}{M} \hat{p}_y \quad ; \quad [\hat{z}, \hat{K}] = \frac{i\hbar}{M} \hat{p}_z, \quad (7.9)$$

por lo que K y cualquier componente de la posición no son compatibles.

Por el contrario, tal y como obtuvimos en el **ejemplo 6.j**,

$$[\hat{K}, \hat{L}_x] = [\hat{K}, \hat{L}_y] = [\hat{K}, \hat{L}_z] = 0 \quad (7.10)$$

por lo que *cualquier componente del momento angular es compatible con la energía cinética*. En general, toda magnitud física que sea función exclusiva de las componentes de \mathbf{L} será compatible con la energía cinética.

Pensemos ahora en el observable r , coordenada radial de la posición de la partícula. La regla de actuación de su operador representativo \hat{r} es

$$\hat{r}\Psi(\mathbf{r}) = r\Psi(\mathbf{r}).$$

Si expresamos la actuación de los operadores en coordenadas esféricas, como r es independiente de las otras dos coordenadas $\{\theta, \varphi\}$, \hat{r} va a commutar con todo operador que actúe únicamente sobre las coordenadas angulares. En consecuencia, como $\hat{L}_z = -i\hbar\partial/\partial\varphi$ tenemos inmediatamente que $[\hat{r}, \hat{L}_z] = \hat{0}$. Ahora bien, la elección del eje z es siempre arbitraria y no va a afectar al valor de la coordenada radial. Entonces,

$$[\hat{r}, \hat{L}_x] = [\hat{r}, \hat{L}_y] = [\hat{r}, \hat{L}_z] = \hat{0} \quad (7.11)$$

y *cualquier componente de \mathbf{L} es compatible con r* . Usando las propiedades de los commutadores tenemos que todo observable $g(r)$ dependiente de r es compatible con cualquier observable relacionado exclusivamente con el momento angular.

Para el momento angular no tiene sentido hablar del observable vectorial \mathbf{L} ya que, usando las reglas de commutación canónicas y las propiedades generales

del álgebra de conmutadores,

$$\begin{aligned}
 [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = \\
 &= [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x] - [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z] = \\
 &= [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z] = \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x + \hat{x}[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y = i\hbar(-\hat{y}\hat{p}_x + \hat{x}\hat{p}_y) \\
 &= i\hbar\hat{L}_z
 \end{aligned}$$

y procediendo de idéntico modo para las otras componentes de \mathbf{L} obtenemos las *reglas de conmutación para el momento angular*

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z \quad ; \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x \quad ; \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y \quad (7.12)$$

que muestran claramente la no compatibilidad entre L_x, L_y y L_z .

EJEMPLO 7.a. Incompatibilidad entre K y r

Consideremos una partícula puntual de masa M . ¿Son compatibles la energía cinética K y la coordenada radial r ?

Solución:

Partiendo de la expresión del laplaciano en coordenadas esféricas (cfr. el **Apéndice A**), el operador energía cinética es

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2Mr^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{\sin\theta}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right].$$

Como \hat{r} conmuta consigo mismo y con todo operador que actúe sólo sobre (θ, φ) ,

$$[\hat{r}, \hat{K}]\Psi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2M}\left[r\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial r}\right) - \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial(r\Psi(\mathbf{r}))}{\partial r}\right)\right]$$

y operando y simplificando

$$[\hat{r}, \hat{K}]\Psi(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{M}\left[\frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial r} + \frac{1}{r}\Psi(\mathbf{r})\right] = \frac{\hbar^2}{M}\left(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r}\right)\Psi(\mathbf{r}) = \frac{i\hbar}{M}\hat{p}_r\Psi(\mathbf{r}),$$

donde \hat{p}_r es el operador representativo de la componente radial del momento lineal (cfr. el **ejemplo 5.c**). Observe el paralelismo con los resultados (7.9). Vemos así que la energía cinética y la coordenada radial de una partícula no son magnitudes físicas compatibles.

§ 6. Pensemos ahora en un conjunto de magnitudes $\mathcal{O} = \{A, B, C, \dots\}$ todas ellas compatibles (medibles simultáneamente con total precisión). Diremos que \mathcal{O} es un **conjunto completo de observables compatibles (CCOC)** si para cualquier conjunto $\{a, b, c, \dots\}$ de valores espectrales existe a lo sumo una función de onda $\Psi_{a,b,c,\dots}(\mathbf{r})$ (salvo constante multiplicativa) que es autofunción simultánea de $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$ con estos autovalores. Obviamente si uno (o varios) de estos autovalores forma parte de un espectro continuo hablaríamos de una autofunción no normalizable.

Como consecuencia del teorema de compatibilidad, existe una base de representación formada por estas autofunciones comunes, cada una de las cuales está caracterizada únicamente por los autovalores $\{a, b, c, \dots\}$, que son así los **números cuánticos** en esta base de representación. Esta base de representación asociada al CCOC es entonces única salvo cambios triviales (multiplicación por constantes multiplicativas de módulo unidad o reordenación de las funciones).

Para una partícula que se mueve en tres dimensiones, el CCOC $\{x, y, z\}$ y el CCOC $\{p_x, p_y, p_z\}$ determinan las representaciones en posiciones y en momentos que ya conocemos: $\delta_{\mathbf{a}}(\mathbf{r})$ es autofunción (no normalizable) simultánea de los observables $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ mientras que $\theta_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ lo es de los $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$. Si la partícula se movie en una única dimensión, por convenio la determinada por el eje X , $\{x\}$ y $\{p_x\}$ serían sendos CCOC en sí mismos. En general, todo observable A con espectro no degenerado forma por sí mismo un CCOC.

El concepto de CCOC está directamente relacionado con el de preparación. Consideremos que la partícula está en un estado cuántico desconocido y que efectuamos sobre la misma una medida ideal simultánea de los observables de un CCOC $\{A, B, C, \dots\}$ con una incertidumbre de medida prácticamente despreciable. Si el resultado ha sido un conjunto de valores $\{a, b, c, \dots\}$ pertenecientes a los espectros puntuales de los observables del CCOC, la función de onda colapsada será única salvo constante multiplicativa irrelevante. Así, al existir una correspondencia única entre el resultado de la medida y el estado cuántico colapsado, la medición ideal de un CCOC equivale a un proceso de preparación completo.

§ 7. Supongamos una magnitud física A que sea una constante de movimiento. Puesto que toda constante del movimiento A commuta con H , de acuerdo con el teorema de compatibilidad es posible encontrar una base de representación formada simultáneamente por autofunciones de A y de H . Si para simplificar las expresiones suponemos que el espectro de estas dos magnitudes es puntual (si hubiese parte continua la generalización es inmediata), esta base estará compuesta

por funciones ortonormales $\Phi_{E,a,j}(\mathbf{r})$, donde el número cuántico E designa la autoenergía, a señala el autovalor de A , y j es un posible índice de degeneración. Entonces toda función de onda podrá escribirse como

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{E,a} \sum_j c_{E,a,j}(t) \Phi_{E,a,j}(\mathbf{r}) \quad \text{con} \quad c_{E,a,j}(t) = \langle \Phi_{E,a,j} | \Psi(t) \rangle,$$

y usando la expresión general de la solución de la ecuación de Schrödinger

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{E,a} \sum_j e^{-iEt/\hbar} c_{E,a,j}(0) \Phi_{E,a,j}(\mathbf{r}),$$

donde $c_{E,a,j}(0)$ son las coordenadas de $\Psi(\mathbf{r}, 0)$. Puesto que las autofunciones $\Phi_{E,a,j}(\mathbf{r})$ son ortonormales, la probabilidad de que *en cualquier instante de tiempo* se obtenga el resultado a al medir A en el estado cuántico $\Psi(\mathbf{r}, t)$ será

$$\Pr_A(a) = \frac{1}{\|\Psi\|^2} \sum_E \sum_j |c_{E,a,j}(t)|^2 = \frac{1}{\|\Psi\|^2} \sum_E \sum_j |c_{E,a,j}(0)|^2,$$

donde las sumas están extendidas sobre los números cuánticos correspondientes a los estados $|\Phi_{E,a,j}\rangle$ de la base de representación. En consecuencia, *si A es una constante del movimiento, no sólo los valores medios sino también las probabilidades de ocurrencia en una medida de A son constantes en el tiempo.*

En todo caso conviene recalcar que si se efectúa una medida ideal sobre la partícula la transformación que sufre su estado cuántico ya no es determinista, sino estocástica, y bien puede ocurrir que tras tal medida haya cambiado el valor medio de una constante del movimiento.

La compatibilidad entre H y cualquier constante del movimiento implica que *todo CCOC en el que forme parte la energía está compuesto por constantes del movimiento*. Esto confiere un carácter especial a este tipo de CCOC's.²

EJEMPLO 7.b. Probabilidades de ocurrencia para un CCOC

Una partícula puntual de masa M se mueve bajo la acción de una fuerza conservativa tal que $\{H, L_z\}$ es un CCOC. Designemos como $\Phi_{E,m}(\mathbf{r})$ a una autofunción simultánea normalizada de \hat{H} y \hat{L}_z con autovalores E y $m\hbar$, respectivamente. En el instante $t = 0$, la función de onda de la partícula es

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{2} \Phi_{\varepsilon,0}(\mathbf{r}) - \frac{i}{2} \Phi_{2\varepsilon,0}(\mathbf{r}) + \frac{1}{\sqrt{2}} \Phi_{2\varepsilon,+1}(\mathbf{r})$$

² Fíjese que por una afortunada coincidencia CCOC también es la abreviatura de *conjunto completo de operadores que comutan*.

siendo inmediato comprobar que $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ está normalizada.

- Obtenga el valor medio y la incertidumbre de la energía H .
- Al medir la componente z del momento angular L_z , ¿qué valores pueden obtenerse y con qué probabilidad?
- En un cierto instante t medimos la energía de la partícula, obteniendo como resultado el valor 2ε . Si tal medida es ideal, ¿cuál es la función de onda colapsada de la partícula? ¿Cómo ha afectado la medida a las probabilidades de ocurrencia en una medida de L_z ?

Solución:

- a) De manera inmediata,

$$\langle H \rangle = \left| \frac{1}{2} \right|^2 \varepsilon + \left| \frac{-i}{2} \right|^2 2\varepsilon + \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 2\varepsilon = \frac{7}{4} \varepsilon$$

mientras que

$$\langle H^2 \rangle = \left| \frac{1}{2} \right|^2 \varepsilon^2 + \left| \frac{-i}{2} \right|^2 (2\varepsilon)^2 + \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 (2\varepsilon)^2 = \frac{13}{4} \varepsilon^2.$$

Por tanto, la incertidumbre de la energía es

$$\Delta H = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} = \sqrt{\frac{13}{4} \varepsilon^2 - \left(\frac{7}{4} \varepsilon \right)^2} = \frac{\sqrt{3}}{4} \varepsilon.$$

- b) Por inspección directa, al medir L_z sólo se pueden obtener los valores 0 y $+\hbar$. Las probabilidades de ocurrencia respectivas son

$$\Pr_{L_z}(0) = \left| \frac{1}{2} \right|^2 + \left| \frac{-i}{2} \right|^2 = \frac{1}{2} \quad ; \quad \Pr_{L_z}(\hbar) = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2}$$

es decir, del 50 %.

- c) En un instante t , la función de onda de la partícula es

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{e^{-i\omega t}}{2} \Phi_{\varepsilon,0}(\mathbf{r}) - \frac{ie^{-2i\omega t}}{2} \Phi_{2\varepsilon,0}(\mathbf{r}) + \frac{e^{-2i\omega t}}{\sqrt{2}} \Phi_{2\varepsilon,+1}(\mathbf{r}),$$

donde $\omega \equiv \varepsilon/\hbar$. Si en ese instante medimos H obteniendo el resultado 2ε , de acuerdo con el postulado de reducción de von Neumann, la función de onda resultante ha de ser proporcional a

$$\Psi_{\text{después}}(\mathbf{r}, t) = -\frac{ie^{-2i\omega t}}{2} \Phi_{2\varepsilon,0}(\mathbf{r}) + \frac{e^{-2i\omega t}}{\sqrt{2}} \Phi_{2\varepsilon,+1}(\mathbf{r}),$$

función de onda que no está normalizada.

Como

$$\|\Psi_{\text{después}}\|^2 = \left| -\frac{ie^{-2i\omega t}}{2} \right|^2 + \left| \frac{e^{-2i\omega t}}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{4} + \frac{1}{2} = \frac{3}{4}$$

tenemos ahora que las probabilidades de ocurrencia en una medida de L_z serían

$$\Pr_{L_z}(0) = \frac{1}{\|\Psi_{\text{después}}\|^2} \left| \frac{-ie^{-2i\omega t}}{2} \right|^2 = \frac{1}{3}$$

$$\Pr_{L_z}(\hbar) = \frac{1}{\|\Psi_{\text{después}}\|^2} \left| \frac{e^{-2i\omega t}}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{2}{3}$$

que se han visto así afectadas por la medida de la energía.

7.3. RELACIÓN DE INCERTIDUMBRE GENERALIZADA

§ 1. Consideremos ahora dos observables A y B que no son compatibles. El operador $\hat{C} \equiv i[\hat{A}, \hat{B}]$ es autoadjunto, y por consiguiente representa un cierto observable C . Se puede demostrar el siguiente resultado fundamental:

Dados dos observables representados por los operadores \hat{A} y \hat{B} , para cualquier estado realizable $|\Psi\rangle$ se cumple que

$$(\Delta A)_{|\Psi\rangle} (\Delta B)_{|\Psi\rangle} \geq \frac{1}{2} \left| \langle \hat{C} \rangle_{|\Psi\rangle} \right| \quad \text{con} \quad \hat{C} = i[\hat{A}, \hat{B}], \quad (7.13)$$

y esta desigualdad recibe el nombre **relación de incertidumbre generalizada**.

Esta relación nos informa sobre las propiedades de las distribuciones de probabilidad asociadas a las medidas de dos observables \hat{A} y \hat{B} en un estado. En particular, si conocemos el valor de la incertidumbre de uno de ellos la del otro está acotada inferiormente.

La demostración es algo técnica pero por su importancia merece la pena exponerla en detalle. Fijada la función de onda $\Psi(\mathbf{r})$, que supondremos normalizada, definamos los operadores autoadjuntos

$$\hat{A}' \equiv \hat{A} - \langle A \rangle \hat{I} ; \quad \hat{B}' \equiv \hat{B} - \langle B \rangle \hat{I}.$$

Utilizándolos, la evaluación de las incertidumbres de A y B es

$$(\Delta A)_{|\Psi\rangle} = \langle \hat{A}'\Psi | \hat{A}'\Psi \rangle^{1/2} ; \quad (\Delta B)_{|\Psi\rangle} = \langle \hat{B}'\Psi | \hat{B}'\Psi \rangle^{1/2}. \quad (7.14)$$

Por otra parte, como todo operador commuta con $\lambda\hat{I}$, es inmediato ver que $[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}', \hat{B}']$ por lo que, usando que \hat{A}' y \hat{B}' son autoadjuntos y la igualdad $\langle\Psi|\Phi\rangle = \langle\Phi|\Psi\rangle^*$,

$$\begin{aligned} \langle\Psi|[\hat{A}, \hat{B}]\Psi\rangle &= \langle\Psi|[\hat{A}', \hat{B}']\Psi\rangle = \langle\Psi|\hat{A}'\hat{B}'\Psi\rangle - \langle\Psi|\hat{B}'\hat{A}'\Psi\rangle = \\ &= \langle\hat{A}'\Psi|\hat{B}'\Psi\rangle - \langle\hat{B}'\Psi|\hat{A}'\Psi\rangle = 2\operatorname{Im}\left(\langle\hat{A}'\Psi|\hat{B}'\Psi\rangle\right). \end{aligned}$$

Ahora bien, para cualquier complejo z se cumple que $|z| \geq |\operatorname{Im}(z)|$ y, por tanto,

$$|\langle\Psi|[\hat{A}, \hat{B}]\Psi\rangle| \leq 2|\langle\hat{A}'\Psi|\hat{B}'\Psi\rangle| \leq 2\langle\hat{A}'\Psi|\hat{A}'\Psi\rangle^{1/2}\langle\hat{B}'\Psi|\hat{B}'\Psi\rangle^{1/2},$$

donde hemos hecho uso de la desigualdad de Schwarz. Usando (7.14) y que $|i| = 1$ queda que

$$\frac{1}{2}|\langle\Psi|i[\hat{A}, \hat{B}]\Psi\rangle| \leq (\Delta A)_{|\Psi\rangle}(\Delta B)_{|\Psi\rangle},$$

que es la relación de incertidumbre generalizada.

Veamos un ejemplo que ilustra una de las consecuencias de la relación de incertidumbre generalizada.

EJEMPLO 7.c. Valores esperados de L e incertidumbres

Pensemos en una partícula de masa M que se mueve en el espacio. Demuestre que si $\langle L_z \rangle \neq 0$ la partícula no puede estar ni en un autoestado de L_x ni en uno de L_y .

Solución:

Sabemos que $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$ (cfr. la ecuación 7.12). La relación de incertidumbre generalizada implica que

$$(\Delta L_x)(\Delta L_y) \geq \frac{1}{2}\hbar|\langle\hat{L}_z\rangle|$$

Por hipótesis $|\langle\hat{L}_z\rangle| > 0$, de donde $(\Delta L_x)(\Delta L_y) > 0$ y ninguna de las dos incertidumbres puede ser cero, quedando así probada la afirmación.

§ 2. A la luz de la relación de incertidumbre generalizada (7.13) el *principio de incertidumbre de Heisenberg* queda reflejado en las *reglas de commutación*

canónicas que ya vimos en la **sección 5.1**, ecuación (5.6):

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar\hat{I} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} (\Delta x)(\Delta p_x) \geq \hbar/2 \\ (\Delta y)(\Delta p_y) \geq \hbar/2 \\ (\Delta z)(\Delta p_z) \geq \hbar/2 \end{cases} \quad (7.15)$$

Estas reglas, pues, no sólo determinan la correspondencia entre la física clásica y la cuántica, sino que constituyen una formulación alternativa del principio de incertidumbre.

En formulaciones axiomáticas de la mecánica cuántica no se parte del postulado de De Broglie sino de las reglas de commutación canónicas, ya que a partir de éstas (usando argumentos de simetría) se puede llegar a la asignación básica de operadores posición y momento lineal que ya vimos en la **sección 5.1**.

- Las reglas de commutación canónicas implican además necesariamente que los espectros de los operadores de posición y momento lineal han de ser exclusivamente continuos y, por evidentes razones de simetría, iguales a todo \mathbb{R} . Efectivamente, supongamos que existe un autofunción *normalizada* $\Phi_a(\mathbf{r})$ de \hat{x} con autovalor a . Entonces tendríamos que

$$\begin{aligned} i\hbar &= \langle \Phi_a | [\hat{x}, \hat{p}_x] \Phi_a \rangle = \langle \Phi_a | \hat{x}\hat{p}_x \Phi_a \rangle - \langle \Phi_a | \hat{p}_x\hat{x} \Phi_a \rangle = \\ &= \langle \hat{x}\Phi_a | \hat{p}_x \Phi_a \rangle - \langle \Phi_a | \hat{p}_x\hat{x} \Phi_a \rangle = a\langle \Phi_a | \hat{p}_x \Phi_a \rangle - a\langle \Phi_a | \hat{p}_x \Phi_a \rangle = 0 \end{aligned}$$

lo que resulta en una contradicción flagrante: no puede existir tal autofunción $\Phi_a(\mathbf{r})$. De idéntica manera se demuestra que \hat{y}, \hat{z} y los tres operadores correspondientes a las componentes del momento lineal de la partícula no pueden tener espectro puntual.

7.4. INCERTIDUMBRE ENERGÍA-TIEMPO

§ 1. Consideremos una partícula de masa M cuya dinámica está definida por el operador hamiltoniano \hat{H} . Dada una cierta magnitud A , definimos su *tiempo propio de evolución* en un estado $|\Psi(t)\rangle$ como la cantidad,

$$\tau_A = \frac{(\Delta A)_t}{\left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle_t \right|} \quad (7.16)$$

que depende del estado considerado $|\Psi(t)\rangle$.

Para interpretar físicamente τ_A , escribamos en primera aproximación que

$$\langle \hat{A} \rangle_{t+\tau_A} \simeq \langle \hat{A} \rangle_t + \tau_A \frac{d\langle \hat{A} \rangle_t}{dt}$$

y usando la definición (7.16)

$$|\langle \hat{A} \rangle_{t+\tau_A} - \langle \hat{A} \rangle_t| \sim (\Delta A)_t.$$

Por tanto, τ_A es el tiempo que es necesario que transcurra para que el valor medio de la magnitud A en un estado $|\Psi(t)\rangle$ cambie en una cantidad del orden de su incertidumbre. En términos más gráficos, τ_A define la escala natural de tiempos en los que el valor medio cambia *apreciablemente*, es decir, en los que sufre una variación mayor que su incertidumbre estadística.

Si ahora usamos la ecuación (6.60) de evolución de valores medios,

$$\tau_A = \hbar \frac{(\Delta A)_t}{\left| \left\langle i[\hat{H}, \hat{A}] \right\rangle_t \right|}$$

y utilizando la relación de incertidumbre generalizada, para cualquier estado cuántico $|\Psi(t)\rangle$ y cualquier magnitud A

$$\tau_A \geq \frac{\hbar}{2(\Delta H)}$$

(7.17)

donde hemos excluido la dependencia temporal explícita puesto que H es una constante del movimiento.

En ocasiones, la desigualdad (7.17) recibe el nombre de ***relación de incertidumbre energía-tiempo***, a pesar de que lo que señala es una cota inferior estricta al tiempo característico de evolución de *cualquier* magnitud en un estado cuántico.³

§ 2. En general, el tiempo propio de evolución de una magnitud puede cambiar durante la evolución de la partícula. A su vez, τ_A dependerá muy sensiblemente de

³ No es, pues, una relación que haya de ser obedecida por la incertidumbre de dos magnitudes físicas: el tiempo no es un observable cuántico ya que *no podemos medir* “el tiempo de una partícula”, aunque con la ayuda de “relojes” sí podemos establecer un patrón para determinar *la* evolución temporal (entendida como un todo).

la magnitud física que estemos considerando pero, en cualquier caso, es legítimo definir el *tiempo propio de evolución del estado* como

$$\tau_{|\Psi\rangle} = \inf \{ \tau_A \} = \inf \left\{ \hbar \frac{\left(\langle \Psi(t) | \hat{A}^2 | \Psi(t) \rangle - \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle^2 \right)^{1/2}}{|i \langle \Psi(t) | [\hat{H}, \hat{A}] | \Psi(t) \rangle|} \right\} \quad (7.18)$$

donde hemos supuesto que la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ está normalizada y que el ínfimo se evalúa sobre todas las magnitudes observables posibles en cualquier instante de tiempo. De esta manera, la relación de incertidumbre energía-tiempo también puede escribirse como

$$\tau_{|\Psi\rangle} \times (\Delta H) \geq \frac{\hbar}{2} \quad (7.19)$$

y, de forma figurada, podemos decir que *cuanto mayor sea la incertidumbre de la energía en un estado más rápido evoluciona éste ($\tau_{|\Psi\rangle}$ es, pues, pequeño) y viceversa*. En particular, si $\Delta H = 0$ tendremos que $\tau_{|\Psi\rangle} = \infty$ y el estado es estacionario. La relación de incertidumbre energía-tiempo cuantifica con más precisión el hecho (ya conocido por nosotros) de que cuanto menor sea la incertidumbre de la energía más cercano está el estado de ser estacionario. Cualquier otra interpretación de (7.19) está fuera de lugar.⁴

7.5. LOS POSTULADOS DE LA FÍSICA CUÁNTICA

§ 1. Conocidos los fundamentos de la teoría cuántica ya estamos en disposición de presentar muy superficialmente su formulación axiomática. Estos *postulados* son muy generales pero establecen los cimientos sobre los que se construye toda la teoría. Cómo se enuncien dependerá mucho de los autores y del peso se quiera conceder a los aspectos más matemáticos pero, en general, siguen un esquema parecido al que ahora se presenta.

- **POSTULADO I: Principio de superposición (estados):**

Los estados cuánticos de un sistema físico se representan por vectores

⁴ Por ejemplo, es bastante corriente encontrar en la literatura interpretaciones en las que $\tau_{|\Psi\rangle}$ es el tiempo necesario para efectuar una medida de la energía del sistema, por lo que cuanto mayor sea ΔH menos tiempo requerirá culminar tal medida. Esto es absurdo ya que nada tiene que ver lo uno con lo otro.

de estado dependientes del tiempo $|\Psi(t)\rangle$, pertenecientes a un espacio de Hilbert \mathcal{E} llamado *de los estados del sistema*. Dos vectores de estado proporcionales entre sí representan el mismo estado físico.

- **POSTULADO II: Principio de superposición (magnitudes)**

Toda magnitud físicamente medible u observable A está representada por un operador lineal autoadjunto \hat{A} definido en el espacio de los estados \mathcal{E} .

- **POSTULADO III: Principio de correspondencia**

Para garantizar la correspondencia formal con sus análogas clásicas, las coordenadas cartesianas de la posición y el momento lineal de una partícula están representadas por operadores que cumplen las reglas de commutación canónicas:

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad ; \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{i,j}.$$

- **POSTULADO IV: Principio de indistinguibilidad**

Si en el sistema físico hay varias partículas idénticas entre sí, el estado cuántico no puede distinguirlas (o etiquetarlas).⁵

- **POSTULADO V: Evolución temporal lineal determinista**

La evolución temporal del estado cuántico está regida por un operador autoadjunto \hat{H} , llamado hamiltoniano del sistema, a través de la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle.$$

- **POSTULADO VI: Interpretación probabilística**

La probabilidad de ocurrencia en una medida de una magnitud observable A se obtiene a partir del vector del estado $|\Psi(t)\rangle$ en el que se encuentra el sistema. En concreto, el promedio probabilístico de los posibles resultados de la medida de A es

$$\langle A \rangle_t = \frac{1}{\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle} \langle \Psi(t) | \hat{A} \Psi(t) \rangle , \quad \text{con} \quad |\hat{A}\Psi(t)\rangle \equiv \hat{A}|\Psi(t)\rangle$$

y donde $\langle \cdots | \cdots \rangle$ simboliza el producto escalar en el espacio de los estados.

Los cuatro primeros postulados establecen cómo se describen los sistemas cuánticos y sus magnitudes, de ahí la designación del tercero aun a pesar de

⁵ Este principio está relacionado directamente con el de exclusión de Pauli y su estudio se abordará en la asignatura *Física Cuántica II*.

su estrecha relación con el principio de incertidumbre. El postulado V define la dinámica del sistema: lineal, determinista y unitaria (preserva la similitud entre estados). El postulado VI, finalmente, establece el carácter probabilístico de los resultados de una medida. No hay contradicción con la naturaleza determinista de la evolución cuántica ya que la información que proporciona la función de onda (el vector de estado) es incompleta desde un punto de vista clásico.

El sistema físico queda definido entonces por su espacio de los estados y por el operador hamiltoniano. El espacio de los estados puede ser isomorfo a $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ (partícula que se mueve en N dimensiones espaciales), $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ (dos partículas que se mueven en N dimensiones espaciales), etc. Aun así, hay gran flexibilidad: escogida una base de representación algebraica, los dos espacios que hemos citado son isomorfos a \mathbb{C}^∞ . Lo que importa realmente es el significado físico de los vectores de estado de la base ya que las reglas de actuación de los operadores representativos se definirán en consecuencia, aunque respetando el postulado III.

§ 2. Estos seis postulados sirven para estudiar cualquier fenómeno que siga el esquema “preparación + evolución + medida”. Ahora bien, si la medida ha sido ideal y admitimos que el proceso físico subyacente es tan complejo que no se puede describir mediante una ecuación de tipo Schrödinger para la partícula, el postulado de reducción (**sección 7.1**) debe también incluirse “a mano” aunque guiados por la lógica: dos medidas ideales consecutivas de la misma magnitud deben dar el mismo resultado. El “edificio” de la física cuántica debe completarse así con el

▪ **POSTULADO VII: Reducción de un estado cuántico**

Si sobre un sistema cuyo estado cuántico es $|\Psi_{\text{antes}}\rangle$ se efectúa una medida ideal de una magnitud observable A que ha dado el resultado “el valor de A está dentro del intervalo real \mathbb{S} ”, el estado tras la medida es

$$|\Psi_{\text{después}}\rangle = \hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}} |\Psi_{\text{antes}}\rangle$$

donde $\hat{\mathcal{P}}_{\mathbb{S}}$ es el proyector ortogonal sobre el subespacio propio $\mathcal{W}_{\mathbb{S}}$ formado por todos los vectores de estado en los cuales una medida de A proporciona con toda seguridad un resultado contenido en \mathbb{S} .

introducido en 1932 por el gran matemático John von Neumann en su obra *Los principios matemáticos de la mecánica cuántica*.⁶

⁶ El título original alemán es “Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik”. Curiosamente, esta obra clave de la física teórica del siglo XX se tradujo al castellano antes de que apareciese su primera edición en inglés (véase la bibliografía).

El postulado de reducción se basa en que el aparato de medida \mathcal{M} induce una transformación $|\Psi_{\text{antes}}\rangle \rightarrow |\Psi_{\text{después}}\rangle$ que, como ya hemos dicho, es incompatible con las leyes de evolución cuántica basadas en la ecuación de Schrödinger. En efecto, aunque la reducción es lineal, ni es determinista ni unitaria. La coexistencia de dos tipos de evoluciones dinámicas esencialmente diferentes es el punto de partida del llamado **problema de la medida** que describiremos muy brevemente en la siguiente sección.

7.6. EL PROBLEMA DE LA MEDIDA

§ 1. Para no complicar artificialmente la discusión supongamos que deseamos efectuar una medida ideal de un observable A sobre un sistema físico microscópico cuyo espacio de Hilbert de los estados \mathcal{E}_P tiene dimensión dos (llamaremos “partícula” a tal sistema). Usando la notación abstracta de Dirac, una base ortonormal de \mathcal{E}_P está formada por los vectores de estado $|\psi_+\rangle$ y $|\psi_-\rangle$ en los cuales A toma los valores definidos a_+ y a_- , respectivamente. La medida de A la efectuaremos con un dispositivo \mathcal{M} en el que hay una “aguja indicadora” con tres posiciones: neutra (estado $|\Phi_0\rangle$, no se ha producido interacción entre \mathcal{M} y la partícula), positiva (estado $|\Phi_+\rangle$, el resultado de la medida es $A = +a$) y negativa (estado $|\Phi_-\rangle$, la medida ha dado $A = -a$). Si las leyes de la mecánica cuántica *también* son aplicables al propio aparato de medida \mathcal{M} , su estado estará descrito por un ket perteneciente a un espacio de Hilbert \mathcal{E}_M y la magnitud física “posición de la aguja” ha de ser un observable. Debido a la compleja estructura del dispositivo \mathcal{M} , el vector de estado representativo será muy complicado (piense, por ejemplo, en una función de onda dependiente de los miles de variables correspondientes a los múltiples grados de libertad internos de \mathcal{M}) pero, como veremos a continuación, esto no va a ser relevante. Como corresponde a cualquier sistema físico divisible en varios subsistemas, el estado conjunto de la partícula y el aparato \mathcal{M} se describe mediante un elemento del espacio de Hilbert producto tensorial $\mathcal{E}_P \otimes \mathcal{E}_M$.

El proceso de medida se inicia con el aparato en un cierto estado $|\Phi_0\rangle$ correspondiente a la posición neutra de la aguja indicadora. Si el estado inicial de la partícula fuese $|\psi_+\rangle$ la medida da con toda probabilidad el resultado $A = a_+$, siendo el proceso cuántico:

$$|\psi_+\rangle \otimes |\Phi_0\rangle \xrightarrow{\text{ES}} |\psi_+\rangle \otimes |\Phi_+\rangle.$$

Aquí ES nos indica la evolución debida a la ecuación de Schrödinger y $|\Phi_+\rangle$ es un estado con una dependencia determinista del estado inicial $|\psi_+\rangle \otimes |\Phi_0\rangle$ en el que

la aguja está en la posición +. Por el contrario, si el estado inicial del aparato es $|\Phi_0\rangle$ pero el de la partícula es $|\psi_-\rangle$, la evolución será

$$|\psi_-\rangle \otimes |\Phi_0\rangle \xrightarrow{\text{ES}} |\psi_-\rangle \otimes |\Phi_-\rangle$$

donde ahora $|\Phi_-\rangle$ es un estado de \mathcal{M} en el que la aguja marca -. Pero dado que las leyes de la mecánica cuántica son lineales, si el estado inicial de la partícula es la superposición $|\psi\rangle = \alpha|\psi_+\rangle + \beta|\psi_-\rangle$, entonces

$$|\psi\rangle \otimes |\Phi_0\rangle \xrightarrow{\text{ES}} \alpha|\psi_+\rangle \otimes |\Phi_+\rangle + \beta|\psi_-\rangle \otimes |\Phi_-\rangle \quad (7.20)$$

y el sistema conjunto termina en un estado entrelazado igual a una superposición coherente de dos estados. Es así evidente que si el estado inicial de la partícula es una superposición, toda evolución descrita por una ecuación de Schrödinger es incompatible con la culminación de la medida, ya que (7.20) nos indica que ni la partícula está en un autoestado de A ni la aguja marca *un* resultado definido. Sin embargo, el postulado de reducción afirma que hay dos posibles transformaciones:

$$|\psi\rangle \otimes |\Phi_0\rangle \xrightarrow{\text{red}} \begin{cases} |\psi_+\rangle \otimes |\Phi_+\rangle & \text{con probabilidad } |\alpha|^2 \\ |\psi_-\rangle \otimes |\Phi_-\rangle & \text{con probabilidad } |\beta|^2 \end{cases}$$

El problema es entonces conocer cómo y cuándo se produce la reducción desde el estado (7.20), esto es,

$$\alpha|\psi_+\rangle \otimes |\Phi_+\rangle + \beta|\psi_-\rangle \otimes |\Phi_-\rangle \xrightarrow{\text{red}} \begin{cases} |\psi_+\rangle \otimes |\Phi_+\rangle & \text{con probabilidad } |\alpha|^2 \\ |\psi_-\rangle \otimes |\Phi_-\rangle & \text{con probabilidad } |\beta|^2 \end{cases} \quad (7.21)$$

o, en términos más técnicos, cuál es el proceso que explica la transformación de la superposición **coherente** $\alpha|\psi_+\rangle \otimes |\Phi_+\rangle + \beta|\psi_-\rangle \otimes |\Phi_-\rangle$ en una mezcla **incoherente** de los estados $|\psi_+\rangle \otimes |\Phi_+\rangle$ y $|\psi_-\rangle \otimes |\Phi_-\rangle$ con probabilidades respectivas $|\alpha|^2$ y $|\beta|^2$, respectivamente.⁷

§ 2. Se han propuesto numerosas soluciones al problema de la medida. Sin ánimo de ser exhaustivos podemos dividirlas en cinco grandes grupos, que abarcan desde posturas que niegan la propia existencia del problema hasta otras, más contemporáneas, que describen el colapso del estado cuántico como un proceso

⁷ Si un sistema está descrito por una mezcla incoherente de dos estados, sabemos que el estado del sistema es uno de los dos pero no cuál de ellos.

complejo pero perfectamente explicable usando las herramientas de la mecánica cuántica “estándar”.

a) *La interacción entre aparato y sistema cuántico no puede estudiarse de acuerdo con las leyes de la mecánica cuántica.* Bajo este punto de vista el problema de la medida no es tal, sino la plasmación directa de este hecho. Las leyes de la mecánica cuántica se limitan entonces a predecir probabilidades de ocurrencia y, en cierto modo, la reducción es un proceso subjetivo que se produce en la mente del observador consecuencia de la adquisición de información proporcionada por la medida. El estado cuántico no tiene pues naturaleza física propia ya que es un “constructo” mental que se infiere a partir de los estados macroscópicos clásicos de los dispositivos de preparación y de medida. Esta era esencialmente la idea que von Neumann defendió al proponer su postulado. Los avances tanto experimentales como teóricos (desarrollados sobre todo a partir de 1980) sugieren que esta concepción es errónea, ya que es posible formular modelos de procesos de medida experimentalmente realizable que se ajustan perfectamente a los principios básicos de la mecánica cuántica

b) *La evolución cuántica únicamente es lineal para sistemas simples aislados.* Esta solución, defendida antaño por muchos autores incluyendo a Eugene Wigner, implica que la ecuación de Schrödinger para sistemas complejos debe transformarse si nuestro sistema físico tiene un gran número de grados de libertad, incluyendo a tal fin términos que rompen la linealidad del operador hamiltoniano de evolución. Siendo una propuesta atractiva, los hechos experimentales muestran que el carácter lineal del mundo cuántico es un hecho difícilmente refutable.

c) *La teoría cuántica no es completa.* Ya sabemos que el estado cuántico proporciona una información limitada desde una perspectiva clásica. Bajo las llamadas *interpretaciones estadísticas* tal incompletitud es una característica distintiva de la teoría cuántica: sus predicciones son *estadísticamente* correctas pero hay aspectos de cada sistema físico individual que es incapaz de contemplar. La multiplicidad de resultados de una medida es una mera consecuencia de este carácter estadístico ya que en realidad el proceso de medida es completamente determinista. Sin embargo y tal como sucede con las soluciones del tipo anterior, los resultados experimentales apoyan firmemente el carácter último de la teoría cuántica.

d) *La descripción cuántica de un sistema físico incluye implícitamente otros elementos externos.* Según algunos autores como Everett, de Witt, Wheeler y Lockwood todo sistema físico microscópico está correlacionado con diferentes realizaciones del “universo” (teoría de los muchos mundos) o de la mente del

observador (teoría de las muchas conciencias). De acuerdo con Everett, cada vez que se realiza una medida el universo se desdobra en tantos universos paralelos como posibles resultados pueda dar la medida o, equivalente, en tantos universos como componentes tiene el estado entrelazado dado en (7.20). Así no se produce en realidad un colapso del estado cuántico, sino que cada componente sigue existiendo pero en diferentes “mundos paralelos” que no interactúan entre sí. En la teoría de las muchas conciencias, a cada componente del “multiverso” de Everett se le asigna un carácter subjetivo dependiente del observador. Estas hipótesis han recibido mucha atención debido a su evidente consistencia lógica.

e) *El colapso del estado es una consecuencia de que los sistemas cuánticos no están completamente aislados del entorno.* Esta es la postura que actualmente se considera como la más plausible. La pérdida de coherencia en la transformación (7.21) está inducida por una interacción con el entorno que rodea al sistema partícula+aparato de medida. Por tanto, la complejidad del aparato de medida no es la única razón que explique el colapso del estado sino que las perturbaciones procedentes del exterior juegan un papel esencial. El postulado de reducción es entonces una aproximación efectiva a un problema mucho más complicado pero que puede analizarse utilizando exclusivamente las leyes de la mecánica cuántica recogidas en los seis postulados que enunciaremos en la sección anterior. Una exposición, siquiera superficial, de este tipo de teorías requiere conocer cómo se describen formalmente mezclas incoherentes y, al menos, los rudimentos de la teoría de sistemas cuánticos abiertos.

PROBLEMAS PROPUESTOS

PROBLEMA 7.1. *La descomposición espectral*

Dado un observable A cuyo operador representativo es \hat{A} , demuestre que

$$\hat{I} = \sum_{a \in \sigma_p} \hat{\mathcal{P}}_a + \int_{\sigma_c} \hat{\mathcal{P}}(\alpha) d\alpha \quad (7.22)$$

$$\hat{A} = \sum_{a \in \sigma_p} a \hat{\mathcal{P}}_a + \int_{\sigma_c} \alpha \hat{\mathcal{P}}(\alpha) d\alpha \quad (7.23)$$

siendo $\hat{\mathcal{P}}_a$ y $\hat{\mathcal{P}}(\alpha)$ los proyectores sobre los subespacios propios \mathcal{W}_a y \mathcal{W}_α con $a \in \sigma_p(A)$ y $\alpha \in \sigma_c(A)$. A estas dos expresiones se las conoce como *descomposición espectral* de la identidad y del operador \hat{A} , respectivamente.

PROBLEMA 7.2. *Otras reglas de conmutación*

Consideremos una partícula que se mueve en una dimensión espacial.

- a) Demuestre que

$$[\hat{x}^n, \hat{p}_x] = i\hbar \hat{x}^{n-1} \quad ; \quad [\hat{p}_x^n, \hat{x}] = -i\hbar \hat{p}_x^{n-1}$$

donde n es un número natural cualquiera mayor o igual que uno.

- b) Como consecuencia, si $g(u)$ es una función analítica y $f(u)$ su derivada, pruebe que

$$[g(\hat{x}), \hat{p}_x] = i\hbar f(\hat{x}).$$

¿Cuál será el valor del comutador $[g(\hat{p}_x), \hat{x}]$.

PROBLEMA 7.3. *Compatibilidad del momento angular*

Pensemos en una partícula puntual de masa M cuyo momento angular es \mathbf{L} .

- a) Demuestre que es posible una medida simultánea con precisión arbitraria de L_z y z . Pruebe a su vez que L_z y p_z son compatibles.
- b) Sin embargo demuestre que L_z no es compatible con los observables $\{x, y, p_x, p_y\}$. Generalice los resultados a las otras dos componentes de \mathbf{L} .
- c) Pruebe que la componente radial del momento lineal p_r es compatible con cualquier componente del momento angular.
- d) Si $r_c = (x^2 + y^2)^{1/2}$, verifique que r_c y L_z son compatibles.

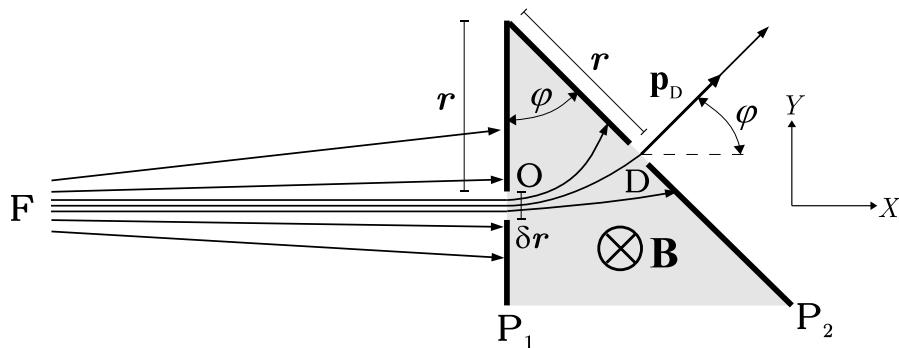


Figura 7-1. Dispositivo colimador para seleccionar partículas con un momento lineal bien definido (**problema 7.5**)

PROBLEMA 7.4. Un CCOC para una partícula puntual

Demuestre que los observables $\{r_c, L_z, z\}$, donde $r_c \equiv (x^2 + y^2)^{1/2}$, es un conjunto completo de observables compatibles para una partícula puntual de masa M .

Sugerencia: trabaje en coordenadas cilíndricas.

PROBLEMA 7.5. Una medida ideal de \mathbf{p}

Puesto que las componentes de \mathbf{p} son compatibles es natural preguntarse cómo se pueden medir simultáneamente con precisión arbitraria. Como ilustración consideremos el dispositivo bidimensional de la **FIG. 7-1**. Un foco F lejano emite partículas de masa M y carga $q > 0$ con momentos lineales aleatorios pero muy bien definidos para cada partícula. Estas partículas impactan contra una pantalla P_1 en la que se ha efectuado un orificio O , y como F está muy alejado podemos admitir que aquellas que hayan atravesado O tienen un momento lineal orientado en la dirección OX , aunque su módulo es variable. En la región $x > 0$ hay un campo magnético uniforme $\mathbf{B} = -Bu_z$ que hace que las partículas describan una circunferencia cuyo radio depende del módulo de su momento lineal. Por tanto, si situamos una segunda pantalla P_2 en la que hay una abertura D situada a una distancia r de la intersección entre P_1 y P_2 , únicamente atravesarán tal abertura las partículas que hayan descrito una trayectoria circular de radio r .

- a) Demuestre que, clásicamente, las partículas a la salida de D tienen un momento lineal $\mathbf{p}_D = (qBr \cos \varphi)\mathbf{u}_x + (qBr \sin \varphi)\mathbf{u}_y$.

El valor de \mathbf{p}_D puede cambiarse a voluntad variando la intensidad del campo magnético y el ángulo φ , pero \mathbf{p}_D no está libre de indefinición. Si δr es la longitud característica de los orificios O y D entonces el radio r de la trayectoria de la partícula tendrá una incertidumbre de ese mismo orden de magnitud que se propaga directamente a \mathbf{p}_D . Así, la incertidumbre relativa en las componentes de \mathbf{p}_D será en principio del orden de $\delta r/r$.

- b) ¿Cuál es la estrategia correcta para conseguir valores de \mathbf{p}_D muy bien definidos, disminuir δr o construir el dispositivo con un valor de r suficientemente grande?
- c) Para un valor de r fijo, estime la anchura δr óptima para obtener partículas colimadas con la mejor resolución posible en su momento lineal.

PROBLEMA 7.6. (!!) (*) *Medidas en estados entrelazados*

Pensemos en un sistema compuesto por dos partículas distinguibles cuyas posiciones son \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 , respectivamente, y simbolicemos por $\Psi_m(\mathbf{r}_i)$ a una función de onda normalizada de la partícula i -ésima correspondiente a un estado propio de su componente z del momento angular con autovalor $m\hbar$. Consideremos los estados cuánticos del sistema total

$$\Phi_{\text{nen}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{2} \left(\Psi_{+1}(\mathbf{r}_1) + \Psi_{-1}(\mathbf{r}_1) \right) \left(\Psi_{+1}(\mathbf{r}_2) + \Psi_{-1}(\mathbf{r}_2) \right)$$

$$\Phi_{\text{ent}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Psi_{+1}(\mathbf{r}_1)\Psi_{-1}(\mathbf{r}_2) + \Psi_{-1}(\mathbf{r}_1)\Psi_{+1}(\mathbf{r}_2) \right)$$

donde *nen* y *ent* significan no entrelazado y entrelazado, respectivamente.

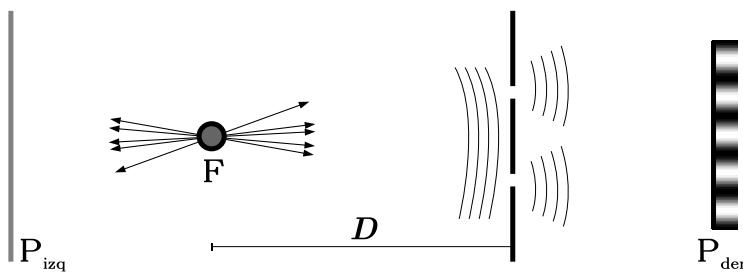
- a) Compruebe que la función de onda $\Phi_{\text{nen}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ *no es* autofunción de la componente z del momento angular total

$$\hat{L}_z^{(\text{tot})} = \hat{L}_z^{(1)} + \hat{L}_z^{(2)} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi_1} - i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi_2}$$

mientras que $\Phi_{\text{ent}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ *sí lo es*. ¿Con qué autovalor en este último caso?

- b) Obtenga para ambos estados las probabilidades de ocurrencia de una medida de $L_z^{(2)}$ (la componente z del momento angular de la partícula 2). Compruebe que son las mismas.
- c) Estando el sistema en el estado $\Phi_{\text{nen}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ se efectúa una medida ideal de $L_z^{(2)}$ con un resultado $+h$. Obtenga la función de onda colapsada $\Phi_{\text{después}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ y las probabilidades de ocurrencia de una medida inmediatamente posterior de $L_z^{(2)}$. ¿Han cambiado éstas respecto de sus valores previos a la medida, obtenidos en el apartado b)?
- d) Resuelva de nuevo el apartado c) pero suponiendo que el sistema estaba en el estado entrelazado $\Phi_{\text{ent}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Observe cómo una medida sobre la partícula 1 afecta a las propiedades cuánticas de la partícula 2, algo que no sucedía para el sistema en el estado $\Phi_{\text{nen}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$.

Ayuda: El operador $\hat{L}_z^{(1)}$ sólo actúa sobre funciones de \mathbf{r}_1 ya que representa una propiedad física de la partícula 1. Por igual motivo, $\hat{L}_z^{(2)}$ sólo actúa sobre funciones de \mathbf{r}_2 .

Figura 7-2. Experimento de difracción de partículas (**problema 7.7**)**PROBLEMA 7.7. (!!)(**) Carácter no local de la física cuántica I**

En el dispositivo de la **FIG. 7-2** el foco F emite pares electrón/positrón a un ritmo muy lento mediante la aniquilación de pares de fotones de energía muy bien definida $E_\gamma = m_e c^2 + K$ y momentos opuestos. Así, cada partícula del par sale emitida en direcciones opuestas con energía cinética K siendo el momento lineal total del par igual a cero. Las partículas que salen hacia la derecha son difractadas por una doble rendija de Young situada a una distancia D del foco, observándose tras la emisión de muchos pares e^+/e^- los típicos patrones de interferencia en una pantalla P_{der} .

Repitamos ahora el experimento pero situando una segunda pantalla P_{izq} que recoge los impactos de las partículas emitidas hacia la izquierda. Si la separación entre P_{izq} y el foco F es *menor* que D las franjas de difracción en la pantalla P_{der} ya no se observan. ¿Cómo es esto posible?

Ayuda: El estado cuántico de cada par e^+/e^- está entrelazado ¿Por qué?

TEMA 8

MOMENTO ANGULAR

En este capítulo estudiaremos el momento angular o cinético de una partícula puntual bajo las leyes de la física cuántica que hemos establecido en los capítulos anteriores. Este análisis no es sólo relevante por la importancia intrínseca del momento angular, sino porque ilustrará muchos aspectos de la teoría cuántica.

En primer lugar expondremos las propiedades generales de los operadores correspondientes al momento angular, haciendo especial hincapié en su representación en coordenadas esféricas. Ello nos permitirá obtener el espectro y las autofunciones de estos operadores, en un escenario en el que buena parte de la teoría cuántica elemental se plasmará con toda claridad. A continuación, veremos cómo se aborda la resolución de la ecuación de Schrödinger de una partícula sometida a una fuerza central, ilustrando el método para el caso de una partícula confinada dentro de una esfera.

Orientaciones generales al plan de trabajo

Sugerimos **15 horas** de trabajo personal, repartidas a partes iguales entre el estudio de la teoría y la resolución de los ejemplos y problemas propuestos. Es esencial comprender cómo la interpretación probabilística se particulariza en el tratamiento cuántico del momento angular.

Objetivos del capítulo

- Conocer las propiedades generales de los operadores de momento angular.
- Familiarizarse con el análisis de la función de onda de una partícula expresada en coordenadas esféricas.
- Conocer la estructura de las autofunciones del momento angular y saber aplicar la interpretación probabilística a medidas del momento angular.
- Plantear la ecuación de Schrödinger para una partícula bajo una fuerza central y conocer la estructura general de sus soluciones.

8.1. LOS OPERADORES DE MOMENTO ANGULAR

§ 1. Consideremos una partícula de masa M que se mueve en el espacio. Como ya hemos visto en capítulos anteriores, los operadores (en la representación en posiciones) correspondientes a las componentes de su *momento angular o cinético* $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ son

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{L}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ \hat{L}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ \hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).\end{aligned}} \quad (8.1)$$

En lugar de coordenadas cartesianas, podemos expresar la dependencia espacial usando coordenadas esféricas $\{r, \theta, \varphi\}$, cuya relación con las coordenadas cartesianas es:

$$\begin{aligned}r &= (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2} = |\mathbf{r}| & x &= r \sin \theta \cos \varphi \\ \theta &= \arccos \frac{z}{(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}} & y &= r \sin \theta \sin \varphi \\ \varphi &= \arctan \frac{x}{y} = \arccos \frac{x}{(x^2 + y^2)^{1/2}} & z &= r \cos \theta.\end{aligned} \quad (8.2)$$

En este caso, haciendo el cambio de variables $\{x, y, z\} \rightarrow \{r, \theta, \varphi\}$ tenemos que los operadores (8.1) se escriben como:

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{L}_x &= i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{L}_y &= i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}.\end{aligned}} \quad (8.3)$$

De esta manera, los operadores de momento angular únicamente dependen de las coordenadas angulares $\{\theta, \varphi\}$.

§ 2. Como comprobamos en el capítulo anterior, las componentes del momento angular *no son compatibles*. En concreto, a partir de las reglas de commutación canónicas obtuvimos que:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \quad ; \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x \quad ; \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y. \quad (8.4)$$

Sea ahora $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ el operador representativo de la magnitud *módulo al cuadrado del momento angular* de la partícula, $L^2 \equiv |\mathbf{L}|^2$. A partir de (8.4) tenemos que

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}^2] &= [\hat{L}_x, \hat{L}_x^2] + [\hat{L}_x, \hat{L}_y^2] + [\hat{L}_x, \hat{L}_z^2] \\ &= \hat{0} + [\hat{L}_x, \hat{L}_y] \hat{L}_y + \hat{L}_y [\hat{L}_x, \hat{L}_y] + [\hat{L}_x, \hat{L}_z] \hat{L}_z + \hat{L}_z [\hat{L}_x, \hat{L}_z] \\ &= i\hbar \hat{L}_z \hat{L}_y + i\hbar \hat{L}_y \hat{L}_z - i\hbar \hat{L}_y \hat{L}_z - i\hbar \hat{L}_z \hat{L}_y \\ &= 0 \end{aligned}$$

y, tras un mero intercambio de índices, podemos escribir que

$$[\hat{L}_x, \hat{L}^2] = [\hat{L}_y, \hat{L}^2] = [\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0. \quad (8.5)$$

Por lo tanto, *una* componente cualquiera de \mathbf{L} y L^2 sí son compatibles, por lo que es posible medir simultáneamente, y con toda la precisión deseada, L^2 y una componente del momento angular.

§ 3. Partiendo de (8.3), la regla de actuación del operador L^2 en coordenadas esféricas es

$$\hat{L}^2 \Psi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial \theta} \right) - \frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi(\mathbf{r})}{\partial \varphi^2}. \quad (8.6)$$

Por otra parte, recordemos (véase el **ejemplo 5.c**) que el operador \hat{p}_r correspondiente a la componente radial del momento lineal \mathbf{p} , es

$$\hat{p}_r = -i\hbar \left(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \right). \quad (8.7)$$

Esto implica que

$$\hat{p}_r^2 \Psi(\mathbf{r}) = -\hbar^2 \left(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \right) \left(\frac{\Psi(\mathbf{r})}{r} + \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial r} \right) = -\hbar^2 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial \Psi(r)}{\partial r} \right]. \quad (8.8)$$

Si ahora tenemos en cuenta la expresión del operador laplaciano en coordenadas esféricas (cfr. el **Apéndice A**), el operador de energía cinética

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2$$

resulta ser en dichas coordenadas,

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2Mr^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (8.9)$$

De esta manera, usando las relaciones (8.6) y (8.8), tenemos que

$$\hat{K} = \frac{1}{2M} \hat{p}_r^2 + \frac{1}{2Mr^2} \hat{L}^2 \quad (8.10)$$

en correspondencia con la relación clásica entre K , p_r y L^2 .

8.2. FUNCIONES DE ONDA EN COORDENADAS ESFÉRICAS

§ 1. Como acabamos de ver, los operadores de momento angular dependen exclusivamente de las coordenadas esféricas $\{\theta, \varphi\}$. Esto implica que si en un instante dado la función de onda de la partícula tiene la estructura

$$\Phi(\mathbf{r}) = R(r)\vartheta(\theta, \varphi), \quad \text{con} \quad \begin{cases} r \in [0, \infty) \\ \theta \in [0, \pi] \\ \varphi \in [0, 2\pi], \end{cases} \quad (8.11)$$

las propiedades relativas al momento angular van a depender únicamente de la función $\vartheta(\theta, \varphi)$. Por otra parte, cualquier propiedad asociada exclusivamente a la coordenada radial r sólo dependerá de $R(r)$.

Esto sugiere construir el denominado *espacio de Hilbert de las funciones de onda angulares*, $\mathcal{L}_{\text{ang}}^2$, como el formado por funciones dependientes exclusivamente de las coordenadas angulares esféricas $\{\theta, \varphi\}$ (o en otras palabras, por funciones definidas sobre la superficie esférica de radio unidad centrada en el origen, a la que denotaremos como \mathcal{S}_1). En este espacio de Hilbert, el producto escalar entre dos funciones $\vartheta(\theta, \varphi)$ y $\phi(\theta, \varphi)$ es

$$\langle \vartheta | \phi \rangle = \int_{\mathcal{S}_1} \vartheta^*(\theta, \varphi) \phi(\theta, \varphi) d\Omega = \int_0^\pi \sin \theta \int_0^{2\pi} \vartheta^*(\theta, \varphi) \phi(\theta, \varphi) d\varphi d\theta \quad (8.12)$$

y las funciones de $\mathcal{L}_{\text{ang}}^2$ son aquellas cuya norma $\|\vartheta\| = \langle \vartheta | \vartheta \rangle^{1/2}$ es finita.

A su vez, conviene también definir el *espacio de Hilbert de las funciones de onda radiales*, $\mathcal{L}_{\text{rad}}^2$, compuesto por aquellas funciones $R(r)$ que dependen de la variable radial r y que sean de cuadrado integrable en el siguiente sentido:

$$R(r) \in \mathcal{L}_{\text{rad}}^2 \Leftrightarrow \int_0^\infty r^2 |R(r)|^2 dr \text{ es finito.} \quad (8.13)$$

En $\mathcal{L}_{\text{rad}}^2$, el producto escalar de dos funciones $R(r)$ y $Q(r)$ será

$$\langle R | Q \rangle = \int_0^\infty r^2 R^*(r) Q(r) dr. \quad (8.14)$$

Como consecuencia, el espacio de las funciones de onda de una partícula que se mueve en todo el espacio es igual al producto tensorial de $\mathcal{L}_{\text{rad}}^2$ y $\mathcal{L}_{\text{ang}}^2$:

$$\boxed{\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) = \mathcal{L}_{\text{rad}}^2 \otimes \mathcal{L}_{\text{ang}}^2.} \quad (8.15)$$

Así, si una función de onda de la forma (8.11) está normalizada, conviene realizar la factorización de manera que $R(r)$ (como función de $\mathcal{L}_{\text{rad}}^2$) y $\vartheta(\theta, \varphi)$ (como función de $\mathcal{L}_{\text{ang}}^2$) estén normalizadas por separado, esto es, de manera que

$$\begin{aligned} \int_0^\infty r^2 |R(r)|^2 dr &= 1 \\ \int_0^\pi \sin \theta \int_0^{2\pi} |\vartheta(\theta, \varphi)|^2 d\varphi d\theta &= 1. \end{aligned} \quad (8.16)$$

§ 2. Pensemos ahora en una función de onda normalizada $\Psi(\mathbf{r})$ no necesariamente factorizada como el producto de una función radial y otra angular. La densidad de probabilidad correspondiente a una medida de la coordenada radial r o *densidad de probabilidad radial* será

$$\boxed{\rho_{\text{rad}}(r) = r^2 \int_0^\pi \sin \theta \int_0^{2\pi} |\Psi(\mathbf{r})|^2 d\varphi d\theta,} \quad (8.17)$$

donde $\rho_{\text{rad}}(r)dr$ es la probabilidad de que al medir la coordenada radial de la partícula r obtengamos un valor dentro del intervalo $(r, r + dr)$. Naturalmente, $\rho_{\text{rad}}(r)$ está normalizada en el sentido

$$\int_0^\infty \rho_{\text{rad}}(r) dr = 1 \quad (8.18)$$

y el valor medio de cualquier magnitud $g(r)$ dependiente exclusivamente de r será

$$\langle g \rangle = \int_0^\infty g(r) \rho_{\text{rad}}(r) dr. \quad (8.19)$$

Veamos un ejemplo ilustrativo.

EJEMPLO 8.a. Valores medios en coordenadas esféricas

En un instante dado, la función de onda de un electrón es

$$\Psi(\mathbf{r}) = \mathcal{A} r \exp[-r/(2a_0)] \sin \theta \cos \varphi,$$

donde \mathcal{A} es una constante de normalización y $a_0 \simeq 0,529 \text{ \AA}$ es el radio de Bohr.

- a) Escriba $\Psi(\mathbf{r})$ como producto de dos funciones normalizadas $R(r)$ y $\vartheta(\theta, \varphi)$.
- b) Compruebe que $\Psi(\mathbf{r})$ es autofunción de L^2 .
- c) Evalúe el valor medio de L_z .
- d) Obtenga la densidad radial $\rho_{\text{rad}}(r)$ y el valor medio de la coordenada r .
- e) Obtenga el valor medio de la energía cinética.

Ayudas: $\int_0^\infty u^n e^{-u} du = n!$; $\int_0^\pi \sin^3 \theta d\theta = \frac{4}{3}$; $\int_0^{2\pi} \cos^2 \varphi d\varphi = \pi$

Solución:

- a) Imponiendo la condición de normalización $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$,

$$1 = \int_{\mathbb{R}^3} |\Psi(\mathbf{r})|^2 d^3 \mathbf{r} = \int_0^\infty r^2 \int_0^\pi \sin \theta \int_0^{2\pi} |\Psi(\mathbf{r})|^2 d\varphi d\theta dr,$$

donde hemos usado coordenadas esféricas. Sustituyendo, agrupando términos y efectuando las integrales, tenemos que

$$1 = |\mathcal{A}|^2 \underbrace{\int_0^\infty r^4 e^{-r/a_0} dr}_{24a_0^5} \underbrace{\int_0^\pi \sin^3 \theta d\theta \int_0^{2\pi} \cos^2 \varphi d\varphi}_{4\pi/3} = 24a_0^5 \frac{4\pi}{3} |\mathcal{A}|^2.$$

Por tanto, si suponemos sin pérdida de generalidad que \mathcal{A} es real y positiva, la función de onda normalizada está dada por

$$\Psi(\mathbf{r}) = \left[\frac{1}{\sqrt{24a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/(2a_0)} \right] \left[\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \cos \varphi \right] \equiv R(r) \vartheta(\theta, \varphi).$$

Tanto $R(r)$ como $\vartheta(\theta, \varphi)$ están normalizadas como funciones de los espacios L_{rad}^2 y L_{ang}^2 , respectivamente.

b) Evaluemos la actuación del operador \hat{L}^2 sobre $\Psi(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned}\hat{L}^2\Psi(\mathbf{r}) &= -\frac{\hbar^2}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial\theta}\right]-\frac{\hbar^2}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi(\mathbf{r})}{\partial\varphi^2}= \\ &= R(r)\left(-\frac{\hbar^2}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial\vartheta(\theta,\varphi)}{\partial\theta}\right]-\frac{\hbar^2}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\vartheta(\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2}\right),\end{aligned}$$

donde hemos tenido en cuenta que \hat{L}^2 no afecta a la función radial $R(r)$. Sustituyendo $\vartheta(\theta,\varphi)$ por su expresión, operando y simplificando, llegamos a que

$$\hat{L}^2\Psi(\mathbf{r}) = R(r)2\hbar^2\vartheta(\theta,\varphi) = 2\hbar^2\Psi(\mathbf{r}),$$

con lo que $\Psi(\mathbf{r})$ es autofunción de L^2 con autovalor $2\hbar^2$.

c) Para evaluar el valor medio de L_z , basta con tener en cuenta la dependencia angular. En efecto, partamos de

$$\langle L_z \rangle = \langle \Psi | L_z \Psi \rangle = \int_0^\infty r^2 \int_0^\pi \sin\theta \int_0^{2\pi} \Psi^*(\mathbf{r}) [\hat{L}_z \Psi(\mathbf{r})] d\varphi d\theta dr.$$

Ya que \hat{L}_z únicamente actúa sobre la parte angular $\vartheta(\theta,\varphi)$, llegamos a que

$$\begin{aligned}\langle L_z \rangle &= \overbrace{\int_0^\infty r^2 |R(r)|^2 dr}^1 \int_0^\pi \sin\theta \int_0^{2\pi} \vartheta^*(\theta,\varphi) [\hat{L}_z \vartheta(\theta,\varphi)] d\varphi d\theta \\ &= \int_0^\pi \sin\theta \int_0^{2\pi} \vartheta^*(\theta,\varphi) [\hat{L}_z \vartheta(\theta,\varphi)] d\varphi d\theta = \langle \vartheta | \hat{L}_z \vartheta \rangle\end{aligned}$$

donde el producto escalar $\langle \vartheta | \hat{L}_z \vartheta \rangle$ es el correspondiente al espacio de Hilbert $\mathcal{L}_{\text{ang}}^2$. Como

$$\hat{L}_z \vartheta(\theta,\varphi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi} \vartheta(\theta,\varphi) = i\hbar \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\theta \sin\varphi$$

queda que

$$\langle L_z \rangle = \frac{3i\hbar}{4\pi} \int_0^\pi \sin^3\theta d\theta \int_0^{2\pi} \sin\varphi \cos\varphi d\varphi = \frac{3i\hbar}{4\pi} \times \frac{4}{3} \times 0 = 0.$$

d) En este caso

$$\rho_{\text{rad}}(r) = r^2 \int_0^\pi \sin\theta \int_0^{2\pi} |\Psi(\mathbf{r})|^2 d\varphi d\theta = r^2 |R(r)|^2 = \frac{1}{24a_0^5} r^4 e^{-r/a_0}.$$

Como consecuencia

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty r \rho_{\text{rad}}(r) dr = \frac{1}{24a_0^5} \int_0^\infty r^5 e^{-r/a_0} dr = \frac{a_0}{24} \int_0^\infty u^5 e^{-u} du = 5a_0,$$

donde hemos hecho el cambio de variable $r \rightarrow u = r/a_0$ y usado la ayuda.

e) De acuerdo con (8.6) y (8.9),

$$\hat{K}\Psi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial r} \right] + \frac{1}{2mr^2} \hat{L}^2\Psi(\mathbf{r})$$

y como $\hat{L}^2\Psi(\mathbf{r}) = 2\hbar^2\Psi(\mathbf{r})$,

$$\begin{aligned} \hat{K}\Psi(\mathbf{r}) &= -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial r} \right] + \frac{\hbar^2}{mr^2} \Psi(\mathbf{r}) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left[r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right] + \frac{2}{r^2} R(r) \right) \vartheta(\theta, \varphi). \end{aligned}$$

Así, como $R(r)$ es real y la función $\vartheta(\theta, \varphi)$ está normalizada,

$$\begin{aligned} \langle K \rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}) \hat{K}\Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \int_0^\infty r^2 \int_0^\pi \sin\theta \int_0^{2\pi} [\Psi^*(\mathbf{r}) \hat{K}\Psi(\mathbf{r})] d\varphi d\theta dr \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty r^2 R(r) \left(-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left[r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right] + \frac{2}{r^2} R(r) \right) dr \end{aligned}$$

y efectuando una integral por partes, obtenemos que

$$\langle K \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \left[r^2 \left(\frac{dR(r)}{dr} \right)^2 + 2R^2(r) \right] dr.$$

Ya sólo necesitamos sustituir $R(r)$ por su expresión. Haciendo de nuevo el cambio de variable $r \rightarrow u = r/a_0$,

$$\begin{aligned} \langle K \rangle &= \frac{\hbar^2}{48ma_0^2} \int_0^\infty \left[u^2 \left(\frac{d(ue^{-u/2})}{du} \right)^2 + 2u^2 e^{-u} \right] du = \\ &= \frac{\hbar^2}{192ma_0^2} \int_0^\infty (u^4 - 4u^3 + 12u^2) e^{-u} du \end{aligned}$$

y efectuando la integral,

$$\langle K \rangle = \frac{\hbar^2}{8ma_0^2} = \frac{1}{8} \text{ Ha}$$

(recuerde que el Ha es la unidad de energía en unidades atómicas).

8.3. AUTOFUNCIONES DEL MOMENTO ANGULAR

§ 1. El hecho de que las componentes $\{L_x, L_y, L_z\}$ del momento angular no sean compatibles imposibilita la existencia de una base de representación del espacio de las funciones de onda formada por autofunciones simultáneas de los operadores $\{\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z\}$. Sin embargo, tomando como “dirección de referencia” la del eje OZ , sí resultará posible encontrar bases de representación formadas por autofunciones comunes de \hat{L}_z y \hat{L}^2 ya que estos dos operadores commutan entre sí. Más aún, si nos restringimos al espacio de Hilbert $\mathcal{L}_{\text{ang}}^2$, veremos que $\{\hat{L}^2, \hat{L}_z\}$ es un conjunto completo de observables compatibles de dicho espacio de Hilbert. El objetivo de esta sección es obtener las funciones de la base de representación de $\mathcal{L}_{\text{ang}}^2$ correspondiente al CCOC $\{\hat{L}^2, \hat{L}_z\}$ y, acto seguido, discutir sus propiedades. A estas funciones las llamaremos **autofunciones del momento angular** aunque, como acabamos de decir, únicamente podemos garantizar que son autofunciones de \hat{L}_z y \hat{L}^2 .

§ 2. En general, toda función $\vartheta(\theta, \varphi)$ de $\mathcal{L}_{\text{ang}}^2$ con sentido físico ha de ser acotada y continua, esto es,

$$\begin{aligned} \vartheta(\theta, \varphi) &\quad \text{debe ser finita para todo } \theta \in [0, \pi] \text{ y } \varphi \in [0, 2\pi] \\ \vartheta(\theta, 0) = \vartheta(\theta, 2\pi n) &\quad \text{continuidad en } 2\pi n \quad (8.20) \\ \vartheta(0, \varphi) \text{ y } \vartheta(\pi, \varphi) &\quad \text{no dependen de } \varphi \end{aligned}$$

Puesto que las variables angulares toman valores en intervalos finitos, la acotación de $\vartheta(\theta, \varphi)$ implica automáticamente que sea normalizable como función de $\mathcal{L}_{\text{ang}}^2$. Como consecuencia, los *operadores cuánticos relacionados con el momento angular únicamente tendrán espectro puntual*, ya que sus autofunciones han de ser necesariamente normalizables.

En particular, tal y como vimos en el **capítulo 5**, el espectro de L_z es

$$\boxed{\sigma(L_z) = \sigma_p(L_z) = \{m\hbar, \text{ con } m \in \mathbb{Z}\}.} \quad (8.21)$$

Por simetría, los espectros de L_x y L_y son iguales a $\sigma_P(L_z)$. Ciñéndonos a las funciones de onda de $\mathcal{L}_{\text{ang}}^2$, las autofunciones de \hat{L}_z con autovalor $m\hbar$ son de la forma

$$\Theta(\theta) \frac{\exp(im\varphi)}{\sqrt{2\pi}} \quad \text{con } m \in \mathbb{Z}, \quad (8.22)$$

donde $\Theta(\theta)$ es una función arbitraria dependiente de la coordenada angular θ .

§ 3. Por conveniencia, introduzcamos un número cuántico adimensional ℓ tal que los valores espectrales de L^2 sean $\ell(\ell+1)\hbar^2$ (el motivo de tal elección será evidente dentro de poco). Designemos por $Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$ a una autofunción normalizada común de \hat{L}^2 y \hat{L}_z con autovalores respectivos $\ell(\ell+1)\hbar^2$ y $m\hbar$. Estas funciones, denominadas **armónicos esféricos**, satisfacen pues las ecuaciones de autovalores

$$\boxed{\hat{L}^2 Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = \ell(\ell+1)\hbar^2 Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)} \quad (8.23)$$

$$\boxed{\hat{L}_z Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = m\hbar Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)} \quad (8.24)$$

y su condición de normalización en $\mathcal{L}_{\text{ang}}^2$ es

$$\langle Y_{\ell,m} | Y_{\ell,m} \rangle = \int_0^\pi \sin \theta \int_0^{2\pi} |Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)|^2 d\varphi d\theta = 1. \quad (8.25)$$

Ya que $Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$ es autofunción de \hat{L}_z con autovalor $m\hbar$, de acuerdo con la estructura general (8.22) se tiene que

$$Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = \Theta_{\ell,m}(\theta) \frac{\exp(im\varphi)}{\sqrt{2\pi}} \quad (8.26)$$

y, como $Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$ está normalizada,

$$\int_0^\pi \sin \theta |\Theta_{\ell,m}(\theta)|^2 d\theta = 1. \quad (8.27)$$

A su vez, puesto que

$$\hat{L}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} = -\frac{\hbar^2}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \hat{L}_z^2,$$

la ecuación de autovalores (8.23) se puede escribir en términos del número cuántico ℓ y de la función $\Theta_{\ell,m}(\theta)$ como

$$\left(-\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right] + \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta_{\ell,m}(\theta) = \ell(\ell+1) \Theta_{\ell,m}(\theta). \quad (8.28)$$

Los valores de ℓ para los que la ecuación (8.28) tiene soluciones acotadas nos proporcionarán el espectro de \hat{L}^2 , cuyos autovalores serán $\ell(\ell+1)\hbar^2$.

Para resolver esta ecuación de autovalores es conveniente hacer el cambio de variable $\theta \rightarrow \gamma \equiv \cos \theta$. Así, si escribimos

$$\Theta_{\ell,m}(\theta) \equiv P_{\ell,m}(\cos \theta) = P_{\ell,m}(\gamma), \quad \text{con } \gamma \in [-1, 1], \quad (8.29)$$

tenemos que (8.28) se transforma en

$$(1 - \gamma^2) \frac{d^2 P_{\ell,m}(\gamma)}{d\gamma^2} - 2\gamma \frac{dP_{\ell,m}(\gamma)}{d\gamma} + \left[\ell(\ell + 1) - \frac{m^2}{1 - \gamma^2} \right] P_{\ell,m}(\gamma) = 0 \quad (8.30)$$

(esta es la llamada *ecuación diferencial asociada de Legendre*), mientras que la condición de normalización (8.27) se expresa como

$$\int_{-1}^{+1} |P_{\ell,m}(\gamma)|^2 d\gamma = 1. \quad (8.31)$$

Por sustitución directa, puede comprobarse que la solución general de la ecuación diferencial (8.30) es

$$P_{\ell,m}(\gamma) = (1 - \gamma^2)^{|m|/2} \times (\alpha_0 + \alpha_1 \gamma + \alpha_2 \gamma^2 + \alpha_3 \gamma^3 + \dots), \quad (8.32)$$

donde los coeficientes α_i satisfacen la siguiente relación de recurrencia:

$$\alpha_{i+2} = \frac{(i + |m|)(i + |m| + 1) - \ell(\ell + 1)}{(i + 1)(i + 2)} \alpha_i, \quad \text{con } i = 0, 1, 2, \dots \quad (8.33)$$

Ahora bien, la función $P_{\ell,m}(\gamma)$ ha de ser acotada. Esto implica que el segundo factor en el miembro de la derecha en (8.32) debe ser un polinomio de grado finito n_c , es decir, $\alpha_n = 0$ si $n > n_c$. Ello es únicamente posible si se cumplen las dos siguientes condiciones:

1. $\ell = n_c + |m|$ con $n_c \in \mathbb{N}$
2. $\alpha_0 = 0$ si n_c es impar, $\alpha_1 = 0$ si n_c es par.

De esta manera, como $|m|$ puede tomar los valores $0, 1, 2, \dots$, el espectro de \hat{L}^2 es

$$\sigma(\hat{L}^2) = \sigma_p(\hat{L}^2) = \left\{ \ell(\ell + 1)\hbar^2, \text{ con } \ell = 0, 1, 2, 3, \dots \right\} \quad (8.34)$$

A su vez, fijado el número cuántico m , los valores permitidos para el número cuántico ℓ son

$$\ell = |m|, |m| + 1, |m| + 2, \dots$$

o bien, fijado ℓ , los valores permitidos de m son los $2\ell + 1$ enteros que van desde $-\ell$ hasta $+\ell$:

$$m = -\ell, -\ell + 1, \dots, 0, \dots, \ell - 1, \ell \quad (8.35)$$

Vemos así que, salvo constante multiplicativa, sólo hay una función $P_{\ell,m}(\gamma)$ para cada pareja de valores permitidos de los números cuánticos (ℓ, m) . $P_{\ell,m}(\gamma)$ es una función real, conocida como *función especial de Legendre*, que es igual al producto de $(1 - \gamma^2)^{|m|/2}$ por un polinomio de grado $\ell - |m|$, bien par o bien impar, cuyos coeficientes están relacionados entre sí mediante la expresión (8.33). Finalmente, ya que en la ecuación diferencial (8.30) sólo aparece m^2 , tendremos que $P_{\ell,m}(\gamma) \propto P_{\ell,-m}(\gamma)$.

Puede demostrarse que si $m \geq 0$, la función especial de Legendre ya normalizada de acuerdo con (8.31), está dada por

$$P_{\ell,m}(\gamma) = \frac{(-1)^m}{\ell! 2^\ell} \sqrt{\frac{2\ell+1}{2}} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} (1-\gamma^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{d\gamma^{\ell+m}} (\gamma^2 - 1)^\ell, \quad (8.36)$$

mientras que para $m < 0$ se adopta el convenio

$$P_{\ell,m}(\gamma) = (-1)^{-m} P_{\ell,-m}^*(\gamma), \quad \text{con } m = 0, -1, -2, \dots, -\ell. \quad (8.37)$$

$\ell = 0$	$Y_{0,0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
$\ell = 1$	$Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$
	$Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$
$\ell = 2$	$Y_{2,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} [3 \cos^2 \theta - 1]$
	$Y_{2,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$
	$Y_{2,\pm 2}(\theta, \varphi) = \pm \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$

TABLA 8-1 Armónicos esféricos de orden más bajo

Así, la autofunción angular normalizada de L^2 con autovalor $\ell(\ell + 1)\hbar^2$ y de L_z con autovalor $m\hbar$ es

$$Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_{\ell,m}(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad \text{con } \begin{cases} \ell = 0, 1, 2, \dots \\ m = -\ell, \dots, 0, \dots, \ell. \end{cases} \quad (8.38)$$

En la **TABLA 8-1** se muestran los armónicos esféricos correspondientes a los números cuánticos $\ell = 0$, $\ell = 1$ y $\ell = 2$.

§ 4. Analicemos ahora algunas propiedades de un autoestado simultáneo de L^2 y L_z . En primer lugar, su función de onda $\Phi(\mathbf{r})$ ha de tener la estructura

$$\Phi(\mathbf{r}) = R(r) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} R(r) P_{\ell,m}(\cos \theta) e^{im\varphi}.$$

Suponiendo que $\Phi(\mathbf{r})$ está normalizada, la densidad de probabilidad es

$$\rho(\mathbf{r}) = |\Phi(\mathbf{r})|^2 = |R(r)|^2 |Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)|^2 = \frac{1}{2\pi} |R(r)|^2 P_{\ell,m}^2(\cos \theta),$$

que no depende del ángulo φ , por lo que $\rho(\mathbf{r})$ tiene simetría de rotación alrededor del eje OZ .

A su vez, la función $\Phi(\mathbf{r})$ tiene paridad bien definida. En efecto, la transformación $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ en coordenadas esféricas es

$$(r, \theta, \varphi) \rightarrow (r, \pi - \theta, \varphi + \pi)$$

por lo que

$$\Phi(-\mathbf{r}) = R(r) Y_{\ell,m}(\pi - \theta, \varphi + \pi).$$

Ahora bien, si tenemos en cuenta la estructura general de los armónicos esféricos,

$$Y_{\ell,m}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = P_{\ell,m}[\cos(\pi - \theta)] e^{im(\varphi + \pi)} = P_{\ell,m}(-\cos \theta) e^{im\varphi} e^{im\pi}.$$

Como $P_{\ell,m}(\gamma)$ es igual a la función par $(1 - \gamma^2)^{|m|/2}$ multiplicada por un polinomio cuya paridad es la de $\ell - |m|$,

$$P_{\ell,m}(-\cos \theta) = (-1)^{\ell - |m|} P_{\ell,m}(\cos \theta)$$

y puesto $\exp(im\pi) = (-1)^{|m|}$, queda en definitiva que

$$\Phi(-\mathbf{r}) = (-1)^\ell \Phi(\mathbf{r}) \quad \text{si} \quad \Phi(\mathbf{r}) = R(r) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi). \quad (8.39)$$

La paridad de una autofunción de L^2 y L_z queda así determinada por el número cuántico ℓ . Como consecuencia, la densidad de probabilidad $\rho(\mathbf{r})$ exhibe la simetría de inversión $\rho(\mathbf{r}) = \rho(-\mathbf{r})$, independientemente del valor de ℓ .

Resultado de estas propiedades de simetría, tenemos que en un autoestado de L^2 y L_z :

- El valor medio de la posición es cero: $\langle \mathbf{r} \rangle = \mathbf{0}$.
- El valor medio del momento lineal es cero:¹ $\langle \mathbf{p} \rangle = \mathbf{0}$.
- Los valores medios de x^2 e y^2 son iguales entre sí.
- Los valores medios de p_x^2 y p_y^2 son también iguales entre sí.

§ 5. Centrémonos ahora en las propiedades relacionadas específicamente con el momento angular en un autoestado de L^2 y L_z . Como

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_z] = -i\hbar \hat{L}_y \quad \text{y} \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x,$$

de acuerdo con la relación de incertidumbre generalizada, vista en el capítulo anterior, podemos escribir

$$(\Delta L_x)(\Delta L_z) \geq \frac{\hbar}{2} |\langle L_y \rangle| \quad ; \quad (\Delta L_y)(\Delta L_z) \geq \frac{\hbar}{2} |\langle L_x \rangle|.$$

Por tanto, como en un autoestado de L_z la incertidumbre ΔL_z es igual a cero, llegamos inmediatamente a que los valores medios de L_x y L_y en tal autoestado son nulos:

$$\text{si } \hat{L}_z \Phi(\mathbf{r}) = m\hbar \Phi(\mathbf{r}) \Rightarrow \langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0. \quad (8.40)$$

Además, en un autoestado de L^2 y L_z se tiene que

$$\langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle = \langle L^2 \rangle - \langle L_z^2 \rangle = [\ell(\ell+1) - m^2] \hbar^2$$

y como la simetría de rotación alrededor del eje OZ implica que $\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle$, se tiene que

$$\begin{aligned} \langle L_x \rangle &= \langle L_y \rangle = 0 ; & \langle L_z \rangle &= m\hbar \\ \Delta L_x = \Delta L_y &= \sqrt{\frac{\ell(\ell+1) - m^2}{2}} \hbar ; & \Delta L_z &= 0. \end{aligned} \quad (8.41)$$

¹ Ello es así porque los operadores de momento lineal $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ cambian la paridad de una función (transforman una función par en otra impar y viceversa). Los valores medios de p_x, p_y, p_z serán entonces iguales a productos escalares de una función par y otra impar, que son idénticamente nulos.

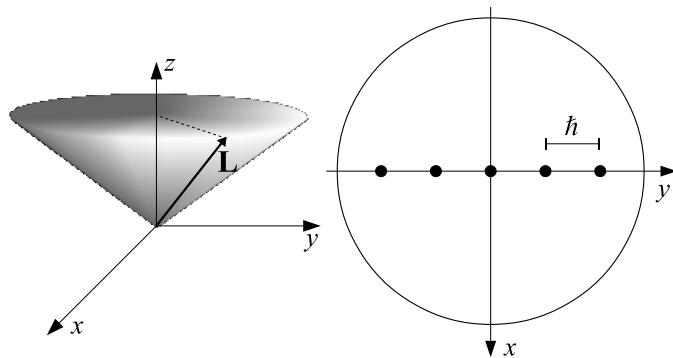


Figura 8-1. Representación pictórica del momento angular \mathbf{L} en un autoestado del momento angular con números cuánticos $\ell = 3$ y $m = 2$. Como en este estado se tiene que $(L^2 - L_z^2)^{1/2} = 2\sqrt{2}\hbar \simeq 2,83\hbar$, al medir L_y (o cualquier componente de \mathbf{L} perpendicular al eje OZ), se podrán obtener los valores $0, \pm\hbar$ y $\pm 2\hbar$, que corresponden a los puntos representados en el gráfico de la derecha.

Por consiguiente, si $\ell = 0$ (cuando la función de onda depende exclusivamente de la coordenada radial r) podemos afirmar que la partícula está en un estado con momento angular idénticamente nulo (esto es, en el que $\langle \mathbf{L} \rangle = \mathbf{0}$ y $\Delta L_x = \Delta L_y = \Delta L_z = 0$).

Salvo para $\ell = 0$, en un autoestado de L^2 y L_z las otras dos componentes del momento angular no están bien definidas: al medir L_x (o L_y) podremos obtener diferentes resultados aunque, por la cuantización del momento angular, siempre serán múltiplos enteros de la constante de Planck \hbar . No debe olvidarse que las componentes del momento angular son incompatibles y, por tanto, no se pueden medir simultáneamente con precisión arbitraria.

Sin embargo, sabemos que si medimos L_z y L^2 obtendremos con seguridad los resultados $m\hbar$ y $\ell(\ell + 1)\hbar^2$, respectivamente. Por tanto (véase la FIG. 8-1) el momento angular de una partícula en un autoestado de L^2 y L_z está indeterminado, aunque su módulo y su inclinación respecto del eje OZ están perfectamente definidos. Los posibles resultados de una medida de L_x (o de L_y) tienen que ser consistentes con esta descripción, por lo que aquéllos no podrán ser, en valor absoluto, mayores que $[\ell(\ell + 1) - m^2]^{1/2}\hbar$.

EJEMPLO 8.b. (*) Los operadores de escalera

Definamos los denominados *operadores de escalera* L_+ y L_- como

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y \quad , \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y. \quad (8.42)$$

Estos dos operadores no son autoadjuntos, pero es inmediato comprobar que son adjuntos uno del otro: $\hat{L}_+^\dagger = \hat{L}_-$.

- a) Demuestre las siguientes reglas de conmutación

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = 0 \quad ; \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm \hbar \hat{L}_\pm \quad (8.43)$$

y evalúe los operadores $\hat{L}_+ \hat{L}_-$ y $\hat{L}_- \hat{L}_+$ en términos de \hat{L}^2 y \hat{L}_z .

- b) Simbolicemos mediante $|Y_{\ell,m}\rangle$ al ket normalizado correspondiente a un autoestado de \hat{L}^2 y \hat{L}_z con autovalores respectivos $\ell(\ell+1)\hbar^2$ y $m\hbar$. Obtenga la norma de los estados $\hat{L}_+|Y_{\ell,m}\rangle$ y $\hat{L}_-|Y_{\ell,m}\rangle$.
- c) Usando las reglas de conmutación (8.43), demuestre que:
- i) $\hat{L}_+|Y_{\ell,m}\rangle$ y $\hat{L}_-|Y_{\ell,m}\rangle$ son autoestados de \hat{L}^2 con autovalor $\ell(\ell+1)\hbar^2$;
 - ii) $\hat{L}_+|Y_{\ell,m}\rangle$ es autoestado de \hat{L}_z con autovalor $(m+1)\hbar$ y $\hat{L}_-|Y_{\ell,m}\rangle$ es autoestado de \hat{L}_z con autovalor $(m-1)\hbar$.
- d) Usando los resultados de los dos apartados anteriores, obtenga la regla de actuación de los operadores de escalera \hat{L}_\pm sobre el estado $|Y_{\ell,m}\rangle$.
- e) Exprese los operadores \hat{L}_x y \hat{L}_y en términos de los operadores de escalera. Como consecuencia, evalúe los valores medios de L_x , L_y , L_x^2 y L_y^2 en el estado $|Y_{\ell,m}\rangle$. Comente el resultado.

Solución:

- a) Si usamos las reglas de conmutación del momento angular

$$\begin{aligned} [\hat{L}^2, \hat{L}_+] &= [\hat{L}^2, \hat{L}_x + i\hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_x] + i[\hat{L}^2, \hat{L}_y] = 0 \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_+] &= [\hat{L}_z, \hat{L}_x + i\hat{L}_y] = [\hat{L}_z, \hat{L}_x] + i[\hat{L}_z, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_y + \hbar\hat{L}_x = \hbar\hat{L}_+ \end{aligned}$$

demostrándose de idéntica manera que $[\hat{L}^2, \hat{L}_-] = 0$ y que $[\hat{L}_z, \hat{L}_-] = -\hbar\hat{L}_-$.

Por otra parte,

$$\hat{L}_+ \hat{L}_- = (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)(\hat{L}_x - i\hat{L}_y) = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 - i\hat{L}_x \hat{L}_y + i\hat{L}_y \hat{L}_x = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 - i[\hat{L}_x, \hat{L}_y].$$

Como $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$ y $\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2$, nos queda

$$\hat{L}_+ \hat{L}_- = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z. \quad (8.44)$$

De igual forma se llega a que

$$\hat{L}_- \hat{L}_+ = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z \quad (8.45)$$

- b) La norma al cuadrado de $\hat{L}_+|Y_{\ell,m}\rangle \equiv |\hat{L}_+ Y_{\ell,m}\rangle$ es igual al producto escalar $\langle \hat{L}_+ Y_{\ell,m} | \hat{L}_+ Y_{\ell,m} \rangle$. Usando la definición de operador adjunto, que $\hat{L}_+^\dagger = \hat{L}_-$ y la relación (8.45), tenemos que

$$\|\hat{L}_+|Y_{\ell,m}\rangle\|^2 = \langle \hat{L}_+ Y_{\ell,m} | \hat{L}_+ Y_{\ell,m} \rangle = \langle Y_{\ell,m} | \hat{L}_- \hat{L}_+ Y_{\ell,m} \rangle$$

y como

$$\hat{L}_-\hat{L}_+|Y_{\ell,m}\rangle = \left(\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z\right)|Y_{\ell,m}\rangle = (\ell(\ell+1) - m^2 - m)\hbar^2|Y_{\ell,m}\rangle$$

queda que

$$\|\hat{L}_+|Y_{\ell,m}\rangle\| = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m+1)}. \quad (8.46)$$

Análogamente se prueba que

$$\|\hat{L}_-|Y_{\ell,m}\rangle\| = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m-1)}. \quad (8.47)$$

c) Partiendo de $[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = 0$, tenemos que

$$\hat{L}^2\hat{L}_\pm|Y_{\ell,m}\rangle = \hat{L}_\pm\hat{L}^2|Y_{\ell,m}\rangle$$

y haciendo actuar \hat{L}^2 sobre $|Y_{\ell,m}\rangle$ en el segundo miembro de la igualdad anterior llegamos a que

$$\hat{L}^2(\hat{L}_\pm|Y_{\ell,m}\rangle) = \ell(\ell+1)\hbar^2(\hat{L}_\pm|Y_{\ell,m}\rangle),$$

por lo que $\hat{L}_+|Y_{\ell,m}\rangle$ y $\hat{L}_-|Y_{\ell,m}\rangle$ son autoestados de \hat{L}^2 con autovalor $\ell(\ell+1)\hbar^2$.

Partamos ahora de $[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm\hbar\hat{L}_\pm$, lo que implica que $\hat{L}_z\hat{L}_\pm = \hat{L}_\pm(\hat{L}_z \pm \hbar)$. Entonces

$$\hat{L}_z(\hat{L}_\pm|Y_{\ell,m}\rangle) = \hat{L}_\pm(\hat{L}_z \pm \hbar)|Y_{\ell,m}\rangle = (m \pm 1)\hbar(\hat{L}_\pm|Y_{\ell,m}\rangle)$$

y $\hat{L}_+|Y_{\ell,m}\rangle$ es autoestado de \hat{L}_z con autovalor $(m+1)\hbar$, mientras que $\hat{L}_-|Y_{\ell,m}\rangle$ es autoestado de \hat{L}_z con autovalor $(m-1)\hbar$.

d) En el espacio de las funciones de onda angulares, sólo hay una autofunción común a \hat{L}^2 y \hat{L}_z con autovalores dados (salvo constante multiplicativa). Por tanto, de acuerdo con los resultados del apartado c)

$$\hat{L}_+|Y_{\ell,m}\rangle = \alpha|Y_{\ell,m+1}\rangle \quad ; \quad \hat{L}_-|Y_{\ell,m}\rangle = \beta|Y_{\ell,m-1}\rangle.$$

donde α y β son constantes de proporcionalidad. Como los kets normalizados $|Y_{\ell,m}\rangle$ están definidos salvo constante multiplicativa de módulo unidad, podemos escoger ésta de modo que α y β sean reales y positivos. Entonces α será igual a la norma de $\hat{L}_+|Y_{\ell,m}\rangle$ y β a la de $\hat{L}_-|Y_{\ell,m}\rangle$. Usando entonces los resultados del apartado b) llegamos a que la actuación de los operadores de escalera es:

$$\hat{L}_+|Y_{\ell,m}\rangle = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m+1)}|Y_{\ell,m+1}\rangle \quad \text{con} \quad \hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$$

$$\hat{L}_-|Y_{\ell,m}\rangle = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m-1)}|Y_{\ell,m-1}\rangle \quad \text{con} \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$$

(8.48)

(observe que $\hat{L}_+|Y_{\ell,\ell}\rangle = 0$ y que $\hat{L}_-|Y_{\ell,-\ell}\rangle = 0$). La definición de los armónicos esféricos que vimos en el epígrafe §3 es consistente con las relaciones (8.48).

e) A partir de la definición de los operadores de escaleras, es inmediato ver que

$$\hat{L}_x = \frac{1}{2} (\hat{L}_+ + \hat{L}_-) \quad ; \quad \hat{L}_y = \frac{1}{2i} (\hat{L}_+ - \hat{L}_-)$$

y, entonces,

$$\hat{L}_x |Y_{\ell,m}\rangle = \frac{1}{2} \hat{L}_+ |Y_{\ell,m}\rangle + \frac{1}{2} \hat{L}_- |Y_{\ell,m}\rangle$$

$$\hat{L}_y |Y_{\ell,m}\rangle = \frac{1}{2i} \hat{L}_+ |Y_{\ell,m}\rangle - \frac{1}{2i} \hat{L}_- |Y_{\ell,m}\rangle.$$

Aplicando ahora las reglas de actuación (8.48) tenemos que

$$\hat{L}_x |Y_{\ell,m}\rangle = \frac{\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)-m(m+1)}}{2} |Y_{\ell,m+1}\rangle + \frac{\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)-m(m-1)}}{2} |Y_{\ell,m-1}\rangle$$

$$\hat{L}_y |Y_{\ell,m}\rangle = \frac{\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)-m(m+1)}}{2i} |Y_{\ell,m+1}\rangle - \frac{\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)-m(m-1)}}{2i} |Y_{\ell,m-1}\rangle.$$

(8.49)

Los kets $|Y_{\ell,m}\rangle$ forman un conjunto ortonormal, ya que dos armónicos esféricos con distintos números cuánticos son autofunciones de un operador autoadjunto (\hat{L}^2 , \hat{L}_z o los dos) con autovalores diferentes:

$$\langle Y_{\ell,m}|Y_{\ell',m'}\rangle = \delta_{\ell,\ell'} \delta_{m,m'}. \quad (8.50)$$

De esta forma, $\hat{L}_x |Y_{\ell,m}\rangle$ y $\hat{L}_y |Y_{\ell,m}\rangle$ son combinación lineal de los estados $|Y_{\ell,m+1}\rangle$ y $|Y_{\ell,m-1}\rangle$, por lo que son ortogonales a $|Y_{\ell,m}\rangle$. Esto inmediatamente implica que para un autoestado de \hat{L}^2 y \hat{L}_z

$$\langle \hat{L}_x \rangle = \langle \hat{L}_y \rangle = 0.$$

Por otro lado, el valor medio de \hat{L}_x^2 es igual al cuadrado de la norma de $\hat{L}_x |Y_{\ell,m}\rangle$:

$$\langle \hat{L}_x^2 \rangle = \langle Y_{\ell,m} | \hat{L}_x^2 Y_{\ell,m} \rangle = \langle \hat{L}_x^\dagger Y_{\ell,m} | \hat{L}_x Y_{\ell,m} \rangle = \langle \hat{L}_x Y_{\ell,m} | \hat{L}_x Y_{\ell,m} \rangle = \| \hat{L}_x Y_{\ell,m} \|^2.$$

Partiendo del resultado (8.49), tenemos entonces que

$$\langle \hat{L}_x^2 \rangle = \frac{\hbar^2[\ell(\ell+1)-m(m+1)]}{4} + \frac{\hbar^2[\ell(\ell+1)-m(m-1)]}{4}$$

que también es igual a $\langle \hat{L}_y^2 \rangle$. Basta así operar para llegar a que

$$\langle \hat{L}_x^2 \rangle = \langle \hat{L}_y^2 \rangle = \frac{\ell(\ell+1)-m^2}{2} \hbar^2.$$

Naturalmente, estos son los mismos resultados a los que llegamos en el epígrafe §5 de la presente sección aunque siguiendo un razonamiento completamente diferente.

8.4. INTERPRETACIÓN PROBABILÍSTICA Y MOMENTO ANGULAR

§ 1. Los armónicos esféricos $Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$ constituyen la base de representación del espacio de Hilbert $\mathcal{L}_{\text{ang}}^2$ asociada al CCOC $\{\hat{L}^2, \hat{L}_z\}$. Como consecuencia, toda función $\vartheta(\theta, \varphi)$ de $\mathcal{L}_{\text{ang}}^2$ puede expresarse como combinación lineal de las funciones ortonormales $Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$,

$$\vartheta(\theta, \varphi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} z_{\ell,m} Y_{\ell,m}(\theta, \varphi), \quad (8.51)$$

donde las coordenadas $z_{\ell,m}$ están dadas por el producto escalar en $\mathcal{L}_{\text{ang}}^2$

$$z_{\ell,m} = \langle Y_{\ell,m} | \vartheta \rangle = \int_0^\pi \sin \theta \int_0^{2\pi} Y_{\ell,m}^*(\theta, \varphi) \vartheta(\theta, \varphi) d\theta d\varphi. \quad (8.52)$$

Si $\vartheta(\theta, \varphi)$ está normalizada, las coordenadas $z_{\ell,m}$ informan directamente sobre las probabilidades de ocurrencia en una medida de \hat{L}^2 y de \hat{L}_z . En concreto, $p_{\ell,m} \equiv |z_{\ell,m}|^2$ es la probabilidad de que una medición simultánea de \hat{L}^2 y \hat{L}_z dé como resultado $\ell(\ell+1)\hbar^2$ y $m\hbar$. Como consecuencia, la probabilidad de ocurrencia en una medida de \hat{L}^2 es

$$\Pr_{L^2}(\ell(\ell+1)\hbar^2) = \sum_{m=-\ell}^{+\ell} p_{\ell,m} = \sum_{m=-\ell}^{+\ell} |z_{\ell,m}|^2 \quad (8.53)$$

y en una medida de \hat{L}_z ,

$$\Pr_{L_z}(m\hbar) = \sum_{\ell=|m|}^{+\infty} p_{\ell,m} = \sum_{\ell=|m|}^{+\infty} |z_{\ell,m}|^2. \quad (8.54)$$

De esta forma, los cálculos de los valores medios e incertidumbres de L^2 y L_z son inmediatos a partir de la expansión (8.51) en armónicos esféricos.

§ 2. Pensemos ahora en una función de onda $\Psi(\mathbf{r})$, no necesariamente factorizada en una parte radial y otra angular. Si expresamos $\Psi(\mathbf{r})$ en coordenadas esféricas, $\Psi(r, \theta, \varphi)$, para cada valor de $r \in [0, \infty)$ tenemos una función de $\mathcal{L}_{\text{ang}}^2$ a la que podemos aplicar las expresiones del epígrafe anterior. Como consecuencia,

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} c_{\ell,m}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \quad (8.55)$$

$$\text{con } c_{\ell,m}(r) = \int_0^\pi \sin \theta \int_0^{2\pi} Y_{\ell,m}^*(\theta, \varphi) \Psi(r, \theta, \varphi) d\theta d\varphi.$$

Si $\Psi(\mathbf{r})$ está normalizada, la cantidad $r^2 |c_{\ell,m}(r)|^2 dr$ es igual a la probabilidad de que al medir simultáneamente la coordenada radial r , L^2 y L_z se obtengan, respectivamente, un resultado en el intervalo $(r, r + dr)$, el valor $\ell(\ell + 1)\hbar^2$ y el valor $m\hbar$.² De esta manera, la densidad de probabilidad radial será

$$\rho_{\text{rad}}(r) = \sum_{\ell=0}^{+\infty} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} r^2 |c_{\ell,m}(r)|^2 \quad (8.56)$$

y la probabilidad $p_{\ell,m}$ de obtener $\ell(\ell + 1)\hbar^2$ y $m\hbar$ en una medida simultánea de \hat{L}^2 y \hat{L}_z estará dada por

$$p_{\ell,m} = \int_0^\infty r^2 |c_{\ell,m}(r)|^2 dr. \quad (8.57)$$

Así, las probabilidades de ocurrencia en medidas independientes de \hat{L}^2 y de \hat{L}_z son

$$\Pr_{L^2}(\ell(\ell + 1)\hbar^2) = \sum_{m=-\ell}^{+\ell} p_{\ell,m} \quad ; \quad \Pr_{L_z}(m\hbar) = \sum_{\ell=|m|}^{+\infty} p_{\ell,m} \quad (8.58)$$

Veamos un par de ejemplos:

EJEMPLO 8.c. Probabilidades y momento angular I

Consideremos de nuevo la función de onda normalizada de un electrón del [ejemplo 8.a](#),

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{24a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/(2a_0)} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \cos \varphi \equiv R(r) \vartheta(\theta, \varphi)$$

donde a_0 es el radio de Bohr.

- a) Al medir L_z , ¿qué valores pueden obtenerse y con qué probabilidad? Como consecuencia halle el valor medio y la incertidumbre de L_z .

² Tenga en cuenta que r , L^2 y L_z son compatibles entre sí. Más aún, estas tres magnitudes físicas son un CCOC del espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$.

- b) Escriba $\vartheta(\theta, \varphi)$ como combinación lineal de armónicos esféricos.
 c) Obtenga el valor medio y la incertidumbre de L_x .
 d) Si se efectúa una medida ideal de L_z obteniéndose el valor $+\hbar$ ¿cuál será la función de onda colapsada $\Psi_{\text{out}}(\mathbf{r})$?

Solución:

a) Puesto que en el problema únicamente vamos a estudiar propiedades relativas al momento angular, podemos olvidarnos de la parte radial $R(r)$ de la función de onda y trabajar exclusivamente con la función normalizada

$$\vartheta(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \cos \varphi$$

perteneciente al espacio $\mathcal{L}_{\text{ang}}^2$ de funciones angulares.

Si tenemos en cuenta que $\cos \theta = (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})/2$, la función $\vartheta(\theta, \varphi)$ puede escribirse como

$$\vartheta(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{16\pi}} \sin \theta (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \left(\frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\varphi} + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi} \right).$$

Vemos así que $\vartheta(\theta, \varphi)$ es combinación lineal de dos autofunciones de \hat{L}_z con autovalores $+\hbar$ y $-\hbar$. Además, los coeficientes de tal combinación lineal son iguales de manera que

$$\Pr_{L_z}(+\hbar) = \Pr_{L_z}(-\hbar) = \frac{1}{2}$$

y al medir L_z se pueden obtener los resultados $\pm\hbar$ con igual probabilidad. En consecuencia

$$\langle L_z \rangle = \hbar \Pr_{|\Psi\rangle}(L_z = +\hbar) + (-\hbar) \Pr_{|\Psi\rangle}(L_z = -\hbar) = 0$$

$$\langle L_z^2 \rangle = (\hbar)^2 \Pr_{|\Psi\rangle}(L_z = +\hbar) + (-\hbar)^2 \Pr_{|\Psi\rangle}(L_z = -\hbar) = \hbar^2$$

e inmediatamente

$$\Delta L_z = \sqrt{\langle L_z^2 \rangle - \langle L_z \rangle^2} = \hbar.$$

b) Como vimos en el **ejemplo 8.a**, $\vartheta(\theta, \varphi)$ es autofunción de \hat{L}^2 con autovalor $2\hbar^2$. A la vista del resultado del apartado anterior, $\vartheta(\theta, \varphi)$ será combinación lineal de los armónicos esféricos $Y_{1,+1}$ e $Y_{1,-1}$ con coeficientes iguales en módulo. Teniendo en cuenta el convenio de signos en la definición de los armónicos esféricos que se puede ver en la **TABLA 8-1**, es inmediato comprobar que

$$\vartheta(\theta, \varphi) = \frac{-1}{\sqrt{2}} Y_{1,+1}(\theta, \varphi) + \frac{1}{\sqrt{2}} Y_{1,-1}(\theta, \varphi)$$

o en la notación de Dirac,

$$|\vartheta\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} |Y_{1,+1}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |Y_{1,-1}\rangle.$$

c) Para obtener $\langle L_x \rangle$ y ΔL_x , evaluemos previamente la actuación del operador \hat{L}_x sobre la función ϑ (o sobre el ket $|\vartheta\rangle$). Para ello usemos los operadores de escalera \hat{L}_{\pm} dados en (8.48). Como de acuerdo con esa regla de actuación se cumple que

$$\begin{aligned}\hat{L}_+|Y_{1,+1}\rangle &= 0 & \hat{L}_-|Y_{1,+1}\rangle &= \sqrt{2}\hbar|Y_{1,0}\rangle \\ \hat{L}_+|Y_{1,-1}\rangle &= \sqrt{2}\hbar|Y_{1,0}\rangle & \hat{L}_-|Y_{1,-1}\rangle &= 0\end{aligned}$$

tenemos que

$$\hat{L}_+|\vartheta\rangle = \hbar|Y_{1,0}\rangle \quad ; \quad \hat{L}_-|\vartheta\rangle = -\hbar|Y_{1,0}\rangle$$

por lo que

$$\hat{L}_x|\vartheta\rangle = \frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-)|\vartheta\rangle = \frac{1}{2}\hat{L}_+|\vartheta\rangle + \frac{1}{2}\hat{L}_-|\vartheta\rangle = 0.$$

Vemos así que $|\vartheta\rangle$ es un autoestado de la componente x del momento angular con autovalor nulo. De esta forma:

$$\langle L_x \rangle = 0. \quad ; \quad \Delta L_x = 0.$$

d) La medida de L_z se efectúa sobre la función de onda

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{-1}{\sqrt{2}} R(r) Y_{1,+1}(\theta, \varphi) + \frac{1}{\sqrt{2}} R(r) Y_{1,-1}(\theta, \varphi).$$

De acuerdo con el postulado de reducción de von Neumann, si el resultado de la medida ha sido $+\hbar$ la función de onda colapsada será

$$\Psi_{\text{out}}(\mathbf{r}) = \frac{-1}{\sqrt{2}} R(r) Y_{1,+1}(\theta, \varphi)$$

que es autofunción de \hat{L}_z con autovalor $+\hbar$.

EJEMPLO 8.d. Probabilidades y momento angular II

Designemos como $\Phi_{\ell,m}(\mathbf{r})$ a una función normalizada que es autofunción simultánea de los operadores \hat{L}^2 y \hat{L}_z con autovalores respectivos $\ell(\ell+1)\hbar^2$ y $m\hbar$. En un instante de tiempo dado, la función de onda de una partícula es

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4} \left(3\Phi_{0,0}(\mathbf{r}) + 2\Phi_{1,0}(\mathbf{r}) - i\Phi_{1,-1}(\mathbf{r}) + \Phi_{2,1}(\mathbf{r}) - \Phi_{2,0}(\mathbf{r}) \right).$$

Responda a las siguientes preguntas:

- a) Al medir L^2 sobre la partícula ¿qué valores pueden obtenerse y con qué probabilidades?
- b) ¿Cuál es el valor medio de L_z ? ¿Y su incertidumbre?

- c) Supongamos un hipotético dispositivo ideal \mathcal{M} que mide el valor de L_z . Si el resultado de la medida ha sido $L_z = 0$, obtenga la función de onda colapsada. ¿Ha inducido la medida un cambio en las probabilidades de ocurrencia de una medida de L^2 ? ¿Contradice la respuesta a esta última pregunta el hecho de que L^2 y L_z sean compatibles?

Solución:

- a) Independientemente de cómo sea la parte radial de cada función $\Phi_{\ell,m}(\mathbf{r})$, éstas constituyen un conjunto ortonormal. Por tanto

$$\|\Psi\|^2 = \left| \frac{3}{4} \right|^2 + \left| \frac{2}{4} \right|^2 + \left| \frac{-i}{4} \right|^2 + \left| \frac{1}{4} \right|^2 + \left| \frac{-1}{4} \right|^2 = 1$$

resultando estar normalizada.

Por inspección directa, al medir L^2 se pueden obtener los resultados correspondientes a los números cuánticos $\ell = 0, 1, 2$, esto es, $\{0, 2\hbar^2, 6\hbar^2\}$. Las probabilidades de ocurrencia respectivas se obtienen directamente de los coeficientes en la expresión de $\Psi(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} \Pr_{L^2}(0) &= \left| \frac{3}{4} \right|^2 = \frac{9}{16}; \quad \Pr_{L^2}(2\hbar^2) = \left| \frac{2}{4} \right|^2 + \left| \frac{-i}{4} \right|^2 = \frac{5}{16} \\ \Pr_{L^2}(6\hbar^2) &= \left| \frac{1}{4} \right|^2 + \left| \frac{-1}{4} \right|^2 = \frac{2}{16} \end{aligned}$$

- b) El cálculo es, de nuevo, directo a partir de los coeficientes de $\Psi(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} \langle L_z \rangle &= \left| \frac{3}{4} \right|^2 \times 0 + \left| \frac{2}{4} \right|^2 \times 0 + \left| \frac{-i}{4} \right|^2 \times (-\hbar) + \left| \frac{1}{4} \right|^2 \times (+\hbar) + \left| \frac{-1}{4} \right|^2 \times 0 = 0 \\ \langle L_z^2 \rangle &= \left| \frac{3}{4} \right|^2 \times 0^2 + \left| \frac{2}{4} \right|^2 \times 0^2 + \left| \frac{-i}{4} \right|^2 \times (-\hbar)^2 + \left| \frac{1}{4} \right|^2 \times (+\hbar)^2 + \left| \frac{-1}{4} \right|^2 \times 0^2 = \frac{\hbar^2}{8} \end{aligned}$$

y, entonces,

$$\langle L_z \rangle = 0 \quad ; \quad \Delta L_z = \frac{1}{2\sqrt{2}}\hbar$$

- c) Tras la medida, la función de onda colapsada es

$$\Psi_{\text{después}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4} \left(3\Phi_{0,0}(\mathbf{r}) + 2\Phi_{1,0}(\mathbf{r}) - \Phi_{2,0}(\mathbf{r}) \right)$$

cuya norma al cuadrado es

$$\|\Psi_{\text{después}}\|^2 = \left| \frac{3}{4} \right|^2 + \left| \frac{2}{4} \right|^2 + \left| \frac{-1}{4} \right|^2 = \frac{7}{8}.$$

Por tanto, las probabilidades de ocurrencia de una medida de L^2 en la función de onda $\Psi_{\text{después}}$ son

$$\Pr_{L^2}(0) = \frac{8}{7} \times \left| \frac{3}{4} \right|^2 = \frac{9}{14}; \quad \Pr_{L^2}(2\hbar^2) = \frac{8}{7} \times \left| \frac{2}{4} \right|^2 = \frac{4}{14}; \quad \Pr_{L^2}(6\hbar^2) = \frac{8}{7} \times \left| \frac{1}{4} \right|^2 = \frac{1}{14},$$

que son distintas a las de la función de onda original $\Psi(\mathbf{r})$. Este resultado en absoluto contradice el teorema de compatibilidad, ya que éste afirma que L^2 y L_z pueden medirse simultáneamente con precisión arbitraria. Para que esto sea posible, una medida de L_z sobre un autoestado de L^2 , debe resultar en un estado colapsado que siga siendo autoestado de L^2 con igual autovalor. Sin embargo, en el presente ejemplo el estado inicial no es autoestado de L^2 , por lo que el enunciado anterior no es aplicable.

8.5. ESTADOS ESTACIONARIOS EN CAMPOS CENTRALES

§ 1. Pensemos en una partícula puntual de masa M sometida a la acción de una fuerza central:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = F(r)\mathbf{u}_r.$$

Dicha fuerza es conservativa y deriva de una energía potencial $V(r)$ que cumple

$$F(r) = -\frac{d}{dr}V(r).$$

Así, el operador hamiltoniano que representa a la energía mecánica de la partícula es

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V(r).$$

Si ahora expresamos el operador de energía cinética \hat{K} en términos de \hat{p}_r^2 y \hat{L}^2 (cfr. §8.1.3), tenemos que

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2Mr^2} \hat{L}^2 + V(r). \quad (8.59)$$

Puesto que en coordenadas esféricas \hat{L}^2 únicamente actúa sobre variables angulares, la expresión (8.59) muestra claramente que \hat{H} y \hat{L}^2 son compatibles (comutan entre sí) si la fuerza que actúa sobre la partícula es central. Obviamente, \hat{L}_z también comuta con \hat{H} y \hat{L}^2 , por lo que estos tres operadores son un conjunto compatible. Podemos anticipar que $\{\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z\}$ es, además, completo.

Esto es, si una partícula está sometida a la acción de una fuerza central, existe una base de representación formada por autofunciones simultáneas de $\{\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z\}$ que están caracterizadas únicamente por los autovalores correspondientes.

§ 2. Simbolicemos mediante $\Phi_{E,\ell,m}(\mathbf{r})$ a una de estas autofunciones que, por tanto, ha de satisfacer las ecuaciones de autovalores

$$\hat{H}\Phi_{E,\ell,m}(\mathbf{r}) = E\Phi_{E,\ell,m}(\mathbf{r}) \quad (8.60a)$$

$$\hat{L}^2\Phi_{E,\ell,m}(\mathbf{r}) = \ell(\ell+1)\hbar^2\Phi_{E,\ell,m}(\mathbf{r}) \quad (8.60b)$$

$$\hat{L}_z\Phi_{E,\ell,m}(\mathbf{r}) = m\hbar\Phi_{E,\ell,m}(\mathbf{r}) \quad (8.60c)$$

donde, como ya sabemos, $\ell = 0, 1, 2, \dots$ y $m = -\ell, \dots, 0, \dots, +\ell$. Es evidente que la energía E no va a depender del número cuántico m puesto que la elección del eje OZ es siempre arbitraria y, por tanto, irrelevante para la energía en un sistema físico con simetría radial. De esta manera, como $\Phi_{E,\ell,m}(\mathbf{r})$ es autofunción del momento angular, su estructura ha de ser

$$\Phi_{E,\ell,m}(\mathbf{r}) = R_{E,\ell}(r)Y_{\ell,m}(\theta, \varphi). \quad (8.61)$$

Sustituyendo en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (8.60a) y usando la expresión (8.59), tenemos que la función radial $R_{E,\ell}(r)$ satisface la siguiente ecuación de autovalores:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2Mr^2} + V(r) \right] R_{E,\ell}(r) = E R_{E,\ell}(r). \quad (8.62)$$

Para cada valor del número cuántico ℓ , los valores de E para los que la ecuación (8.62) admite soluciones normalizadas en el sentido

$$\int_0^\infty r^2 |R_{E,\ell}(r)|^2 dr = 1$$

formarán parte del espectro puntual de \hat{H} . Más en concreto, serán los posibles valores de la energía de un estado estacionario realizable que, además, sea autoestado de \hat{L}^2 con autovalor $\ell(\ell+1)\hbar^2$. A su vez, los valores de E para los que la ecuación de autovalores (8.62) admite soluciones acotadas, pero no normalizables para todo $r \in [0, \infty)$, contribuirán al espectro continuo de \hat{H} .

§ 3. Como acabamos de ver, la resolución de la ecuación de Schrödinger tridimensional correspondiente a una fuerza central se transforma en un conjunto

de problemas unidimensionales [la ecuación de autovalores (8.62)], uno por cada valor del número cuántico ℓ .

De hecho, (8.62) es formalmente una ecuación de Schrödinger en una dimensión. En efecto, definamos la *función radial reducida* como

$$u_{E,\ell}(r) = r R_{E,\ell}(r), \quad \text{con } r \geq 0 \quad (8.63)$$

que, necesariamente, ha de satisfacer la condición $u_{E,\ell}(0) = 0$ ya que $R_{E,\ell}(r)$ es acotada (si $u_{E,\ell}(0) \neq 0$, la función de onda $\Phi_{E,\ell,m}(\mathbf{r})$ divergiría cuando $r \rightarrow 0$). Si sustituimos $R_{E,\ell}(r)$ por $u_{E,\ell}(r)/r$ en (8.62), tras efectuar explícitamente las derivadas y simplificar se llega a la denominada *ecuación de Schrödinger radial reducida*

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2Mr^2} + V(r) \right] u_{E,\ell}(r) = Eu_{E,\ell}(r) \quad (8.64)$$

Vemos así que $u_{E,\ell}(r)$ puede interpretarse como la autofunción con energía E de una partícula que se mueve en el intervalo unidimensional $r \in [0, \infty)$ bajo la acción de una *energía potencial efectiva*

$$V_\ell(r) = V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2Mr^2}, \quad \text{con } \ell = 0, 1, 2, \dots \quad (8.65)$$

(al término dependiente de ℓ se le suele llamar término centrífugo).

Debido a la condición de contorno $u_{E,\ell}(0) = 0$, fijado un valor de E existe (salvo constante multiplicativa) una única solución $u_{E,\ell}(r)$ de la ecuación diferencial (8.64). Como ya señalamos, aquellas energías E para las que exista una autofunción $u_{E,\ell}(r)$ normalizada, $\int_0^\infty |u_{E,\ell}(r)|^2 dr = 1$, formarán parte del espectro puntual de \hat{H} . Las energías para las que la autofunción no sea normalizable pero se mantenga acotada, pertenecerán al espectro continuo de \hat{H} .

Tenemos así que:

- Para una partícula de masa M sometida a la acción de una fuerza central que deriva de la energía potencial $V(r)$, el conjunto $\{H, L^2, L_z\}$ es un conjunto completo de observables compatibles.

Existirá entonces una base de representación formada por autofunciones simultáneas de $\{H, L^2, L_z\}$ con autovalores $\{E, \ell(\ell+1)\hbar^2, m\hbar\}$.

Cada una de estas autofunciones tendrá la estructura

$$\Phi_{E,\ell,m}(\mathbf{r}) = R_{E,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = \frac{1}{r} u_{E,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$$

donde $Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$ es un armónico esférico y $u_{E,\ell}(r)$ la autofunción (única, salvo constante multiplicativa) de la ecuación de Schrödinger radial reducida

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2Mr^2} + V(r) \right] u_{E,\ell}(r) = E u_{E,\ell}(r), \quad \text{con } u_{E,\ell}(0) = 0.$$

- Formalmente, el espectro del hamiltoniano es

$$\sigma(\hat{H}) = \bigcup_{\ell=0}^{\infty} \sigma_{(\ell)}(\hat{H}),$$

donde $\sigma_{(\ell)}(\hat{H})$ es el espectro de autoenergías de la ecuación de Schrödinger radial reducida para ℓ . Ello implica que para cada valor de ℓ y para cada autoenergía $E \in \sigma_{(\ell)}(\hat{H})$ hay $2\ell + 1$ autofunciones: aquellas correspondientes a los valores de m que están permitidos si fijamos ℓ .

§ 4. Supongamos que, para cada valor de ℓ , el espectro de autoenergías $\sigma_{\ell}(\hat{H})$ de la ecuación de Schrödinger radial reducida es enteramente puntual (la generalización de los siguientes resultados si hubiese parte continua es sencilla y se deja como ejercicio). Esto nos permite etiquetar cada autoenergía de (8.64) con *dos* números cuánticos: el propio valor de ℓ (al que se le suele llamar *número cuántico angular*) y un índice $n = 1, 2, \dots$ al que denominaremos *número cuántico radial* (a m se le llama *número cuántico magnético*). De acuerdo con esta notación, $E_{n,\ell}$ es la n -ésima autoenergía de la ecuación de Schrödinger radial reducida para ℓ ($E_{1,\ell} < E_{2,\ell} < E_{3,\ell} < \dots$).

Las autofunciones correspondientes se designarán también con estos tres números cuánticos:

$$\Phi_{n,\ell,m}(\mathbf{r}) = R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi), \quad \text{con} \quad \begin{cases} \ell = 0, 1, 2, \dots \\ n = 1, 2, 3, \dots \\ m = -\ell, \dots, 0, \dots, +\ell, \end{cases} \quad (8.66)$$

donde $u_{n,\ell}(r) = r R_{n,\ell}(r)$ es la autofunción normalizada de la ecuación de Schrödinger radial reducida (8.64) con autovalor $E_{n,\ell}$. Puesto que estas

autofunciones constituyen una base de representación ortonormal del espacio de funciones de onda de la partícula $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, satisfacen la condición de ortogonalidad

$$\langle \Phi_{n,\ell,m}(\mathbf{r}) | \Phi_{n',\ell',m'}(\mathbf{r}) \rangle = \delta_{n,n'} \delta_{\ell,\ell'} \delta_{m,m'} \quad (8.67)$$

y toda función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ de la partícula se podrá escribir como

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} c_{n,\ell,m}(t) \Phi_{n,\ell,m}(\mathbf{r})$$

con $c_{n,\ell,m}(t) = e^{-iE_{n,\ell}t/\hbar} c_{n,\ell,m}(0) = e^{-iE_{n,\ell}t/\hbar} \langle \Phi_{n,\ell,m} | \Psi(0) \rangle.$

(8.68)

Reordenando términos y sustituyendo $\Phi_{n,\ell,m}(\mathbf{r})$ por su expresión (8.61), tenemos que

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[\sum_{n=1}^{\infty} e^{-iE_{n,\ell}t/\hbar} R_{n,\ell}(r) \sum_{m=-\ell}^{+\ell} c_{n,\ell,m}(0) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \right]. \quad (8.69)$$

Cada término entre corchetes es una autofunción de \hat{L}^2 con autovalor $\ell(\ell+1)\hbar^2$ que se denomina *componente de $\Psi(\mathbf{r}, t)$ en onda s, p, d, f, g, h,...* según sea el valor de ℓ ($\ell = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$, respectivamente).

§ 5. De acuerdo con lo anterior, los niveles de energía se etiquetan mediante los números cuánticos n y ℓ . La degeneración del nivel con energía $E_{n,\ell}$ será $2\ell + 1$ (recordemos: ese es el número de valores posibles para el número cuántico m , fijado el de ℓ).

La ordenación de los niveles dependerá de las características de la energía potencial $V(r)$ pero, en todo caso, como las energías potenciales efectivas (8.65) cumplen que

$$V(r) = V_{\ell=0}(r) < V_{\ell}(r) \quad \text{para todo } r \quad \text{si } \ell = 1, 2, 3, 4, \dots$$

el nivel fundamental será el correspondiente a $\ell = 0$ y $n = 1$ (véase el **problema propuesto 8.5**). Sin embargo, puede ocurrir que existan dos (o más) autoenergías $E_{n,\ell}$ y $E_{n',\ell'}$ iguales entre sí. A este fenómeno se le conoce como **degeneración accidental**.

§ 6. Como ilustración consideremos una partícula que se puede mover libremente pero restringida al interior de una esfera de radio a . A este sistema físico lo

denominaremos *punto cuántico esférico*. La energía potencial correspondiente será

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r \in [0, a] \\ \infty & \text{si } r > a. \end{cases} \quad (8.70)$$

Puesto que la partícula no puede estar en la región $r > a$, por continuidad de la función de onda ésta ha de anularse si $r = a$.

De acuerdo con la teoría general, una base de representación del espacio de las funciones de onda de la partícula está formada por autofunciones simultáneas de la energía, de \hat{L}^2 y de \hat{L}_z , cuya estructura es

$$\Phi_{n,\ell,m}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} u_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi), \quad \text{con} \quad \begin{cases} \ell = 0, 1, 2, \dots \\ n = 1, 2, 3, \dots \\ m = -\ell, \dots, 0, \dots, +\ell. \end{cases} \quad (8.71)$$

$u_{n,\ell}(r)$ es una función continua y acotada que se anula en $r = 0$ y en $r \geq a$, mientras que $Y_{\ell,m}(r)$ es un armónico esférico. En el intervalo $[0, a]$, donde la energía potencial $V(r)$ es cero, $u_{n,\ell}(r)$ es solución de la ecuación de Schrödinger radial reducida

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2Mr^2} \right] u_{n,\ell}(r) = E_{n,\ell} u_{n,\ell}(r) \quad (8.72)$$

con las condiciones de contorno

$$u_{n,\ell}(0) = u_{n,\ell}(a) = 0$$

y la de normalización

$$\int_0^a |u_{n,\ell}(r)|^2 dr = 1. \quad (8.73)$$

Para $\ell = 0$ (autofunciones de la energía en onda s), la ecuación de Schrödinger (8.72) es completamente equivalente a la de un pozo cuadrado infinito unidimensional con paredes en $r = 0$ y $r = a$. Por tanto, aplicando los resultados del **ejemplo 6.d**

$$E_{n,0} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad \text{con } n = 1, 2, 3, \dots \quad (8.74)$$

$$u_{n,0}(r) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}r\right) \quad (8.75)$$

y, en particular, $E_{1,0} = \pi^2 \hbar^2 / (2Ma^2)$ será la energía fundamental del sistema.

Veamos ahora cuáles son las soluciones de (8.72) para un valor arbitrario del número cuántico $\ell > 0$. Definamos las siguientes cantidades y funciones adimensionalizadas:

$$\rho = r/a \quad \tilde{u}_{n,\ell}(\rho) = \sqrt{a} u_{n,\ell}(a\rho) \quad \varkappa_{n,\ell} = \sqrt{\frac{2Ma^2}{\hbar^2}} E_{n,\ell}. \quad (8.76)$$

La ecuación de Schrödinger radial reducida (8.72) y la condición de normalización (8.73) son, respectivamente,

$$\left[-\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \varkappa_{n,\ell}^2 \right] \tilde{u}_{n,\ell}(\rho) = 0, \quad \text{con } \tilde{u}_{n,\ell}(0) = \tilde{u}_{n,\ell}(1) = 0 \quad (8.77)$$

$$\int_0^1 |\tilde{u}_{n,\ell}(\rho)|^2 d\rho = 1. \quad (8.78)$$

Sin imponer que $\tilde{u}_{n,\ell}(1) = 0$ [pero sí que $\tilde{u}_{n,\ell}(0) = 0$], la solución de la ecuación (8.77) es

$$\tilde{u}_{n,\ell}(\rho) = \mathcal{A}_{n,\ell} \sqrt{\rho} J_{\ell+1/2}(\varkappa_{n,\ell}\rho), \quad (8.79)$$

donde $J_s(\varkappa)$ es la llamada *función de Bessel* de orden s y $\mathcal{A}_{n,\ell}$ una constante de normalización que se obtendría a partir de (8.78):

$$\mathcal{A}_{n,\ell} = \left[\int_0^1 \rho |J_{\ell+1/2}(\varkappa_{n,\ell}\rho)|^2 d\rho \right]^{-1/2}. \quad (8.80)$$

Como $\tilde{u}_{n,\ell}(1) = \mathcal{A}_{n,\ell} J_{\ell+1/2}(\varkappa_{n,\ell}) = 0$, las autoenergías $E_{n,\ell}$ se obtendrán a partir de los valores de $\varkappa_{n,\ell}$ que satisfagan la igualdad

$$J_{\ell+1/2}(\varkappa_{n,\ell}) = 0.$$

En otras palabras, $\varkappa_{n,\ell}$ es el n -ésimo valor positivo de la variable \varkappa para el que la función de Bessel $J_{\ell+1/2}(\varkappa)$ se anula.

En suma, las autoenergías y autofunciones de la partícula en el seno de un punto cuántico esférico de radio a son

$$E_{n,\ell} = \frac{\hbar^2}{2Ma} \varkappa_{n,\ell}^2, \quad \text{con } J_{\ell+1/2}(\varkappa_{n,\ell}) = 0 \quad [n = 1, 2, 3, \dots] \quad (8.81a)$$

$$\Phi_{n,\ell,m}(\mathbf{r}) = \mathcal{A}_{n,\ell} \times \frac{1}{a\sqrt{r}} J_{\ell+1/2} \left(\frac{\varkappa_{n,\ell} r}{a} \right) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \quad (8.81b)$$

bien entendido que $\Phi_{n,\ell,m}(\mathbf{r}) = 0$ si $r \geq a$.

ℓ	$\sqrt{\frac{\pi \varkappa}{2}} J_{\ell+1/2}(\varkappa)$	Ceros ($\varkappa_{1,\ell}, \varkappa_{2,\ell}, \dots$)
0	$\sin \varkappa$	3,141 6,283 9,425 12,566 ...
1	$\frac{\sin \varkappa - \varkappa \cos \varkappa}{\varkappa}$	4,493 7,725 10,904 14,066 ...
2	$\frac{(3 - \varkappa^2) \sin \varkappa - 3\varkappa \cos \varkappa}{\varkappa^2}$	5,763 9,095 12,323 15,515 ...
3	$\frac{(15 - 6\varkappa^2) \sin \varkappa - (15x - \varkappa^3) \cos \varkappa}{\varkappa^3}$	6,988 10,417 13,698 16,924 ...
4	$\frac{(105 - 45\varkappa^2 + \varkappa^4) \sin \varkappa - (105\varkappa + 10\varkappa^3) \cos \varkappa}{\varkappa^4}$	8,183 11,705 15,040 18,301 ...

TABLA 8-2 Funciones de Bessel $J_s(\varkappa)$ de orden semientero más bajo

A partir de la expresión (8.81a) y con la ayuda de los datos de la **TABLA 8-2**, podemos obtener fácilmente las energías $E_{n,\ell}$ y las degeneraciones $g_{n,\ell}$ de los primeros niveles energéticos del sistema. Recordando que $g_{n,\ell} = 2\ell + 1$, tenemos que

Niveles (n, ℓ)	$(2Ma^2)/\hbar^2 E_{n,\ell}$	$g_{n,\ell}$	
1s (1, 0)	9.870	1	
1p (1, 1)	20.191	3	
1d (1, 2)	33.218	5	
2s (2, 0)	39.478	1	
1f (1, 3)	48.831	7	
2p (2, 1)	59.689	3	
...	

(8.82)

A su vez, es interesante analizar cómo son las densidades radiales reducidas $\rho_{\text{rad}}(r)$ en los autoestados $\Phi_{n,\ell,m}(\mathbf{r})$, que estarán dadas por

$$\rho_{\text{rad}}(r) = r^2 |R_{n,\ell}(r)|^2 = |u_{n,\ell}(r)|^2 = \frac{A_{n,\ell}^2 r}{a^2} J_{\ell+1/2}^2 \left(\frac{\varkappa_{n,\ell} r}{a} \right). \quad (8.83)$$

En la **FIG. 8-2** representamos las densidades radiales reducidas para los seis primeros niveles energéticos del sistema. Como puede observarse, $\rho_{\text{rad}}(r)$ tiene

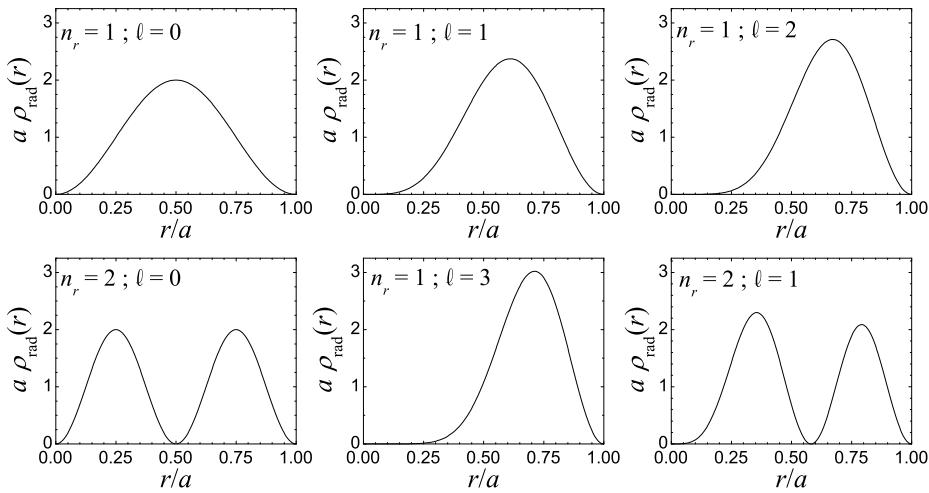


Figura 8-2. Densidad radial reducida para las autofunciones de la energía correspondientes a los seis primeros niveles energéticos de una partícula en el seno de un punto cuántico esférico. Recuerde que $\rho_{\text{rad}}(r)dr$ es la probabilidad de que al medir la coordenada radial de la partícula se encuentre un resultado en el intervalo $(r, r + dr)$

$n - 1$ ceros en la región $0 < r < a$ y, a medida que aumenta ℓ , la probabilidad de detectar a la partícula en la región central del punto cuántico ($r \sim 0$) va disminuyendo. Ello es consecuencia de la influencia que tiene el llamado *término centrífugo* $\ell(\ell + 1)\hbar^2/(2Mr^2)$ en la forma de la función de onda $u_{n,\ell}(r)$ que es solución de la ecuación de Schrödinger radial reducida.

La densidad $\rho_{\text{rad}}(r)$ es, salvo factor r^2 , el promedio de la densidad de probabilidad $\rho(\mathbf{r})$ sobre todas las direcciones del espacio, esto es, sobre los ángulos $\{\theta, \varphi\}$ [cfr. la expresión (8.17)]. Si exceptuamos las autofunciones de la energía en onda s , que tienen simetría esférica, la densidad de probabilidad es anisótropa. Ahora bien, para las autofunciones $\Phi_{n,\ell,m}(\mathbf{r})$ tal densidad de probabilidad no depende de la coordenada angular φ , aunque su forma sí depende del número cuántico m . En concreto, para una partícula en el estado $\Phi_{n,\ell,m}(\mathbf{r})$

$$\rho(\mathbf{r}) = |R_{n,\ell}(r)Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)|^2 = \frac{A_{n,\ell}^2}{2\pi a^2 r} J_{\ell+1/2}^2 \left(\frac{\varkappa_{n,\ell} r}{a} \right) P_{\ell,m}^2(\cos \theta), \quad (8.84)$$

donde $P_{\ell,m}(\gamma)$ es la función especial de Legendre que introdujimos en §8.3.3. Si fijamos un valor de r , $\rho(\mathbf{r})$ se anulará para aquellas direcciones que formen un ángulo θ con el eje OZ tales que $P_{\ell,m}(\cos \theta) = 0$.

PROBLEMAS PROPUESTOS

PROBLEMA 8.1. *Probabilidades y momento angular III*

En un instante dado, la función de onda de una partícula es

$$\Psi(x, y, z) = \mathcal{A} g(r) \frac{xy + yz + zx}{r^2}, \text{ con } g(r) = \exp(-r/a),$$

donde \mathcal{A} es una constante de normalización y $a > 0$ una constante con dimensiones de longitud.

- a) ¿Cuál es la probabilidad de que una medida de \hat{L}^2 de el valor 0? ¿Cuál es la probabilidad de que dé el valor $6\hbar^2$?
- b) Al medir L_z , ¿qué valores pueden obtenerse y con qué probabilidades?
- c) Evalúe el valor medio de las tres componentes del momento angular \mathbf{L} .
- d) Se realiza una medida ideal del *valor absoluto* de L_z . Si el resultado fuese $|L_z| = \hbar$, ¿cuál sería la función de onda colapsada de la partícula justo después de efectuada la medida?
- e) Obtenga y represente la densidad radial reducida $\rho_{\text{rad}}(r)$ de la partícula.

Ayuda: Exprese $\Psi(\mathbf{r})$ en coordenadas esféricas y escriba su parte angular como combinación lineal de armónicos esféricos. Para ello utilice la **TABLA 8-1**.

PROBLEMA 8.2. *Matrices del momento angular*

Cualquier magnitud física A dependiente exclusivamente del momento angular \mathbf{L} es compatible con L^2 . Ello implica que si \hat{A} es el operador representativo de tal magnitud, entonces

$$[\hat{A}, \hat{L}^2] = 0$$

Como consecuencia, si $\vartheta(\theta, \varphi)$ es una función del espacio de las funciones de onda angulares que es autofunción de \hat{L}^2 con autovalor $\ell(\ell+1)\hbar^2$, la función $\hat{A}\vartheta(\theta, \varphi)$ también será autofunción de \hat{L}^2 con igual autovalor. En términos matemáticos, si \mathcal{W}_ℓ es el subespacio de funciones de onda angulares que son autofunción de \hat{L}^2 con autovalor $\ell(\ell+1)\hbar^2$, entonces \mathcal{W}_ℓ es invariante bajo el operador \hat{A} . Esto nos permite construir la representación matricial del operador \hat{A} pero restringida al subespacio \mathcal{W}_ℓ . Como la dimensión algebraica de \mathcal{W}_ℓ es $2\ell+1$, dicha representación será una matriz de dimensiones $(2\ell+1) \times (2\ell+1)$. Si trabajamos en la base de armónicos esféricos $Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$:

- a) Obtenga las matrices representativas de los operadores de escalera \hat{L}_+ y \hat{L}_- en los subespacios \mathcal{W}_0 , \mathcal{W}_1 y \mathcal{W}_2 .
- b) Como consecuencia, obtenga la representación matricial de los operadores \hat{L}_x y \hat{L}_y en dichos subespacios.

PROBLEMA 8.3. Autofunciones de L_x

Consideremos el subespacio \mathcal{W}_1 formado por las funciones de onda angulares que son autofunción de \hat{L}^2 con autovalor $2\hbar^2$. En la base ortonormal $\{\mathbf{Y}_{1,1}, \mathbf{Y}_{1,0}, \mathbf{Y}_{1,-1}\}$ de tal subespacio, la representación matricial del operador \hat{L}_x correspondiente a la componente x del momento angular es

$$\mathbb{L}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

tal y como debió obtener en el problema anterior.

- a) Obtenga las autofunciones de \hat{L}_x pertenecientes al subespacio \mathcal{W}_1 , expresándolas como combinación lineal de los armónicos esféricos $\mathbf{Y}_{1,m}(\theta, \varphi)$.
- b) En un instante dado de tiempo, la función de onda de una partícula es

$$\Psi(\mathbf{r}) = g(r) \sin \theta \cos \varphi$$

donde $g(r)$ es una función radial. Al medir L_x sobre dicha partícula ¿qué valores pueden obtenerse y con qué probabilidad?

PROBLEMA 8.4. Partícula moviéndose sobre una superficie esférica

Una partícula de masa M se mueve libremente sobre la superficie de una esfera de radio a . Ello implica que su coordenada radial r toma un valor $r = a$ prácticamente definido (no puede estarlo del todo porque r toma valores continuos). Como consecuencia, la función de onda de la partícula dependerá únicamente de las coordenadas angulares θ y φ .

- a) Escriba el hamiltoniano del sistema.
- b) Obtenga los niveles energéticos del sistema y su degeneración.

PROBLEMA 8.5. Nivel fundamental en un campo central

Consideremos una partícula de masa M que se mueve en una dimensión bajo la acción de una fuerza que deriva de una energía potencial $V(x)$. Sea E_0 la energía fundamental de la partícula. Demuestre que si la energía potencial de la partícula fuese $V(x) + W(x)$, con $W(x)$ una función estrictamente positiva, entonces la nueva energía fundamental E'_0 es mayor que E_0 . A partir de este resultado, pruebe que el nivel fundamental de una partícula sometida a una fuerza central se corresponde al valor $\ell = 0$ del número cuántico angular.

PROBLEMA 8.6. Probabilidad radial en un punto cuántico esférico

Una partícula de masa M se mueve libremente pero confinada en el interior de una esfera de radio a . Supongamos que la partícula se encuentra en su estado fundamental. Obtenga el valor medio de la coordenada radial y su incertidumbre.

Ayuda: $\int_0^1 \varkappa \sin^2(\pi \varkappa) d\varkappa = \frac{1}{12\pi^2} (2\pi^2 - 3)$

PROBLEMA 8.7. Función de onda en un punto cuántico esférico

Una partícula se encuentra en el primer nivel excitado de un punto cuántico esférico de radio a . Se sabe que al medir la componente z del momento angular se pueden obtener los valores 0 y $+\hbar$ con igual probabilidad. Escriba la función de onda más general compatible con esta información. Halle, para esta función de onda genérica, el valor medio de la posición \mathbf{r} del momento angular \mathbf{L} .

Dato: El valor medio de la coordenada radial es $\langle r \rangle \simeq 0,520 a$.

PROBLEMA 8.8. Función de onda radial de una partícula libre

Una partícula de masa M se mueve libremente en el espacio. Como su energía es exclusivamente cinética ($H = K$), los observables $\{H, L^2, L_z\}$ constituyen un CCOC del sistema. La partícula se encuentra en un estado estacionario con energía E que, además, es autoestado de L^2 con autovalor $\ell(\ell+1)\hbar^2$ y de L_z con autovalor $m\hbar$. Obtenga, salvo constante multiplicativa, su función de onda (no normalizable). ¿Cómo se comporta tal función de onda cuando $r \gg 0$?

TERCERA PARTE

Aplicaciones en sistemas simples

TEMA 9

ESTADOS LIGADOS EN POZOS CUADRADOS

Una vez aprendidos los fundamentos de la física cuántica llega la hora de su aplicación a problemas específicos. En el **capítulo 6** ya anticipamos algunos de estos problemas: la partícula libre, la partícula sometida a una fuerza constante, y la partícula confinada en una región finita del espacio.

Tras analizar cómo es la estructura del espectro de energías de una partícula en una dimensión espacial, estudiaremos los niveles de energía ligados cuando la energía potencial es constante a trozos. Bajo esta simplificación la resolución de la ecuación de Schrödinger es analítica, si bien las autoenergías se tendrán que obtener a partir de ecuaciones trascendentes. Ello nos permitirá caracterizar con bastante detalle propiedades de los estados estacionarios ligados.

Orientaciones generales al plan de trabajo

Los contenidos de este capítulo son fundamentalmente metodológicos. De hecho, las **secciones 9.2 y 9.3** son aplicaciones donde resulta difícil distinguir entre teoría y práctica. Sugerimos que dedique **15 horas** de trabajo personal que deben emplearse primordialmente a “reproducir” los diferentes casos tratados a lo largo del capítulo y a la resolución de problemas propuestos.

Objetivos del capítulo

- Conocer la estructura del espectro de energías de una partícula en una dimensión.
- Conocer las propiedades de los estados estacionarios ligados.
- Dominar la técnica de resolución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el caso de una energía potencial constante a trozos.

9.1. ESPECTRO DE ENERGÍAS EN UNA DIMENSIÓN

§ 1. Recordemos que si una partícula de masa M , que suponemos se mueve en una dimensión espacial, está sometida a la acción de una fuerza conservativa cuya energía potencial es $V(x)$, su dinámica está regida por la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \Psi(x, t) \equiv \hat{H} \Psi(x, t), \quad (9.1)$$

cuya solución general puede obtenerse a partir de las funciones de onda de los estados estacionarios

$$\Phi_E(x, t) = \Phi_E(x) e^{-iEt/\hbar} \quad \text{con} \quad \hat{H}\Phi_E(x) = E\Phi_E(x). \quad (9.2)$$

Así, el primer objetivo en el estudio de la dinámica de la partícula será resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo,

$$\hat{H}\Phi_E(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Phi_E(x) = E\Phi_E(x), \quad (9.3)$$

que determina las posibles autofunciones de la energía del sistema, tanto normalizables como no normalizables (aunque acotadas). En esta sección obtendremos algunas propiedades generales de las autofunciones y del espectro de energías que serán de interés en el futuro.

§ 2. Admitiendo que la energía potencial no tiene singularidades, *toda autofunción $\Phi_E(x)$ ha de ser continua, al igual que su primera derivada*. La continuidad de la función de onda es el requisito indispensable para que $\Phi_E(x)$ tenga sentido físico: si fuese discontinua el valor medio de la energía cinética divergiría. La continuidad de la derivada es además necesaria para que la función $\Phi_E(x)$ pueda ser una solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, ya que de lo contrario no podríamos aplicar sobre ella el operador d^2/dx^2 . La única excepción a esta segunda condición aparecerá en aquellos puntos en los que $V(x)$ sea singular, pero como estas singularidades son resultado de una descripción muy simplificada de la energía potencial comentaremos estos casos a medida que vayan apareciendo.

- Además, dado que el operador hamiltoniano es real, si $\Phi_E(x)$ es autofunción de \hat{H} con energía E también lo es $\Phi_E^*(x)$. Ello implica que *las autofunciones correspondientes a autovalores de la energía no degenerados son reales salvo constante multiplicativa*, ya que es la única manera de que $\Phi_E(x)$ y $\Phi_E^*(x)$ sean proporcionales. Para estas autofunciones el valor esperado del momento lineal será igual a cero.

Por otro lado, si $\Phi_E(x)$ y $\Phi_E^*(x)$ son dos autofunciones de un nivel energético degenerado, las funciones $\Phi_E(x) + \Phi_E^*(x)$ y $i[\Phi_E(x) - \Phi_E^*(x)]$, reales y linealmente independientes entre sí, son también autofunciones de dicho nivel. Esto implica que, *para cualquier nivel energético, siempre será posible encontrar una base ortogonal formada por autofunciones reales* (recuerde el **problema propuesto 6.7**).

- Otra propiedad importante es la siguiente: si derivamos $|\Phi_E(x, t)|^2$ respecto del tiempo y usamos la ecuación de Schrödinger llegamos, al igual que hicimos en la **sección 6.4**, a que

$$\frac{\partial |\Phi_E(x, t)|^2}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{i\hbar}{2M} \left[\Phi_E(x, t) \frac{\partial \Phi_E^*(x, t)}{\partial x} - \Phi_E^*(x, t) \frac{\partial \Phi_E(x, t)}{\partial x} \right] \right).$$

Como $\Phi_E(x, t) = \Phi_E(x) \exp(-iEt/\hbar)$, la derivada temporal es nula y el término entre paréntesis no puede depender de la posición:

$$\frac{i\hbar}{2M} \left[\Phi_E(x) \frac{d\Phi_E^*(x)}{dx} - \Phi_E^*(x) \frac{d\Phi_E(x)}{dx} \right] = \text{constante}. \quad (9.4)$$

Nótese que si la autofunción $\Phi_E(x)$ está normalizada, entonces el miembro izquierdo de esta igualdad es la densidad de corriente de probabilidad $J(x)$, mientras que si $\Phi_E(x)$ no fuese normalizable ese término describiría *aproximadamente* la dependencia espacial de la densidad de corriente de probabilidad de un estado cuasiestacionario con energía media E .

- Finalmente, dado que la ecuación de Schrödinger es una ecuación diferencial lineal, una autofunción de la energía queda definida completamente una vez que se conoce su comportamiento en una región limitada del espacio.

Aunque no haría falta demostrarlo en detalle, vamos a pensar en una autofunción genérica $\Phi_E(x)$. Como la función y su primera derivada son continuas, podemos hacer los desarrollos en serie de Taylor en torno del punto x_0 siguientes (despreciando términos de orden $(\delta x)^3$ y superiores)

$$\Phi_E(x_0 + \delta x) \simeq \Phi_E(x_0) + \delta x \Phi'_E(x_0) + \frac{1}{2}(\delta x)^2 \Phi''_E(x_0)$$

$$\Phi_E(x_0 - \delta x) \simeq \Phi_E(x_0) - \delta x \Phi'_E(x_0) + \frac{1}{2}(\delta x)^2 \Phi''_E(x_0),$$

con $\Phi''_E(x_0) = d^2\Phi_E(x)/dx^2|_{x=x_0}$. Sumando miembro a miembro y reordenando términos,

$$\Phi_E(x_0 + \delta x) \simeq -\Phi_E(x_0 - \delta x) + 2\Phi_E(x_0) + (\delta x)^2 \Phi''_E(x_0).$$

La anterior expresión es válida para cualquier función derivable, pero si ahora sustituimos $\Phi''_E(x_0)$ conforme con la ecuación de Schrödinger (9.3), tendremos que

$$\Phi_E(x_0 + \delta x) \simeq -\Phi_E(x_0 - \delta x) + \left[2 + (\delta x)^2 \frac{2M}{\hbar^2} [V(x) - E] \right] \Phi_E(x_0), \quad (9.5)$$

expresión exacta a orden $\mathcal{O}(\delta x)^3$. Como consecuencia, si conocemos la autofunción en los puntos x_0 y $x_0 - \delta x$, y utilizamos recurrentemente (9.5), podemos obtener la función de onda en cualquier otro punto de la recta real. De hecho (9.5) es una implementación del método de diferencias finitas que ya vimos en el epígrafe **§6.3.3** al hablar de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, aunque en este caso se ha hecho un desarrollo espacial.

Hemos comprobado cómo el conocimiento de la autofunción en una región del espacio, por muy limitada que sea, determina los valores de $\Phi_E(x)$ completamente. Además, debido a la linealidad de la ecuación de Schrödinger, la función de onda en un punto genérico x dependerá linealmente de sus valores en x_0 y $x_0 - \delta x$. En otras palabras, *una autofunción de la energía queda definida por su comportamiento en una región limitada del espacio*.

§ 3. Obtengamos ahora la estructura general del espectro de energías correspondiente a una energía potencial $V(x)$ dada. Para ello necesitamos un resultado previo: si en una zona del espacio la energía potencial es constante, $V(x) = V_0$, la autofunción de la energía en dicha región satisface la ecuación

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right] \Phi_E(x) = E\Phi_E(x)$$

cuya solución es (compruébelo por sustitución directa)

$$\boxed{\Phi_E(x) = \begin{cases} \mathcal{A}e^{+ikx} + \mathcal{B}e^{-ikx} & \text{si } E > V_0 \\ \mathcal{A}e^{+kx} + \mathcal{B}e^{-kx} & \text{si } E < V_0 \\ \mathcal{A} + \mathcal{B}x & \text{si } E = V_0 \end{cases} \quad \text{con } k = \frac{\sqrt{2M|E - V_0|}}{\hbar}} \quad (9.6)$$

siendo \mathcal{A} y \mathcal{B} constantes.

Admitamos además que la fuerza que actúa sobre la partícula es de corto alcance, anulándose si $|x| \gg 0$. De esta manera, la energía potencial de la cual deriva cumple que

$$V(x) = V_- \quad \text{si } x \ll 0$$

$$V(x) = V_+ \quad \text{si } x \gg 0$$

y supondremos sin pérdida de generalidad que $V_+ \geq V_-$ (vea la **FIG. 9-1**). Los comportamientos asintóticos de $\Phi_E(x)$ van a estar dados por (9.6), pero al no ser

independientes tendremos una serie de condiciones que ha de cumplir el espectro de energías de nuestro sistema. Para verlo conviene distinguir tres casos:

- $E > V_+$. Fijada una autoenergía E y usando (9.6),

$$\begin{aligned}\Phi_E(x) &= \mathcal{A}e^{+ik_-x} + \mathcal{B}e^{-ik_-x} \quad \text{si } x \ll 0 \quad \text{con } k_- = \sqrt{2M(E - V_-)}/\hbar \\ \Phi_E(x) &= \mathcal{C}e^{+ik_+x} + \mathcal{D}e^{-ik_+x} \quad \text{si } x \gg 0 \quad \text{con } k_+ = \sqrt{2M(E - V_+)}/\hbar\end{aligned}\tag{9.7}$$

y la relación lineal que existe entre $\Phi_E(x \ll 0)$ y $\Phi_E(x \gg 0)$ se traduce en una relación lineal entre los coeficientes (\mathcal{A} y \mathcal{B}) y (\mathcal{C} y \mathcal{D}). Podemos pues escribir que

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} \\ \mathcal{B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{C} \\ \mathcal{D} \end{pmatrix},\tag{9.8}$$

donde los coeficientes t_{ij} de esta matriz 2×2 dependen de la autoenergía E . Como la autofunción más general queda definida por dos coeficientes independientes, el conjunto de todas las autofunciones posibles es formalmente un subespacio lineal de dimensión 2. No habiendo ninguna limitación a la aplicación de (9.8) concluimos que ***todas las energías $E > V_+$ pertenecen al espectro continuo de la energía H , siendo su multiplicidad igual a dos.***

- $V_- < E < V_+$. Para una autoenergía en este rango se cumple que

$$\begin{aligned}\Phi_E(x) &= \mathcal{A}e^{+ik_-x} + \mathcal{B}e^{-ik_-x} \quad \text{si } x \ll 0 \quad \text{con } k_- = \sqrt{2M(E - V_-)}/\hbar \\ \Phi_E(x) &= \mathcal{C}e^{+\kappa_+x} + \mathcal{D}e^{-\kappa_+x} \quad \text{si } x \gg 0 \quad \text{con } \kappa_+ = \sqrt{2M(V_+ - E)}/\hbar\end{aligned}\tag{9.9}$$

donde los coeficientes \mathcal{A} , \mathcal{B} , \mathcal{C} y \mathcal{D} están relacionados entre sí mediante una expresión genérica idéntica a la (9.8). Sin embargo la autofunción $\Phi_E(x)$ no puede crecer indefinidamente cuando $x \rightarrow \infty$ ya que entonces no tendría sentido físico. Por tanto \mathcal{C} ha de ser igual a cero en (9.9) y los coeficientes \mathcal{A} y \mathcal{B} resultan ser proporcionales a \mathcal{D} . Cada autofunción queda entonces determinada únicamente por el valor de \mathcal{D} que, a todos los efectos, actúa como constante multiplicativa. ***Las energías en el intervalo (V_-, V_+) forman parte del espectro continuo pero no degenerado*** (multiplicidad igual a uno).

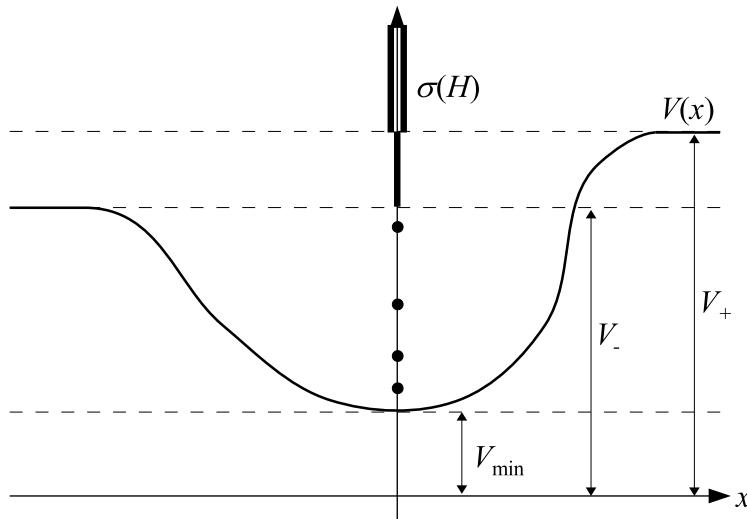


Figura 9-1. Estructura general del espectro de energías para una partícula bajo la acción de un potencial unidimensional $V(x)$. El espectro aparece representado esquemáticamente en el eje de ordenadas, señalándose la parte continua doblemente degenerada, continua no degenerada y puntual.

- $E < V_-$. En este caso tenemos que

$$\Phi_E(x) = \mathcal{A}e^{+\kappa_-x} + \mathcal{B}e^{-\kappa_-x} \quad \text{si } x \ll 0 \quad \text{con } \kappa_- = \sqrt{2M(V_- - E)}/\hbar$$

$$\Phi_E(x) = \mathcal{C}e^{+\kappa_+x} + \mathcal{D}e^{-\kappa_+x} \quad \text{si } x \gg 0 \quad \text{con } \kappa_+ = \sqrt{2M(V_+ - E)}/\hbar \quad (9.10)$$

pero necesariamente $\mathcal{B} = \mathcal{C} = 0$ (en caso de que no fuera así, la autofunción no estaría acotada cuando $|x| \rightarrow \infty$). Partiendo de (9.8) tendremos que

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \mathcal{D} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} \mathcal{A} = t_{12}\mathcal{D} \\ t_{22} = 0. \end{cases} \quad (9.11)$$

Han de cumplirse las dos ecuaciones. Pero únicamente para energías muy específicas se cumplirá que $t_{22} = 0$ o, lo que es lo mismo, que la autofunción resultante de la propagación de $\Phi_E(x \gg 0)$ no diverja. En ese caso, habrá únicamente una autofunción por autoenergía (salvo constante multiplicativa) que será normalizable ya que es continua y tiende a cero cuando $|x| \rightarrow \infty$. Si la autofunción es de norma unidad,

$$E = \langle H \rangle = -\frac{\hbar^2}{2M} \int_{\mathbb{R}} \Phi_E^*(x) \frac{d^2\Phi_E(x)}{dx^2} dx + \int_{\mathbb{R}} \Phi_E^*(x) V(x) \Phi_E(x) dx.$$

Si ahora integramos por partes en el primer término y usamos que $V(x) \geq V_{\min}$ en el segundo, siendo V_{\min} el mínimo absoluto de la energía potencial,

$$E \geq \frac{\hbar^2}{2M} \int_{\mathbb{R}} \left| \frac{d\Phi_E(x)}{dx} \right|^2 dx + \int_{\mathbb{R}} \Phi_E^*(x) V_{\min} \Phi_E(x) dx = \frac{\hbar^2}{2M} \int_{\mathbb{R}} \left| \frac{d\Phi_E(x)}{dx} \right|^2 dx + V_{\min}.$$

Dado que última integral es estrictamente positiva, $E > V_{\min}$. En definitiva: *de existir, el espectro puntual de H es no degenerado y está contenido en el intervalo (V_{\min}, V_-) .*

- Debemos recalcar aquí que estos resultados son aplicables si V_{\pm} son los límites de la energía potencial cuando $x \rightarrow \pm\infty$, pero sólo si $V(x)$ decrece a estos valores lo suficientemente rápido. En caso contrario los comportamientos asintóticos de la función de onda a partir de los que hemos deducido estas propiedades no serían correctos.

Tenemos en resumen que:

PROPIEDADES DEL ESPECTRO DE ENERGÍAS (1 dim)

Si $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} = V_{\pm}$ con $V_+ \geq V_-$ y $V_{\min} = \min V(x)$, entonces :

- $\sigma_c(H) \subseteq (V_-, \infty)$ y $\begin{cases} E > V_+ : \text{autoenergía con multiplicidad 2} \\ E \in (V_-, V_+) : \text{autoenergía con multiplicidad 1} \end{cases}$
- $\sigma_p(H) = \{E_1, E_2, \dots\} \subset (V_{\min}, V_-]$: el espectro puntual es no degenerado

Nota : si $V_+ \leq V_-$, deberemos intercambiar V_+ por V_- .

La ubicación de los valores frontera V_+ y V_- dentro del espectro depende de cada energía potencial (véase su definición en la **Figura 9-1**). Naturalmente no todas las partes del espectro (puntual, continuo no degenerado, continuo degenerado) tienen por qué estar presentes, ya que todo dependerá de la ordenación de los valores $\{V_{\min}, V_-, V_+\}$. Habrá casos en los que el espectro sea exclusivamente continuo doblemente degenerado (como la partícula libre), otros en los que sea continuo no degenerado (como una partícula sometida a una fuerza constante) y otros en los que sea un espectro puntual (por ejemplo, una partícula sometida a una fuerza recuperadora armónica).

§ 4. Tal y como dijimos en el **capítulo 6**, a los *estados estacionarios con función de onda normalizable se les denomina ligados*. Ello es así porque

la función de onda de la partícula está localizada en una región limitada del espacio debido a su decaimiento exponencial cuando $|x| \gg 0$.

- Una propiedad interesante de las autofunciones de los estados estacionarios ligados, conocida como **teorema de Sturm**, es la siguiente. Si llamamos *nodo* a un cero aislado de la autofunción, la autofunción del estado fundamental (el de menor energía) no tiene nodos, mientras que la del n -ésimo estado excitado tiene n nodos. Como es lógico, entre dos nodos consecutivos la autofunción debe alcanzar un máximo o un mínimo relativo.
- Debido a la estructura de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (9.3), la segunda derivada de una autofunción es igual a cero en un nodo, esto es, tiene un punto de inflexión.

También son puntos de inflexión aquellos en los que $V(x) = E$, es decir, los que separan una región clásicamente accesible [$E > V(x)$] de otra clásicamente prohibida [$E < V(x)$].

- Como ya vio en uno de los problemas propuestos en el **capítulo 6**, la ecuación de Schrödinger permite que la autofunción sea no nula en regiones clásicamente prohibidas, por lo que **es posible encontrar a la partícula en un punto en el que $E < V(x)$** . Ahora bien, la energía total de la partícula y la posición no son medibles a la vez con precisión arbitraria y, en rigor, tal fenómeno no contradice ninguna ley física fundamental. En efecto, debido a la incompatibilidad entre x y E no será posible realizar una medida en la que *simultáneamente* se obtenga una valor de la energía igual a E y una posición dentro de una región clásicamente prohibida.

En una región clásicamente prohibida, los signos de la autofunción y de su segunda derivada son iguales, y la autofunción es siempre convexa hacia el eje X . Pero si nos ceñimos a estados estacionarios ligados, cuyas autofunciones son reales, y escribimos la ecuación de Schrödinger en la forma

$$\frac{\Phi''_E}{\Phi_E} = (2M/\hbar^2) [V(x) - E], \quad (9.12)$$

es evidente que en una región clásicamente accesible, $E > V(x)$, los signos de la autofunción y de su segunda derivada han de ser opuestos, por lo que la autofunción es siempre cóncava hacia el eje X . Tomando cuadrados, podemos afirmar que **la densidad de probabilidad de un estado estacionario ligado no puede alcanzar un máximo relativo en una región clásicamente prohibida**.

- Finalmente, si $V(x)$ es par [$V(x) = V(-x)$] y $\Phi(x)$ es autofunción con autoenergía E entonces también lo es $\Phi(x) = \mathcal{A}\Phi(-x)$, donde \mathcal{A} es una constante multiplicativa arbitraria (para verlo basta hacer el cambio de variable $x \rightarrow -x$ en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo). Como las energías del espectro puntual son no degeneradas, esto implica que *las autofunciones de los estados estacionarios ligados en un potencial par son o bien pares o bien impares*. Además, si aplicamos el teorema de Sturm tenemos que la autofunción del estado fundamental es par, la del primer estado excitado es impar, la del segundo estado excitado es par y así sucesivamente.

Por otro lado, para un potencial par los niveles energéticos del espectro continuo (si ese espectro existe en el sistema estudiado) deben ser doblemente degenerados. En este caso podremos encontrar una base ortogonal de cada nivel energético del espectro continuo formada por dos funciones reales, una par y otra impar.¹

§ 5. Rara vez será posible obtener una expresión analítica de las autofunciones. Una excepción notable es aquella en la que la energía potencial $V(x)$ es constante a trozos. En cada región en la que $V(x) = \text{constante}$ podemos hallar la solución general de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo usando la expresión (9.6). Los diferentes coeficientes multiplicativos que aparecen en cada zona se podrán relacionar entre sí imponiendo la continuidad de la función de onda y la de su derivada en cada punto en el que $V(x)$ tiene una discontinuidad. El siguiente ejemplo ilustra el método.

EJEMPLO 9.a. (!) Energía potencial constante a trozos

Sobre una partícula de masa M que se mueve en una dimensión espacial actúa una fuerza que deriva de la energía potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ -V_0 & \text{si } x \in (0, a) \\ +W_0 & \text{si } x > a \end{cases} \quad \text{con } V_0, W_0 > 0$$

Esta energía potencial es una aproximación ideal para un sistema en el que actúa una fuerza que únicamente es no nula cuando la partícula está en zonas de anchura δl muy pequeñas centradas en $x = 0$ y $x = a$, donde δl es mucho menor que la longitud de onda característica de la partícula. La fuerza que actúa en $x = 0$ está orientada en el sentido OX^+ y la que actúa en $x = a$ tiene sentido contrario.

- Indique cómo es el espectro de energías.
- Halle la forma general de las autofunciones $\Phi_E(x)$ si $E > W_0$.

¹ Tenga en cuenta que toda función par es automáticamente ortogonal a cualquier función impar.

- c) Obtenga las autofunciones de la energía en el rango $E \in [0, W_0]$
- d) Halle la estructura de las autofunciones de los estados estacionarios ligados y obtenga la ecuación que han de verificar las autoenergías correspondientes. Suponiendo que el sistema tiene dos niveles energéticos ligados dibuje aproximadamente sus autofunciones.

Solución:

a) Aplicando directamente los resultados de la tabla de la pág. 299, el espectro continuo doblemente degenerado es igual a $(W_0, +\infty)$, el espectro continuo no degenerado ocupa el rango $[0, W_0]$ y las autoenergías E_1, E_2, \dots del espectro puntual están dentro del intervalo $(-V_0, 0)$.

b) Dividamos la recta real en tres regiones (vea la FIG. 9-2), en cada una de las cuales la energía potencial es constante. Para una energía $E > W_0$, las tres regiones son clásicamente accesibles y, entonces,

$$\Phi_E(x) = \begin{cases} \mathcal{A}e^{ikx} + \mathcal{B}e^{-ikx} & \text{si } x \leq 0 \\ \mathcal{F}e^{ikx} + \mathcal{G}e^{-ikx} & \text{si } x \in [0, a] \\ \mathcal{C}e^{+iqx} + \mathcal{D}e^{-iqx} & \text{si } x \geq a \end{cases} \quad \begin{array}{ll} \text{con } k = \sqrt{2ME}/\hbar & \\ \text{con } K = \sqrt{2M(E + V_0)}/\hbar & \\ \text{con } q = \sqrt{2M(E - W_0)}/\hbar & \end{array}$$

Tenemos entonces seis coeficientes, que estarán relacionados entre sí mediante cuatro ecuaciones correspondientes a la continuidad de la función de onda y a la de su derivada en los puntos $x = 0$ y $x = a$. Concretamente:

Continuidad de $\Phi_E(x)$ en $x = 0$:

$$\Phi_E(0^-) = \Phi_E(0^+) \Rightarrow \mathcal{A} + \mathcal{B} = \mathcal{F} + \mathcal{G}.$$

Continuidad de $\Phi'_E(x)$ en $x = 0$:

$$\Phi'_E(0^-) = \Phi'_E(0^+) \Rightarrow ik\mathcal{A} - ik\mathcal{B} = iK\mathcal{F} - iK\mathcal{G}.$$

Continuidad de $\Phi_E(x)$ en $x = a$:

$$\Phi_E(a^-) = \Phi_E(a^+) \Rightarrow e^{+ik a} \mathcal{F} + e^{-ik a} \mathcal{G} = e^{+iq a} \mathcal{C} + e^{-iq a} \mathcal{D}.$$

Continuidad de $\Phi'_E(x)$ en $x = a$:

$$\Phi'_E(a^-) = \Phi'_E(a^+) \Rightarrow iKe^{+ik a} \mathcal{F} - iKe^{-ik a} \mathcal{G} = iq e^{+iq a} \mathcal{C} - iq e^{-iq a} \mathcal{D}.$$

De esta manera tenemos un sistema homogéneo de cuatro ecuaciones lineales con seis incógnitas, que puede resolverse si imponemos los valores de dos de los coeficientes que actúan como constantes multiplicativas arbitrarias. Que el número de constantes libres sea igual a dos refleja claramente que el espectro es doblemente degenerado en este rango de energías.

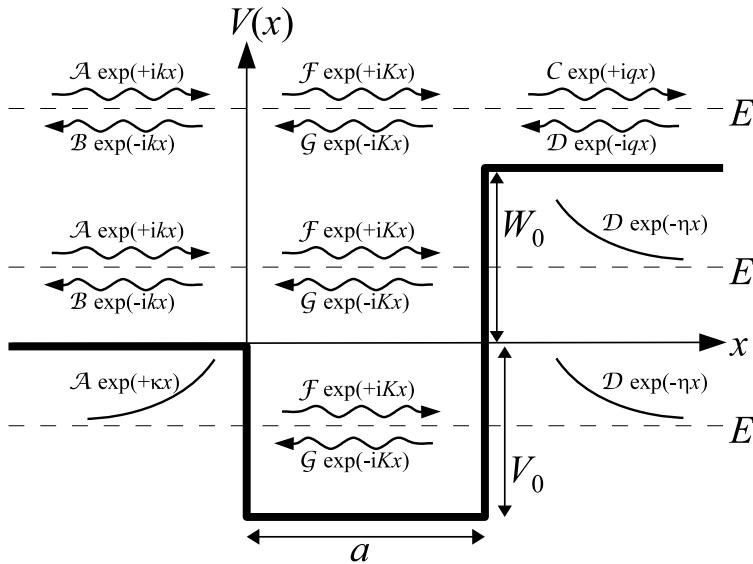


Figura 9-2. Representación esquemática de las autofunciones de la energía para el sistema del **ejemplo 9.a.** Observe cuán diferente es su comportamiento dependiendo de la región del espectro que estemos considerando

c) Para energías en el intervalo $[0, W_0]$ la región $x > a$ es clásicamente prohibida, por lo que

$$\Phi_E(x) = \begin{cases} \mathcal{A}e^{ikx} + \mathcal{B}e^{-ikx} & \text{si } x \leq 0 \\ \mathcal{F}e^{iKx} + \mathcal{G}e^{-iKx} & \text{si } x \in [0, a] \\ \mathcal{C}e^{+\eta x} + \mathcal{D}e^{-\eta x} & \text{si } x \geq a \end{cases} \quad \begin{array}{ll} \text{con } k = \sqrt{2ME}/\hbar & \\ \text{con } K = \sqrt{2M(E + V_0)}/\hbar & \\ \text{con } \eta = \sqrt{2M(W_0 - E)}/\hbar & \end{array}$$

Sin embargo $\Phi_E(x)$ ha de estar acotada cuando $x \gg 0$, por lo que necesariamente $\mathcal{C} = 0$. Si ahora imponemos las condiciones de continuidad de la autofunción y de su derivada en $x = 0$ y $x = a$ tenemos que los cinco coeficientes restantes están relacionados entre sí mediante las ecuaciones

$$\begin{aligned} \Phi_E(0^-) &= \Phi_E(0^+): & \mathcal{A} + \mathcal{B} &= \mathcal{F} + \mathcal{G} \\ \Phi'_E(0^-) &= \Phi'_E(0^+): & ik\mathcal{A} - ik\mathcal{B} &= iK\mathcal{F} - iK\mathcal{G} \\ \Phi_E(a^-) &= \Phi_E(a^+): & e^{+iKa}\mathcal{F} + e^{-iKa}\mathcal{G} &= e^{-\eta a}\mathcal{D} \\ \Phi'_E(a^-) &= \Phi'_E(a^+): & iKe^{+iKa}\mathcal{F} - iKe^{-iKa}\mathcal{G} &= -\eta e^{-\eta a}\mathcal{D}. \end{aligned}$$

Este es un sistema homogéneo de cuatro ecuaciones con cinco incógnitas, resoluble si imponemos el valor de una de ellas, por ejemplo \mathcal{D} , que actúa como única constante multiplicativa arbitraria. Para cada autoenergía en este intervalo existirá una única autofunción salvo constante multiplicativa. Además, si escogemos un valor real para \mathcal{D} , puede ver que necesariamente $\mathcal{F} = \mathcal{G}^*$ y que $\mathcal{A} = \mathcal{B}^*$, por lo que la autofunción será real.

d) Finalmente, si $E \in (-V_0, 0)$ las regiones $x \leq 0$ y $x \geq a$ son clásicamente prohibidas. Imponiendo que la autofunción no crezca indefinidamente cuando $|x| \gg 0$ tenemos que

$$\Phi_E(x) = \begin{cases} \mathcal{A}e^{+\kappa x} + 0 e^{-\kappa x} & \text{si } x \leq 0 \\ \mathcal{F}e^{+iKx} + \mathcal{G}e^{-iKx} & \text{si } x \in [0, a] \\ 0 e^{+\eta x} + \mathcal{D}e^{-\eta x} & \text{si } x \geq a \end{cases} \quad \begin{array}{ll} \text{con } \kappa = \sqrt{-2ME}/\hbar & \\ \text{con } K = \sqrt{2M(E + V_0)}/\hbar & \\ \text{con } \eta = \sqrt{2M(W_0 - E)}/\hbar & \end{array}$$

y las condiciones de continuidad en $x = 0$ y $x = a$ conducen a que

$$\begin{aligned} \Phi_E(0^-) = \Phi_E(0^+) : & \quad \mathcal{A} = \mathcal{F} + \mathcal{G} \\ \Phi'_E(0^-) = \Phi'_E(0^+) : & \quad \kappa\mathcal{A} = iK\mathcal{F} - iK\mathcal{G} \\ \Phi_E(a^-) = \Phi_E(a^+) : & \quad e^{+iKa}\mathcal{F} + e^{-iKa}\mathcal{G} = e^{-\eta a}\mathcal{D} \\ \Phi'_E(a^-) = \Phi'_E(a^+) : & \quad iKe^{+iKa}\mathcal{F} - iKe^{-iKa}\mathcal{G} = -\eta e^{-\eta a}\mathcal{D}. \end{aligned}$$

Este sistema homogéneo de cuatro ecuaciones con cuatro incógnitas puede escribirse matricialmente como

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ \kappa & -iK & iK & 0 \\ 0 & e^{+iKa} & e^{-iKa} & -e^{-\eta a} \\ 0 & iKe^{+iKa} & -iKe^{-iKa} & \eta e^{-\eta a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{A} \\ \mathcal{F} \\ \mathcal{G} \\ \mathcal{D} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Como sabemos de la teoría general de sistemas de ecuaciones lineales, el sistema anterior tiene como solución única $\mathcal{B} = \mathcal{F} = \mathcal{G} = \mathcal{D} = 0$ (función de onda idénticamente nula) excepto si el determinante de la matriz 4×4 es igual a cero. En este caso las soluciones estarán definidas salvo constante multiplicativa global. En suma, la condición de cuantización de las energías del espectro puntual es

$$\left| \begin{array}{cccc} 1 & -1 & -1 & 0 \\ \kappa & -iK & iK & 0 \\ 0 & e^{+iKa} & e^{-iKa} & -e^{-\eta a} \\ 0 & iKe^{+iKa} & -iKe^{-iKa} & \eta e^{-\eta a} \end{array} \right| = 0 \quad \text{con} \quad \begin{cases} \kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{-2ME} \\ K = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2M(E + V_0)} \\ \eta = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2M(W_0 - E)}. \end{cases}$$

Teniendo en cuenta que la autofunción del nivel fundamental no tiene ceros aislados, que la del primer nivel excitado tiene un único cero y las propiedades enumeradas en el epígrafe §4 de esta sección, la forma aproximada de estas autofunciones es la representada en la **FIG. 9-3**.

Si se desarrolla la ecuación que han de verificar las autoenergías, se ve que toma la forma de una ecuación trascendente cuya resolución es necesariamente numérica. Incluso en este caso podremos extraer bastante información, tal y como vamos a ver en las dos siguientes secciones.

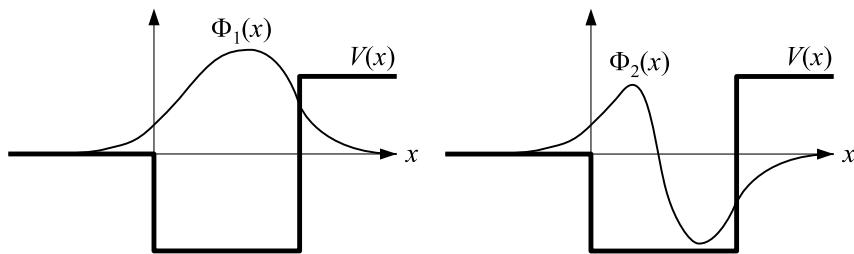


Figura 9-3. Representación aproximada de las dos primeras autofunciones de la energía (en unidades arbitrarias) para el sistema del [ejemplo 9.a](#). La función de onda del estado fundamental no tiene ceros, mientras que la del primer estado excitado tiene un cero en la región clásicamente accesible

9.2. EL POZO CUADRADO FINITO

§ 1. Consideremos una partícula de masa M cuya energía potencial es

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } |x| > a/2 \\ 0 & \text{si } |x| < a/2 \end{cases} \quad \text{con } V_0 > 0 \quad (9.13)$$

donde, por conveniencia, hemos situado el origen de energías en $x = 0$. Esta energía potencial está representada en la **FIG. 9-4** y, por motivos bastante claros, diremos que $V(x)$ es un *pozo cuadrado finito de [energía] potencial* de “profundidad” V_0 y “anchura” a .²

Nuestro objetivo en esta sección será obtener las autoenergías y autofunciones del espectro puntual, que está comprendido en el intervalo $(0, V_0)$. Las energías con $E > V_0$ constituirán el espectro continuo doblemente degenerado cuyas autofunciones se solicitarán como problema propuesto en el siguiente capítulo.

Una autofunción con energía $0 < E < V_0$ debe decaer exponencialmente cuando $|x| \gg 0$, por lo que su forma general ha de ser

$$\Phi_E(x) = \begin{cases} Ae^{+\eta x} & \text{si } x \leq -a/2 \\ \mathcal{F}e^{+ikx} + \mathcal{G}e^{-ikx} & \text{si } x \in [-a/2, a/2] \\ \mathcal{D}e^{-\eta x} & \text{si } x \geq a/2 \end{cases} \quad \text{con} \quad \begin{cases} \eta = \frac{\sqrt{2M(V_0 - E)}}{\hbar} \\ k = \frac{\sqrt{2ME}}{\hbar} \end{cases}$$

² Muchas veces, por abuso del lenguaje, se usa el término *potencial* como sinónimo de *energía potencial*. Como sabe, el potencial es la energía potencial dividida por una constante característica de la partícula (la carga, por ejemplo).

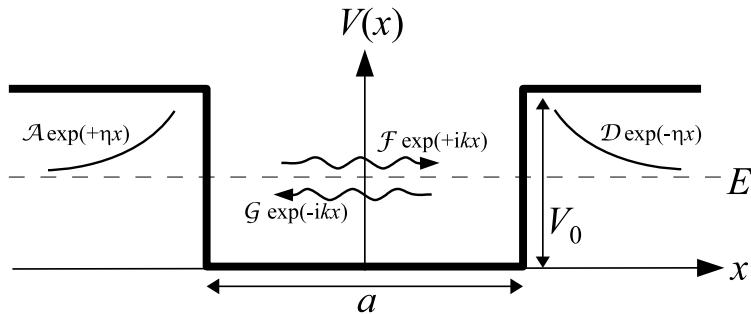


Figura 9-4. Pozo de potencial de anchura a y profundidad V_0 . Se incluye el esquema de las autofunciones con energías del espectro puntual

y la ecuación que deben verificar las autoenergías se obtendría siguiendo el procedimiento visto en el **ejemplo 9.a**.

En particular, las condiciones de continuidad de $\Phi_E(x)$ y su derivada en los puntos $x = \pm a/2$ llevan a que

$$\begin{aligned} \text{continuidad de } \Phi_E \text{ en } -a/2 : \quad & \mathcal{A}e^{-\eta a/2} = e^{-ika/2}\mathcal{F} + e^{+ika/2}\mathcal{G} \\ \text{continuidad de } \Phi'_E \text{ en } -a/2 : \quad & \eta e^{-\eta a/2}\mathcal{A} = ike^{-ika/2}\mathcal{F} - ike^{+ika/2}\mathcal{G} \\ \text{continuidad de } \Phi_E \text{ en } +a/2 : \quad & e^{-\eta a/2}\mathcal{D} = e^{+ika/2}\mathcal{F} + e^{-ika/2}\mathcal{G} \\ \text{continuidad de } \Phi'_E \text{ en } +a/2 : \quad & -\eta e^{-\eta a/2}\mathcal{D} = ike^{+ika/2}\mathcal{F} - ike^{-ika/2}\mathcal{G} \end{aligned}$$

Para que este sistema homogéneo de cuatro ecuaciones con cuatro incógnitas tenga soluciones no nulas el determinante de la matriz de los coeficientes ha de ser cero:

$$\left| \begin{array}{cccc} e^{-\eta a/2} & -e^{-ika/2} & -e^{+ika/2} & 0 \\ \eta e^{-\eta a/2} & -ike^{-ika/2} & ike^{+ika/2} & 0 \\ 0 & e^{+ika/2} & e^{-ika/2} & -e^{-\eta a/2} \\ 0 & ike^{+ika/2} & -ike^{-ika/2} & \eta e^{-\eta a/2} \end{array} \right| = 0.$$

Desarrollando el determinante, y simplificando, la ecuación que han de verificar las autofunciones de la energía en el rango $(0, V_0)$ es

$$\tan(ka) = \frac{2k\eta}{k^2 - \eta^2}, \quad \text{con} \quad \begin{cases} \eta = \frac{\sqrt{2M(V_0 - E)}}{\hbar} \\ k = \frac{\sqrt{2ME}}{\hbar} \end{cases} \quad (9.14)$$

Una vez resuelta numéricamente esta ecuación, para cada autoenergía E evaluaríamos k y η . Entonces, haciendo por ejemplo $\mathcal{A} = 1$, obtendríamos \mathcal{F} y \mathcal{G} a partir de las condiciones de continuidad de $\Phi_E(x)$ y $\Phi'_E(x)$ en $x = -a/2$ y, acto seguido, el coeficiente \mathcal{D} a partir de la continuidad de $\Phi_E(x)$ en $x = +a/2$. La función de onda así obtenida no estará normalizada, por lo que la multiplicaríamos por una constante adecuada.

§ 2. La ventaja del procedimiento anterior es que es completamente mecánico y, en consecuencia, se puede implementar fácilmente en cualquier programa de cálculo simbólico. Sin embargo las operaciones intermedias (que no hemos incluido) son tediosas y, sobre todo, el método no es nada ilustrativo. Ahora bien, si somos astutos podemos abordar el problema de manera mucho más sencilla y, sobre todo, físicamente más transparente.

Para ello tengamos en cuenta que, de acuerdo con lo que hemos visto en la sección anterior:

- i) la autofunción $\Phi_E(x)$ es real;
- ii) la autofunción es par o impar puesto que el potencial $V(x)$ es par;
- iii) la autofunción está definida salvo constante multiplicativa.

Dado que cualquier combinación lineal de las funciones $\exp(+ikx)$ y $\exp(-ikx)$ se puede reescribir como combinación lineal de las funciones $\cos(kx)$ y $\sin(kx)$, si designamos a las autoenergías y a sus autofunciones como E_n y $\Phi_n(x)$ con $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ entonces

$$\Phi_n(x) = \mathcal{C} \times \begin{cases} \mathcal{A}e^{+nx} & \text{si } x \leq -a/2 \\ \cos(kx) & \text{si } x \in [-a/2, a/2] \quad \text{si } n \text{ es par} \\ \mathcal{A}e^{-nx} & \text{si } x \geq a/2 \end{cases} \quad (9.15)$$

$$\Phi_n(x) = \mathcal{C} \times \begin{cases} -\mathcal{A}e^{+nx} & \text{si } x \leq -a/2 \\ \sin(kx) & \text{si } x \in [-a/2, a/2] \quad \text{si } n \text{ es impar} \\ \mathcal{A}e^{-nx} & \text{si } x \geq a/2 \end{cases}$$

Gracias a esto, únicamente hace falta imponer la continuidad de la autofunción y la de su derivada en $x = +a/2$ ya que, automáticamente, se cumplirán dichas

condiciones en $x = -a/2$. En consecuencia,

$$\left. \begin{array}{l} \cos(ka/2) = \mathcal{A}e^{-\eta a/2} \\ -k \sin(ka/2) = -\eta \mathcal{A}e^{-\eta a/2} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{si } n \text{ es par} \\ \\ \end{array}$$

$$\left. \begin{array}{l} \sin(ka/2) = \mathcal{A}e^{-\eta a/2} \\ k \cos(ka/2) = -\eta \mathcal{A}e^{-\eta a/2} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{si } n \text{ es impar.} \\ \\ \end{array}$$

Dividiendo miembro a miembro cada pareja de ecuaciones, la ecuación que ha de satisfacer la autoenergía E_n de este sistema es:

$$\left. \begin{array}{l} k \tan\left(\frac{ka}{2}\right) = \eta & \text{si } n \text{ es par} \\ k \cot\left(\frac{ka}{2}\right) = -\eta & \text{si } n \text{ es impar} \end{array} \right. \quad \text{con} \quad \left. \begin{array}{l} \eta = \frac{\sqrt{2M(V_0 - E_n)}}{\hbar} \\ k = \frac{\sqrt{2ME_n}}{\hbar} \end{array} \right. \quad (9.16)$$

resultado que, naturalmente, es equivalente a (9.14).³ Las autoenergías E_0, E_2, \dots y E_1, E_3, \dots son las soluciones respectivas de estas ecuaciones trascendentales en el intervalo $(0, V_0)$.

Para facilitar el trabajo numérico conviene definir la constante adimensional $\beta = Ma^2V_0/(2\hbar^2)$, que depende exclusivamente de los datos del problema. Así, tras sustituir η y k por sus valores, las ecuaciones (9.16) se escriben de manera compacta como

$$\left. \begin{array}{l} \sqrt{\varepsilon_n} \tan \sqrt{\beta \varepsilon_n} = \sqrt{1 - \varepsilon_n} & \text{si } n \text{ es par} \\ \sqrt{\varepsilon_n} \cot \sqrt{\beta \varepsilon_n} = -\sqrt{1 - \varepsilon_n} & \text{si } n \text{ es impar} \end{array} \right\} \quad \text{con} \quad \left. \begin{array}{l} \varepsilon_n = \frac{E_n}{V_0} \\ \beta = \frac{Ma^2V_0}{2\hbar^2} \end{array} \right. \quad (9.17)$$

Una vez halladas las energías permitidas, las constantes k, η, \mathcal{A} serán

$$k = \frac{2}{a} \sqrt{\beta \varepsilon_n} ; \quad \eta = \frac{2}{a} \sqrt{\beta(1 - \varepsilon_n)} ; \quad \mathcal{A} = \begin{cases} e^{+\eta a/2} \cos \frac{ka}{2} & (n \text{ par}) \\ e^{+\eta a/2} \sin \frac{ka}{2} & (n \text{ impar}) \end{cases} \quad (9.18)$$

³ Usando la fórmula de la tangente del ángulo doble y tras unas operaciones intermedias, puede verse que toda solución de (9.14) satisface una de las dos ecuaciones de (9.16)

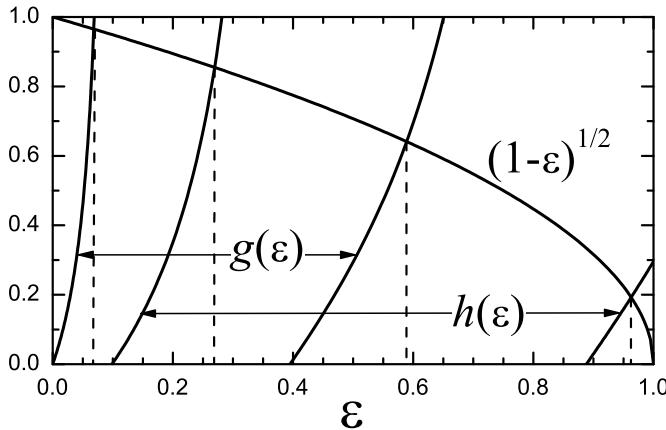


Figura 9-5. Resolución gráfica de la ecuación para las autoenergías de un pozo cuadrado finito ($\beta = 25$)

y por sustitución en (9.15) tendremos la función de onda. La constante multiplicativa C se calcularía normalizando la autofunción.

§ 3. Analicemos ahora con más detalle las ecuaciones (9.17). La primera, para n par y que incluye la energía del estado fundamental, *siempre tiene al menos una solución*. En efecto, para resolverla numéricamente podemos representar las funciones $(1 - \varepsilon)^{1/2}$ y $g(\varepsilon) \equiv \sqrt{\varepsilon} \tan \sqrt{\beta\varepsilon}$ en el intervalo $\varepsilon \in (0, 1)$ ya que las abscisas de los puntos de corte nos darán la solución de tal ecuación (véase la FIG. 9-5). Como la función $(1 - \varepsilon)^{1/2}$ recorre en dicho intervalo todos los valores desde 1 hasta cero y $g(\varepsilon)$ empieza a tomar valores crecientes a partir de cero, las gráficas se cortarán al menos una vez. En suma *el potencial de pozo cuadrado admite al menos un estado estacionario ligado*.

Sin embargo no hay garantía de que haya al menos una autoenergía con número cuántico n impar ya que la función $h(\varepsilon) \equiv -\sqrt{\varepsilon} \cot \sqrt{\beta\varepsilon}$ empieza su recorrido en $-\infty$ y puede que no se corte con la función $(1 - \varepsilon)^{1/2}$ para un valor $\varepsilon \in (0, 1)$.

Por otra parte, el número de soluciones con n par de la ecuación (9.17) van a ser igual al número de ceros de la función $\tan \sqrt{\beta\varepsilon}$ en el intervalo $[0, 1]$. Análogamente, el número de soluciones con n impar coincidirá con el número de ceros de la función $\cot \sqrt{\beta\varepsilon}$ dentro del mismo intervalo. Como la función tangente se anula para múltiplos enteros de π mientras que la cotangente se hace cero si la variable toma los valores $\pi/2, 3\pi/2, 5\pi/2$, etc. el número total de estados estacionarios

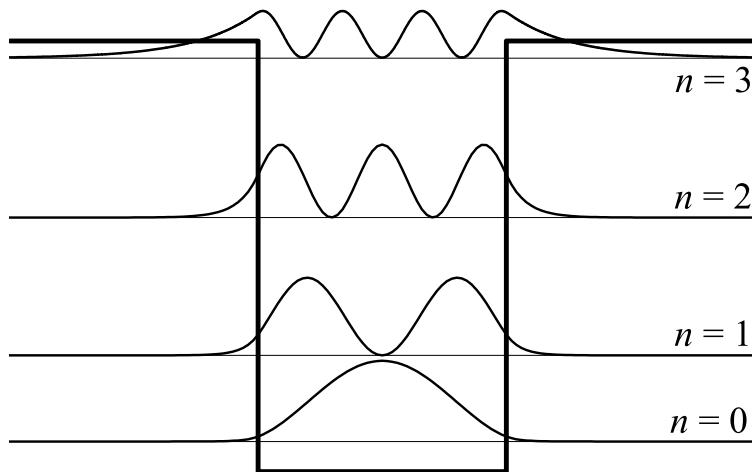


Figura 9-6. Representación esquemática de las autoenergías y densidades de probabilidad de los cuatro estados estacionarios ligados en un pozo cuadrado finito con $\beta = 25$. Las densidades de probabilidad se han desplazado verticalmente para facilitar su comparación

ligados en un pozo cuadrado de anchura a y profundidad V_0 será

$$N = \text{Int} \left(\frac{2\sqrt{\beta}}{\pi} + 1 \right) = \text{Int} \left(\sqrt{\frac{2Ma^2V_0}{\pi^2\hbar^2}} + 1 \right) \quad (9.19)$$

donde $\text{Int}(u)$ es la función “parte entera” que es igual a cero si $u \in (0, 1]$, a 1 si $u \in (1, 2]$, a 2 si $u \in (2, 3]$, etc.

Como ilustración consideremos el caso $\beta = 25$. Para hacernos una idea de los órdenes de magnitud, si la partícula es un electrón ($m_e c^2 \simeq 511$ KeV) y $a = 1$ nm, entonces $V_0 \simeq 3,8$ eV. En este caso el número de estados ligados será

$$N = \text{Int} \left(\frac{2\sqrt{25}}{\pi} + 1 \right) = \text{Int}(4,18\dots) = 4$$

y la resolución gráfica de (9.17) proporcionará cuatro soluciones (Fig. 9-5):

$$\varepsilon_0 \simeq 0,07 ; \varepsilon_1 \simeq 0,27 ; \varepsilon_2 \simeq 0,59 ; \varepsilon_3 \simeq 0,96.$$

En la FIG. 9-6 representamos las densidades de probabilidad $\rho_n(x) = |\Phi_n(x)|^2$. Fíjese que a medida que la energía está más cercana al valor crítico V_0 la probabilidad de encontrar a la partícula en la región clásicamente prohibida aumenta. A su vez, todas las densidades de probabilidad son pares y el número de nodos es igual al número cuántico n .

EJEMPLO 9.b. Representación en momentos en un pozo finito

Un electrón está sometido a la acción de un potencial de pozo finito de anchura a y profundidad $V_0 = 4$ eV. Se sabe que únicamente hay un estado estacionario ligado cuya energía es $E_0 = 2$ eV.

- Halle la anchura a del pozo.
- Obtenga la autofunción normalizada $\Phi_0(x)$ del estado fundamental.
- Como consecuencia, calcule la probabilidad de que al medir la posición del electrón lo encontremos en la región clásicamente prohibida.
- Evalúe la representación en momentos $\tilde{\Phi}_0(p)$.

Solución:

- a) Centrando el pozo en el origen, la autofunción será

$$\Phi_0(x) = \Phi_n(x) = \mathcal{C} \times \begin{cases} Ae^{+kx} & \text{si } x \leq -a/2 \\ \cos(kx) & \text{si } x \in [-a/2, a/2] \\ Ae^{-kx} & \text{si } x \geq a/2 \end{cases} \quad \text{con } k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{m_e V_0}$$

donde hemos usado que $E_0 = V_0/2$. Por continuidad de $\Phi_0(x)$ y de su derivada en $x = a/2$,

$$\cos(ka/2) = A \exp(-ka/2) ; -k \sin(ka/2) = -kA \exp(-ka/2).$$

Dividiendo miembro a miembro

$$\tan\left(\frac{ka}{2}\right) = 1 \Rightarrow \frac{ka}{2} = \frac{\pi}{4} \Rightarrow k = \frac{\pi}{2a}$$

(puesto que es el estado fundamental, el argumento de la tangente es el valor positivo más pequeño posible). Ya sólo falta despejar y operar:

$$E_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \Rightarrow \frac{V_0}{2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m_e a^2} \Rightarrow a = \frac{\pi \hbar}{2\sqrt{meV_0}} \simeq 0,46 \text{ \AA}$$

- b) Como $k = \pi/(2a)$, inmediatamente

$$A = \exp(ka/2) \cos(ka/2) = \frac{e^{\pi/4}}{\sqrt{2}}$$

Para hallar la constante \mathcal{C} impongamos que $\Phi_0(x)$ está normalizada:

$$1 = \|\Phi_0\|^2 \Rightarrow 1 = |\mathcal{C}|^2 \int_{\mathbb{R}} |\Phi_0(x)|^2 dx$$

y puesto que $|\Phi_0(x)|^2$ es par

$$1 = 2|\mathcal{C}|^2 \int_0^\infty |\Phi_0(x)|^2 dx = 2|\mathcal{C}|^2 \left\{ \int_0^{a/2} \cos^2(kx) dx + \frac{e^{\pi/2}}{2} \int_{a/2}^\infty e^{-2kx} dx \right\} = \\ = 2|\mathcal{C}|^2 \left\{ \int_0^{a/2} \cos^2\left(\frac{\pi x}{2a}\right) dx + \frac{e^{\pi/2}}{2} \int_{a/2}^\infty \exp(-\pi x/a) dx \right\} = a|\mathcal{C}|^2 \frac{\pi + 4}{2\pi}.$$

En definitiva,

$$\Phi_0(x) = \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{a}(\pi+4)^{1/2}} \times \begin{cases} \frac{e^{\pi/4}}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{\pi|x|}{2a}\right) & \text{si } |x| \geq a/2 \\ \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) & \text{si } |x| \leq a/2. \end{cases}$$

c) Para calcular la probabilidad pedida tenemos que integrar $|\Phi_0(x)|^2$ sobre la región clásicamente prohibida, $|x| \geq a/2$. Como $|\Phi_0(x)|^2$ es par,

$$\Pr(|x| \geq a/2) = 2 \int_{a/2}^\infty |\Phi_0(x)|^2 dx = \frac{2\pi e^{\pi/2}}{(\pi+4)a} \int_{a/2}^\infty e^{-\pi x/a} dx = \frac{2}{\pi+4}$$

esto es, de un 28% aproximadamente.

d) La representación en momentos es

$$\tilde{\Phi}_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} e^{-ipx/\hbar} \Phi_0(x) dx.$$

Conviene transformar un poco la expresión aprovechando que $\Phi_0(x)$ es par:

$$\tilde{\Phi}_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left\{ \int_{-\infty}^0 e^{-ipx/\hbar} \Phi_0(-x) dx + \int_0^\infty e^{-ipx/\hbar} \Phi_0(x) dx \right\}$$

y haciendo el cambio $x \rightarrow -x$ en la primera integral queda, que

$$\tilde{\Phi}_0(p) = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \int_0^\infty \cos\left(\frac{px}{\hbar}\right) \Phi_0(x) dx.$$

Para simplificar el cálculo hagamos el cambio $u = x/a$ y definamos la cantidad $\kappa = ap/\hbar$, ya que entonces

$$\tilde{\Phi}_0(p) = \sqrt{\frac{2a^2}{\pi\hbar}} \mathcal{C} \times \left[\int_0^{1/2} \cos(\kappa u) \cos(\pi u/2) du + \frac{e^{\pi/4}}{\sqrt{2}} \int_{1/2}^\infty \cos(\kappa u) e^{-\pi u/2} du \right]$$

y operando

$$\tilde{\Phi}_0(p) = \frac{4\sqrt{2a}\pi^2}{\sqrt{(\pi+4)\hbar}} \frac{2\kappa \sin(\kappa/2) - \pi \cos(\kappa/2)}{16\kappa^4 - \pi^4}, \quad \text{con } \kappa = \frac{ap}{\hbar}$$

que es una función muy concentrada en el intervalo $\kappa \in (-5, 5)$.

9.3. OTROS POZOS CUADRADOS

§ 1. Si tomamos el límite $V_0 \gg 0$ de un pozo cuadrado finito, lo que equivale a hacer $\eta = \infty$ en (9.14), debemos recuperar los resultados del *pozo cuadrado infinito* que ya estudiamos en el **capítulo 6**. La única diferencia, físicamente irrelevante, es que aquí el pozo está centrado en el origen y que hemos adoptado el convenio de “contar” el número cuántico n desde $n = 0$. Hecha esta salvedad, las autofunciones del pozo cuadrado infinito serán

$$\Phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \times \begin{cases} \cos\left(\frac{(n+1)\pi x}{a}\right) & \text{si } n \text{ es par} \\ \sin\left(\frac{(n+1)\pi x}{a}\right) & \text{si } n \text{ es impar} \end{cases} \quad x \in [-a/2, +a/2] \quad (9.20)$$

siendo nulas fuera del pozo, y sus autoenergías correspondientes son

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2Ma^2} (n+1)^2 \quad \text{con } n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (9.21)$$

Observe que si bien $\Phi_n(x)$ sigue siendo continua en $x = \pm a/2$ su primera derivada ya no lo es. Esto es consecuencia de la discontinuidad infinita de la energía potencial en estos puntos, tal y como ya mencionamos en **§8.1.2**.

§ 2. Otro límite interesante del pozo cuadrado finito es cuando la profundidad V_0 se hace infinita y, a la vez, la anchura a tiende a cero aunque suponiendo que el producto $aV_0 \equiv \gamma$ permanece constante. En este caso conviene tomar el origen de energías en $x = \pm\infty$ de manera que el espectro puntual está contenido en el rango $E < 0$ mientras que el continuo (dblemente degenerado) está formado por todas las autoenergías $E > 0$. Si recordamos la definición de delta de Dirac, la energía potencial de la partícula es:

$$V(x) = -a V_0 \delta(x) = -\gamma \delta(x). \quad (9.22)$$

Hay dos formas de abordar este problema. La primera, que será la que aquí seguiremos, consiste en analizar explícitamente el límite $V_0 \rightarrow \infty$, $a = \gamma/V_0$ del pozo cuadrado finito. La otra, más directa, precisa conocer cómo derivar una función en sentido de distribuciones (véase el **Apéndice B**, sección **B.5**).

Si E es la autoenergía de un estado estacionario ligado, la forma general de la autofunción será la que vimos en las ecuaciones (9.14) de la sección anterior.

Debido a que nuestro origen de energías es distinto, los números de onda k y η estarán dados por

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2M(E + V_0)} ; \quad \eta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2ME} \quad (9.23)$$

ya que el fondo del pozo está a una energía $-V_0$ mientras que fuera del mismo la energía potencial es cero. Por otra parte, como el pozo es muy estrecho podremos aproximar la función $\cos(kx)$ por $1 - k^2x^2/2$ y la función $\sin(kx)$ por kx . De esta manera las expresiones (9.14) se transforman en

$$\Phi_n(x) = \mathcal{C} \times \begin{cases} Ae^{+\eta x} & \text{si } x \leq -a/2 \\ 1 - \frac{k^2}{2}x^2 & \text{si } x \in [-a/2, a/2] \quad \text{si } n \text{ es par} \\ Ae^{-\eta x} & \text{si } x \geq a/2 \end{cases} \quad (9.24)$$

$$\Phi_n(x) = \mathcal{C} \times \begin{cases} -\mathcal{A}e^{+\eta x} & \text{si } x \leq -a/2 \\ kx & \text{si } x \in [-a/2, a/2] \quad \text{si } n \text{ es impar} \\ \mathcal{A}e^{-\eta x} & \text{si } x \geq a/2 \end{cases}$$

Si ahora imponemos la continuidad de $\Phi_n(x)$ y su derivada en $x = a/2$ tenemos que

$$1 - \frac{k^2 a^2}{8} = \mathcal{A}e^{-\eta a/2} \quad -\frac{k^2 a}{2} = -\mathcal{A}\eta e^{-\eta a/2} \quad \text{si } n \text{ es par}$$

$$\frac{ka}{2} = \mathcal{A}e^{-\eta a/2} \quad k = -\mathcal{A}\eta e^{-\eta a/2} \quad \text{si } n \text{ es impar.}$$

Dividiendo miembro a miembro

$$\frac{4k^2 a}{8 - k^2 a^2} = +\eta \quad \text{si } n \text{ es par} \quad (9.25)$$

$$\frac{2}{a} = -\eta \quad \text{si } n \text{ es impar.}$$

Vemos que en el límite $a \rightarrow 0$ la ecuación para n impar no tiene solución, lo que nos lleva a una primera conclusión importante: si hay estados estacionarios, sólo hay uno, el correspondiente al número cuántico $n = 0$.

A su vez, si su energía E_0 es finita entonces podemos despreciar E_0 frente a V_0 en la expresión (9.23) para k , por lo que, usando (9.25),

$$k \simeq \frac{1}{\hbar} \sqrt{2MV_0} \quad \Rightarrow \quad \frac{4MV_0a}{4\hbar^2 - MV_0a^2} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2ME_0}.$$

Ahora bien, $aV_0 = \gamma$ de donde $V_0a^2 = \gamma a$ tiende a cero. Queda en definitiva que

$$\frac{M\gamma}{\hbar} = \sqrt{-2ME_0} \quad \Rightarrow \quad E_0 = -\frac{M\gamma^2}{2\hbar^2} \quad (9.26)$$

que toma un valor finito, tal y como habíamos supuesto. La autofunción, ya en el límite $a \rightarrow 0$, será

$$\Phi_0(x) = \mathcal{A} \exp(-\eta|x|), \quad \text{con } \eta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2ME_0} = M\gamma/\hbar^2, \quad (9.27)$$

donde \mathcal{A} es una constante de normalización igual a $\sqrt{\eta}$ (¡compruébelo!). Nótese que la derivada de la autofunción no es continua en $x = 0$, como corresponde al carácter singular de la energía potencial en este punto.

EJEMPLO 9.c. El pozo semi-infinito

La energía potencial de una partícula de masa M en una dimensión es

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } x < 0 \\ 0 & \text{si } x \in (0, a) \quad \text{con } V_0 > 0, \\ V_0 & \text{si } x > a \end{cases} \quad (9.28)$$

y se dice que la partícula está sometida a la acción de pozo semi-infinito de anchura a y profundidad V_0 .

- a) Indique cuál es la estructura del espectro de energías del sistema.
- b) Halle la forma general de las autofunciones de los estados estacionarios ligados.
- c) Obtenga en función de M, a, V_0 el número de estados ligados del pozo.
- d) Si $V_0 = 1$ eV y $Ma^2V_0/(2\hbar^2) = 12,5$, obtenga las energías de los estados ligados. Represente las autofunciones correspondientes.

Solución:

- a) De manera inmediata, podemos decir que el espectro puntual está contenido en el intervalo $(0, V_0)$. El espectro continuo es $\sigma_c = [V_0, \infty)$, siendo todas las autoenergías no degeneradas.
- b) Las autofunciones son idénticamente nulas si $x \leq 0$. Si E es una energía del espectro puntual, imponiendo que $\Phi_E(x)$ es real y que se anula en $x = 0$,

$$\Phi_E(x) = \mathcal{A} \times \begin{cases} \sin(kx) & \text{si } x \in [0, a] \quad ; \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2ME} \\ \mathcal{D} \exp(-\eta x) & \text{si } x \geq a \quad ; \quad \eta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2M(V_0 - E)} \end{cases} \quad (9.29)$$

donde \mathcal{A} es una constante de normalización.

c) La derivada de la función no puede ser continua en $x = 0$ debido a la singularidad del potencial, pero en $x = a$ tanto la autofunción como su derivada han de serlo. Esto lleva a que

$$\left. \begin{aligned} \sin(ka) &= \mathcal{D} \exp(-\eta a) \\ k \cos(ka) &= -\eta \mathcal{D} \exp(-\eta a) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \tan(ka) = -\frac{k}{\eta}.$$

Las energías de los estados ligados son entonces la solución de la ecuación trascendente

$$\tan \left(\sqrt{\frac{2Ma^2}{\hbar^2} E} \right) = -\sqrt{\frac{E}{V_0 - E}} \quad \text{con } E \in (0, V_0).$$

Introduzcamos la constante adimensional $\beta = Ma^2V_0/(2\hbar^2)$ y la energía adimensionalizada $\varepsilon = E/V_0$. La anterior ecuación será entonces

$$\tan \sqrt{4\beta\varepsilon} = -\sqrt{\frac{\varepsilon}{1-\varepsilon}} \quad \text{con } \varepsilon = \frac{E}{V_0} \in (0, 1). \quad (9.30)$$

Puesto que el segundo miembro recorre el intervalo $(0, -\infty)$, el número de estados ligados N será igual al de ramas negativas que toma la función $\tan \sqrt{4\beta\varepsilon}$ en el rango $0 < \varepsilon < 1$. Como la función $\tan u$ es negativa cuando $u \in (\pi/2, \pi)$, $u \in (3\pi/2, 2\pi)$, $u \in (5\pi/2, 3\pi)$, etc. y el máximo valor que alcanza el argumento de la función tangente en (9.30) es $2\sqrt{\beta}$, tenemos que

$$N = \text{Int} \left(\frac{2\sqrt{\beta}}{\pi} + \frac{1}{2} \right) = \text{Int} \left(\sqrt{\frac{2Ma^2V_0}{\pi^2\hbar^2}} + \frac{1}{2} \right) \quad (9.31)$$

(compare el resultado con el correspondiente al pozo simétrico, dado en la ecuación 9.19). De esta manera sólo existirán estados ligados si

$$\sqrt{\frac{2Ma^2V_0}{\pi^2\hbar^2}} + \frac{1}{2} > 1 \quad \Rightarrow \quad V_0a^2 > \frac{\pi^2\hbar^2}{8M}.$$

A diferencia pues del pozo cuadrado finito, que siempre tiene al menos un estado ligado, puede ocurrir que un pozo semi-infinito demasiado estrecho (fijado V_0) o insuficientemente profundo (fijado a) no pueda confinar a la partícula.

d) Como $\beta = 12,5$, la ecuación que debemos resolver es

$$\tan \sqrt{50\varepsilon} = -\sqrt{\frac{\varepsilon}{1-\varepsilon}} \quad \Rightarrow \quad g(\varepsilon) \equiv \sqrt{1-\varepsilon} \tan \sqrt{50\varepsilon} = -\sqrt{\varepsilon}.$$

Usamos el método gráfico mostrado en el panel izquierdo de la FIG. 9-7. Vemos que hay dos soluciones, correspondientes a los valores $E_0 = 0,15$ eV y $E_1 = 0,59$ eV. Para cada una de estas energías calcularíamos k , η y $\mathcal{D} = \sin(ka) \exp(\eta a)$. Las autofunciones correspondientes están representadas de manera esquemática en el panel derecho de la FIG. 9-7.

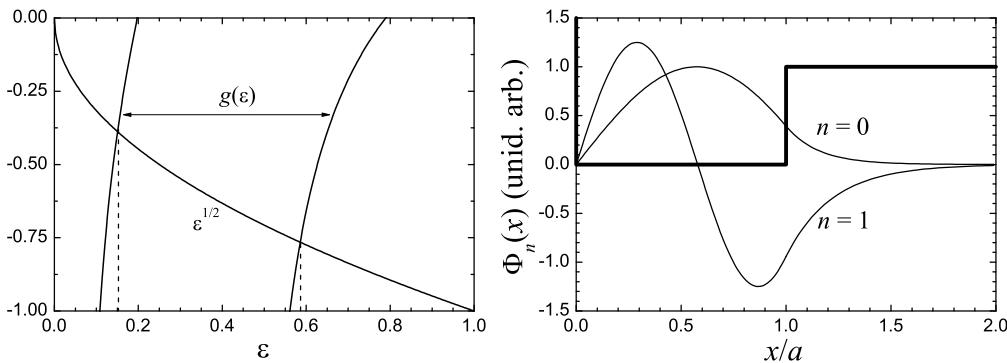


Figura 9-7. Solución gráfica de la ecuación para las autoenergías de un pozo semi-infinito (panel izquierdo, $g(\varepsilon) = \sqrt{1-\varepsilon} \tan \sqrt{50\varepsilon}$) y autofunciones de la energía $\Phi_0(x)$ y $\Phi_1(x)$ en unidades arbitrarias (panel derecho)

PROBLEMAS PROPUESTOS

PROBLEMA 9.1. Estructura de un espectro de energías

Una partícula de masa M está sometida a la acción de una fuerza conservativa cuya energía potencial es

$$V(x) = -\frac{V_0 a^2}{x^2 + a^2} \quad \text{con } V_0 = 10 \text{ eV}, \quad a = 0,5 \text{ nm}$$

Responda a las siguientes preguntas:

- a) ¿En qué rango están las energías de los estados estacionarios ligados?
- b) Para un estado estacionario ligado, ¿cuál es el valor esperado del momento lineal? ¿Y el de la posición?
- c) Para un estado estacionario de colisión cualquiera y considerando que ése es una aproximación efectiva a un estado cuasiestacionario ¿podemos asegurar que el valor esperado del momento lineal sea igual a cero?
- d) Sin embargo, si la energía potencial fuese

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{V_0 a^2}{x^2 + a^2} & \text{si } x \leq 0 \\ -V_0 \times (1 - (x/a)^2) & \text{si } x \geq 0 \end{cases}$$

¿cuál sería el valor esperado del momento lineal de una partícula en un estado estacionario de colisión?

PROBLEMA 9.2. Propiedades de un estado estacionario

Un electrón no relativista en una dimensión está sometido a una fuerza conservativa cuya energía potencial $V(x)$ cumple que $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = 0$. La función de onda normalizada de la partícula es

$$\Psi(x, t) = \frac{\mathcal{A}}{\cosh(x/a_0)} \exp(-iEt/\hbar)$$

donde $a_0 \simeq 0,52 \text{ \AA}$ es el radio de Bohr y \mathcal{A} una constante de normalización.

- a) El electrón está en el estado estacionario fundamental, ¿por qué?
- b) Obtenga la autoenergía E . Para ello analice el comportamiento de la función de onda cuando $|x| \gg 0$.
- c) Halle los valores esperados de la posición y el momento lineal, así como la incertidumbre de la posición. ¿Dependen del tiempo?

Ayudas: $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\cosh^2 u} du = 2$; $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{u^2}{\cosh^2 u} du = \frac{\pi^2}{6}$.

PROBLEMA 9.3. Energías en pozos finitos e infinitos

Una partícula de masa M se encuentra bajo la acción de un pozo de potencial finito de anchura a y profundidad V_0 . Compruebe que si aproximamos sus energías por las de un pozo infinito de anchura a sobreestimaremos las autoenergías del sistema.

PROBLEMA 9.4. Energías en un oscilador armónico

Como veremos en el **capítulo 11**, los niveles de energía de una partícula de masa M que se mueve en una dimensión bajo la acción de una fuerza conservativa $F_x(x) = -M\omega^2 x^2$ (oscilador armónico) son no degenerados y con energías

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad \text{con } n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Denotemos por $\phi_n(x)$ a las autofunciones normalizadas de la energía correspondientes. En un instante de tiempo la función de onda de la partícula es

$$\Psi_\zeta(x) = \mathcal{A} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\zeta^n}{\sqrt{n!}} \phi_n(x) \quad \text{con } \zeta \in \mathbb{C}$$

siendo \mathcal{A} una constante de normalización. Halle, en función del parámetro adimensional ζ y de la frecuencia ω , el valor medio y la incertidumbre de la energía. Obtenga igualmente la probabilidad de que al medir la partícula se obtenga un valor $E < 2\hbar\omega$.

Ayudas: $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{n!} = e^a$; $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{na^n}{n!} = ae^a$; $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{n^2 a^n}{n!} = a(1+a)e^a$

PROBLEMA 9.5. Energías en puntos cuánticos

Imaginemos una partícula de masa M que se mueve libremente, pero confinada dentro de un paralelepípedo de dimensiones $b_x \times b_y \times b_z$. Supongamos que $b_x = b_y \equiv b = 1 \text{ nm}$.

- a) Demuestre que independientemente del valor de b_z el nivel fundamental es no degenerado.
- b) Señale para qué valores de b_z el primer nivel excitado es: i) no degenerado; ii) tiene multiplicidad dos (doble degeneración); iii) tiene multiplicidad tres (triple degeneración).
- c) Deseamos construir un nanodispositivo con estas características en el que los diez primeros niveles de la partícula sean no degenerados. ¿Para qué valores de b_z será esto posible?
- d) Si $b_z = \sqrt{2}b$ obtenga las energías y multiplicidades de los cuatro primeros niveles energéticos de la partícula.

PROBLEMA 9.6. El operador paridad

En el espacio de las funciones de onda de una partícula que se mueve en una dimensión espacial definimos el *operador paridad* $\hat{\Pi}$ a partir de la regla de actuación

$$\hat{\Pi}\Psi(x) = \Psi(-x),$$

esto es, la actuación de $\hat{\Pi}$ sobre una función cambia el signo de su variable.

- a) Demuestre que $\hat{\Pi}$ es simétrico (como su dominio es todo $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, se tiene inmediatamente que es autoadjunto).
- b) Compruebe que su espectro es puramente puntual e igual a $\sigma_p = (-1, +1)$. ¿Cuáles serían las autofunciones correspondientes?
- c) Si la partícula está sometida a un potencial par, $V(x) = V(-x)$, demuestre que el operador paridad y el hamiltoniano \hat{H} son compatibles. Como consecuencia, si \hat{H} tuviese un espectro continuo degenerado no vacío pruebe que $\{\hat{H}, \hat{\Pi}\}$ es un CCOC del sistema.

PROBLEMA 9.7. Evolución temporal en un pozo infinito

Una partícula de masa M se encuentra sometida a la acción de un potencial de pozo cuadrado infinito de anchura a que, por conveniencia, centraremos en el origen. En el instante $t = 0$ la función de onda normalizada de la partícula es

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi_0(x) + \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi_1(x),$$

donde $\Phi_n(x)$ es la n -ésima autofunción normalizada de la autoenergía. Se pide calcular:

- a) La función de onda de la partícula $\Psi(x, t)$ en un instante de tiempo t arbitrario.

- b) Los valores esperados de la posición $\langle x \rangle_t$ y de la componente x del momento lineal $\langle p_x \rangle_t$, para cualquier instante de tiempo. Demuestre que se cumple el primer teorema de Ehrenfest.
- c) La densidad de probabilidad $\rho(x, t)$ y la densidad de corriente de probabilidad $J_x(x, t)$. Compruebe que obedecen la ecuación de continuidad.

Sugerencias: Tenga en cuenta la paridad de los integrandos para evitar hacer integrales innecesarias.

Ayudas: $\int_{-1/2}^{+1/2} u \cos(\pi u) \sin(2\pi u) du = \frac{8}{9\pi^2}$, $\int_{-1/2}^{+1/2} \cos(\pi u) \cos(2\pi u) du = \frac{2}{3\pi}$

PROBLEMA 9.8. Expansión súbita de un pozo infinito

Una partícula de masa M se encuentra en el estado fundamental de un pozo cuadrado infinito de anchura L . Súbitamente se desplaza la pared derecha del pozo, de manera que su anchura se dobla. Si E_n es la n -ésima autoenergía del nuevo pozo ($n = 0, 1, 2, \dots$), obtenga la probabilidad de que al medir la energía de la partícula una vez producida la expansión se obtenga:

- la energía fundamental E_0 ;
- la energía E_1 del primer nivel excitado.

PROBLEMA 9.9. Estados ligados en un pozo asimétrico

Consideremos una partícula de masa M sometida a la acción de la energía potencial

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } x < 0 \\ 0 & \text{si } 0 < x < a \\ 2V_0 & \text{si } x > a \end{cases} \quad \text{con } V_0 > 0$$

Obtenga en función de la anchura a el número de estados estacionarios ligados del pozo. Compruebe entonces que, a diferencia del pozo cuadrado simétrico, hay una anchura crítica a_{crit} tal que no hay estados estacionarios ligados si $a < a_{\text{crit}}$.

PROBLEMA 9.10. (*) Un pozo infinito y un potencial delta

Un electrón está sometido a la acción de una fuerza conservativa que deriva de la energía potencial

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } |x| > a/2 \\ \gamma\delta(x) & \text{si } |x| < a/2 \end{cases} \quad \text{con } \gamma > 0$$

es decir, el potencial corresponde a un pozo cuadrado finito con un potencial tipo delta situado en el origen.

Demuestre que las energías de los estados estacionarios con $n = 1, 2, 3, \dots$ están dadas por

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e a^2} (n + 1)^2,$$

mientras que las de los estados con $n = 0, 2, 4, \dots$ son solución de la ecuación trascendente

$$k_n \cot \frac{k_n a}{2} = -\frac{1}{2} \gamma^2 \quad \text{con} \quad k_n = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_e E_n}.$$

Analice qué ocurre en los límites $\gamma \rightarrow 0$ y $\gamma \rightarrow \infty$.

PROBLEMA 9.11. (!) Espectro de energías en campos centrales

Una partícula de masa M se mueve en el espacio bajo la acción de una fuerza central que deriva de la energía potencial $V(r)$. Tal y como vimos en la sección 8.5, $\{\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z\}$ es un CCOC del sistema. Por tanto, una base de representación del espacio de las funciones de onda de la partícula está formada por las funciones

$$\Phi_{E,\ell,m}(\mathbf{r}) = R_{E,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi), \quad \text{con} \quad \begin{cases} \ell = 0, 1, 2, \dots \\ m = -\ell, \dots, 0, \dots, +\ell \end{cases}$$

que son autofunciones de los operadores del CCOC con autovalores respectivos E , $\ell(\ell + 1)\hbar^2$ y $m\hbar$. Si definimos la función de onda radial reducida

$$u_{E,\ell}(r) = r R_{E,\ell}(r), \quad \text{con } r \in [0, \infty)$$

ésta satisface la ecuación de Schrödinger unidimensional efectiva

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + V_\ell(r) \right] u_{E,\ell}(r) = Eu_{E,\ell}(r)$$

donde

$$V_\ell(r) = \begin{cases} \infty & \text{si } r < 0 \\ V(r) + \frac{\ell(\ell + 1)\hbar^2}{2Mr^2} & \text{si } r \geq 0. \end{cases}$$

Supongamos que la función $V(r)$ es igual al valor constante V_∞ cuando $r \gg 0$ y que V_{\min} es el mínimo absoluto de $V(r)$.

- a) Demuestre que, de existir, el espectro puntual de \hat{H} está contenido en el intervalo $[V_{\min}, V_\infty]$, mientras que el espectro continuo es $[V_\infty, +\infty)$. Indique someramente cómo son las autofunciones de cada nivel energético. Compruebe que, salvo degeneración accidental (vea el apartado §8.5.5), la multiplicidad de los niveles energéticos del espectro puntual es $2\ell + 1$. ¿Cuál es la degeneración de los niveles energéticos del espectro continuo?
- b) Supongamos que $\lim_{r \rightarrow 0} [r^2 V(r)] = 0$. Demuestre que $R_{E,\ell}(r) \propto r^\ell$ cuando $r \sim 0$. Como consecuencia, compruebe que únicamente las autofunciones de la energía en onda s ($\ell = 0$) son no nulas en $\mathbf{r} = \mathbf{0}$.

- c) Obtenga el comportamiento asintótico ($r \gg 0$) de las funciones $R_{E,\ell}(r)$, distinguiendo entre los casos $E \in \sigma_p(H)$ y $E \in \sigma_c(H)$.
- d) Imaginemos que la energía potencial de la partícula es

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } r \in [0, a] \\ 0 & \text{si } r > a \end{cases} \quad \text{con } V_0 > 0$$

Obtenga para qué valores del número cuántico ℓ se tiene la seguridad de que no existen estados estacionarios ligados.

TEMA 10

ESTADOS DE COLISIÓN EN UNA DIMENSIÓN

En este capítulo, continuación natural del anterior, analizaremos los estados estacionarios de colisión en sistemas unidimensionales simples. Tras una primera sección en la que estudiaremos su interpretación física, plantearemos diferentes problemas de complejidad creciente, prestando especial atención al denominado *efecto túnel* y al concepto de *resonancia*.

Orientaciones generales al plan de trabajo

Sugerimos unas **15 horas** de trabajo personal, que han de dedicarse en buena parte a la resolución de los diferentes casos expuestos a lo largo del tema y a la de los problemas propuestos.

El estudio de las “resonancias”, que se presenta en el **Apéndice** es un complemento. Si el alumno lo estudia, debe centrarse en los importantes aspectos físicos del problema, prestando mucha menos atención a los detalles matemáticos (las operaciones que allí aparecen, aun siendo analíticas, son muy tediosas y sólo se pueden hacer en un tiempo prudencial utilizando programas de ordenador de cálculo simbólico).

Objetivos del capítulo

- Saber interpretar físicamente los estados estacionarios de colisión.
- Conocer el significado de los coeficientes de reflexión y transmisión y saber obtenerlos a partir de los comportamientos asintóticos de la función de ondas de un estado estacionario de colisión.
- Dominar la técnica para la obtención de autofunciones y autoenergías del espectro continuo en sistemas unidimensionales simples.
- Familiarizarse con el fenómeno del efecto túnel y sus implicaciones físicas, estimando la transmisión por efecto túnel mediante la fórmula de Gamow.
- Conocer qué es un estado de resonancia y sus propiedades físicas.

10.1. ESTADOS DE COLISIÓN. INTERPRETACIÓN FÍSICA

§ 1. Como ya sabemos, la obtención de *todas* las autofunciones de la energía es un requisito previo para estudiar la evolución temporal de una función de onda arbitraria, aunque en aplicaciones prácticas se prefiere a veces abordar este problema mediante la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger. Aun así, las autofunciones del espectro continuo tendrán una importante interpretación física, por lo que su obtención será interesante *per se*.

Consideremos una partícula de masa M bajo una fuerza $F(x)$ cuya energía potencial tiene la forma general de la **FIG. 10-1**, donde hemos situado el origen de energías de modo que $V(x) = 0$ si $x \ll 0$. Como sabemos, pueden existir estados estacionarios ligados con energías en el rango $(-V_0, 0]$, pero nuestro interés en este capítulo son los *estados estacionarios de colisión*, cuyas energías estarán en el intervalo $(0, V_+)$ (espectro no degenerado) y en el intervalo (V_+, ∞) (espectro continuo degenerado). Aunque la ubicación de 0 y V_+ en el espectro de energías dependa de cada caso particular, esto no afectará a las conclusiones generales que vamos a obtener. Estudiemos, pues, cada una de las partes del espectro continuo por separado.

§ 2. $E \in (0, V_+)$. Espectro continuo no degenerado.

Si $\Phi_E(x)$ es la autofunción con autoenergía $E \in (0, V_+)$, sabemos del capítulo anterior que dicha autofunción es real y única (salvo constante multiplicativa irrelevante). Teniendo esto en cuenta,

$$\boxed{\Phi_E(x) = \begin{cases} \mathcal{A}e^{ikx} + \mathcal{A}^*e^{-ikx} & \text{si } x \ll 0 \quad \text{con } k = \frac{\sqrt{2ME}}{\hbar} \\ \mathcal{D}e^{-qx} & \text{si } x \gg 0 \quad \text{con } q = \frac{\sqrt{2M(V_+ - E)}}{\hbar} \end{cases}} \quad (10.1)$$

siendo \mathcal{D} un coeficiente real. Expresando el coeficiente \mathcal{A} en forma polar, $\mathcal{A} = |\mathcal{A}| \exp(i\delta)$, donde $|\mathcal{A}|$ es el módulo de \mathcal{A} y δ su argumento, los comportamientos asintóticos (10.1) pueden reescribirse como

$$\Phi_E(x) = \begin{cases} 2|\mathcal{A}| \cos(kx + \delta) & \text{si } x \ll 0 \\ \mathcal{D}e^{-qx} & \text{si } x \gg 0. \end{cases} \quad (10.2)$$

En la región $x \ll 0$, la función de onda $\Phi_E(x, t)$ toma la forma de una onda estacionaria, $2|\mathcal{A}| \cos(kx + \delta) \exp(-i\omega t)$, donde $\omega = E/\hbar$ es su frecuencia. Como

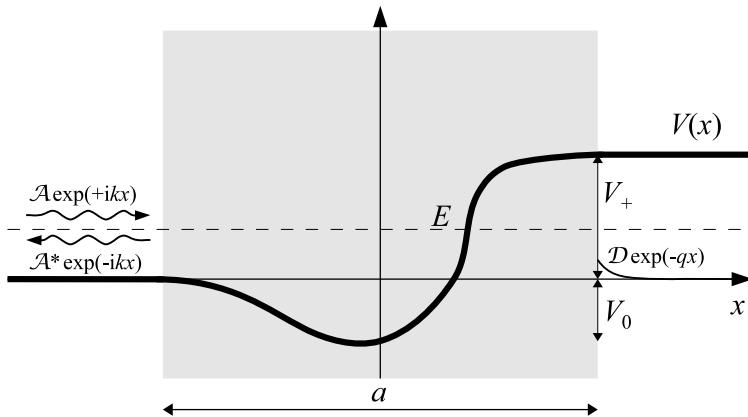


Figura 10-1. Esquema de los comportamientos asintóticos de una autofunción no normalizable $\Phi_E(x)$ correspondiente al espectro continuo no degenerado de una partícula que se mueve en una dimensión espacial

mostramos esquemáticamente en la **FIG. 10-1**, esta onda estacionaria es igual a la superposición de dos ondas planas, $\mathcal{A} \exp[i(kx - \omega t)]$ y $\mathcal{A}^* \exp[i(-kx - \omega t)]$, que se propagan en sentidos opuestos.

En $x \gg 0$, por el contrario, $\Phi_E(x, t)$ es igual a una onda amortiguada o evanescente $\mathcal{D} \exp(-qx) \exp(-i\omega t)$.

Tal y como vimos en el **capítulo 6**, $\Phi_E(x, t)$ representa un estado ideal físicamente irrealizable: aquél en el que la partícula interactúa con la fuerza $F(x)$ con energía E en el límite en el que la incertidumbre de la energía es muy pequeña, $\Delta H \rightarrow 0$. Así, mediante la función de onda no normalizable $\Phi_E(x, t)$ podremos describir aproximadamente la dependencia espacial de la función de onda *normalizable* $\Psi(x, t)$ de una partícula en un estado cuasiestacionario durante un lapso de tiempo, (que por convenio suponemos pequeño, esto es, que $t \sim 0$) en el que la partícula sufre de manera efectiva la acción de la fuerza $F(x)$. Más concretamente, si la incertidumbre en la energía es lo suficientemente pequeña como para que la extensión del paquete de ondas $\Psi(x, t)$ sea mucho mayor que la anchura a de la región en la que $F(x)$ es no nula, tendremos que la función de onda en una zona muy amplia del espacio centrada en $x = 0$ será aproximadamente

$$\Psi_{\text{col}}(x, t) \simeq \Phi_E(x) e^{-iEt/\hbar} \quad \text{para } t \sim 0 \quad (10.3)$$

[con el subíndice “col” indicamos que nos estamos refiriendo a la partícula en el intervalo de tiempo durante el que colisiona con el objeto que produce la fuerza $F(x)$].

Si atendemos ahora a la estructura de $\Phi_{\text{col}}(x, t)$, vemos en primer lugar que debe tender a cero a medida que x aumenta, ya que es imposible que la partícula se propague hacia $x = +\infty$. En consecuencia, la función $\Phi_{\text{col}}(x, t)$ *representa el proceso físico de reflexión total de una partícula con una energía E muy bien definida procedente de x = -∞ a causa de la acción de la fuerza F(x)*.

En la ecuación (10.1), la componente asintótica (para $x \ll 0$) $\mathcal{A} \exp[i(kx - \omega t)]$ corresponde a la onda de materia de la partícula cuando incide desde $-\infty$ hacia la región donde existe la fuerza, mientras que $\mathcal{A}^* \exp[i(-kx - \omega t)]$ está asociada a la dinámica de la partícula tras ser reflejada.

Naturalmente, el tratamiento cuántico completo de la evolución dinámica de esta partícula debe hacerse en términos de la propagación del paquete de ondas $\Psi(x, t)$ regida por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Sin embargo, el análisis somero que acabamos de hacer nos permite afirmar que:

- si una partícula con una energía $E \in (0, V_+)$ muy bien definida procede desde $x = -\infty$ con momento lineal $p_x = \hbar k = \sqrt{2ME}$, su función de onda $\Psi(x, t)$ (antes de que la fuerza empiece a actuar sobre la partícula) será la onda plana $\mathcal{A} \exp[i(kx - \omega t)]$ multiplicada por un factor de modulación localizado en la región $x \ll 0$:

$$\Psi_{\text{in}}(x, t) \simeq \mathcal{A} e^{ikx} e^{-iEt/\hbar} \quad \text{en } x \ll 0 \quad \text{para } t \ll 0. \quad (10.4)$$

- una vez que la fuerza ha actuado sobre la partícula, ésta retornará hacia $x = -\infty$ desplazándose con momento lineal $p_x = -\hbar k$, por lo que su función de onda será otra onda plana modulada pero con número de onda $-k$:

$$\Psi_{\text{fin}}(x, t) \simeq \mathcal{A}^* e^{-ikx} e^{-iEt/\hbar} \quad \text{en } x \ll 0 \quad \text{para } t \gg 0 \quad (10.5)$$

y, en este sentido, la evolución cuántica de una partícula en este rango de energías es cualitativamente similar a la evolución clásica.

Recalquemos de nuevo que esta descripción es válida sólo si ΔH es suficientemente pequeña.

§ 3. $E > V_+$. Espectro continuo degenerado.

Los comportamientos asintóticos de una autofunción de la energía son ahora

$$\Phi_E(x) = \begin{cases} \mathcal{A} e^{+ikx} + \mathcal{B} e^{-ikx} & \text{con } k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2ME} \\ \mathcal{C} e^{+iqx} + \mathcal{D} e^{-iqx} & \text{con } q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2M(E - V_+)} \end{cases} \quad \text{si } x \ll 0 \quad (10.6)$$

donde los coeficientes complejos $(\mathcal{A}, \mathcal{B})$ dependen linealmente de los $(\mathcal{C}, \mathcal{D})$ a través de una matriz:

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} \\ \mathcal{B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{C} \\ \mathcal{D} \end{pmatrix}.$$

A su vez, si $\Phi_E(x)$ es autofunción de la energía también lo es su compleja conjugada

$$\Phi_E^*(x) = \begin{cases} \mathcal{B}^*e^{+ikx} + \mathcal{A}^*e^{-ikx} & \text{si } x \ll 0 \\ \mathcal{D}^*e^{+iqx} + \mathcal{C}^*e^{-iqx} & \text{si } x \gg 0 \end{cases}$$

y los coeficientes $(\mathcal{B}^*, \mathcal{A}^*)$ se obtendrían aplicando *la misma* matriz \mathbf{T} a la dupla $(\mathcal{D}^*, \mathcal{C}^*)$. Esto es

$$\begin{pmatrix} \mathcal{B}^* \\ \mathcal{A}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{D}^* \\ \mathcal{C}^* \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} \mathcal{A} \\ \mathcal{B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{22}^* & t_{21}^* \\ t_{12}^* & t_{11}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{C} \\ \mathcal{D} \end{pmatrix},$$

donde hemos llegado al segundo resultado tras tomar complejos conjugados y reordenar términos. De esta manera los elementos de la matriz cumplen que

$$t_{11} = t_{22}^* \equiv a_E \quad ; \quad t_{21} = t_{12}^* \equiv r_E.$$

Por último, como vimos en el capítulo anterior (cfr. el epígrafe §9.1.2)

$$\frac{i\hbar}{2M} \left[\Phi_E(x) \frac{d\Phi_E^*(x)}{dx} - \Phi_E^*(x) \frac{d\Phi_E(x)}{dx} \right] = \text{constante} \quad (10.7)$$

y aplicando este resultado a la autofunción $\Phi_E(x)$, los coeficientes $\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}$ y \mathcal{D} deben obedecer la relación

$$(|\mathcal{A}|^2 - |\mathcal{B}|^2) k = (|\mathcal{C}|^2 - |\mathcal{D}|^2) q. \quad (10.8)$$

Si ahora expresamos $(\mathcal{A}, \mathcal{B})$ en función de $(\mathcal{C}, \mathcal{D})$ tenemos que

$$\begin{aligned} (|a_E \mathcal{C} + r_E^* \mathcal{D}|^2 - |r_E \mathcal{C} + a_E^* \mathcal{D}|^2) k &= (|\mathcal{C}|^2 - |\mathcal{D}|^2) q \Rightarrow \\ &\Rightarrow (|a_E|^2 - |r_E|^2) (|\mathcal{C}|^2 - |\mathcal{D}|^2) = (|\mathcal{C}|^2 - |\mathcal{D}|^2) \frac{q}{k} \Rightarrow |a_E|^2 - |r_E|^2 = q/k. \end{aligned}$$

En definitiva, los coeficientes que determinan los comportamientos asintóticos de las autofunciones con energía $E > V_+$ están relacionados entre sí mediante la siguiente expresión matricial:

$$\boxed{\begin{pmatrix} \mathcal{A} \\ \mathcal{B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_E & r_E^* \\ r_E & a_E^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{C} \\ \mathcal{D} \end{pmatrix} \quad \text{con } |a_E|^2 - |r_E|^2 = \frac{q}{k}.} \quad (10.9)$$

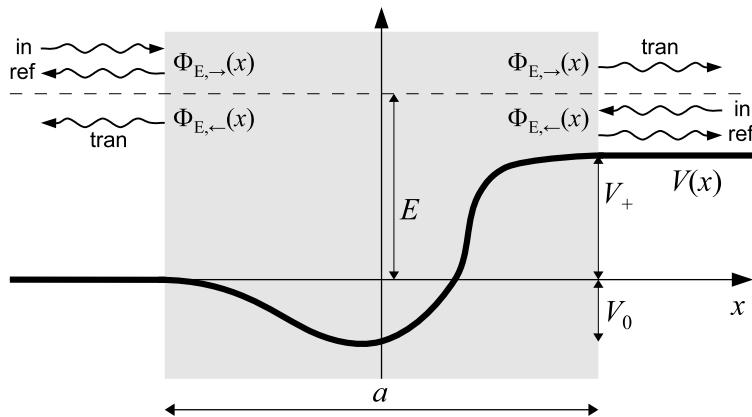


Figura 10-2. Diagrama de energías correspondiente a la reflexión/transmisión de una partícula de energía E tras incidir contra una región en la que actúa una fuerza $F(x)$. Se muestran esquemáticamente los comportamientos asintóticos de las autofunciones no normalizables

Si $E > V_+$, el espacio lineal de las autofunciones de la energía con autovalor E tiene dimensión dos. Así, de entre todas las posibles autofunciones $\Phi_E(x)$ consideraremos tan sólo las que corresponden a los dos casos $\mathcal{D} = 0$ y $\mathcal{A} = 0$, a las que llamaremos respectivamente $\Phi_{E,\rightarrow}(x)$ y $\Phi_{E,\leftarrow}(x)$. Aunque en general no son ortogonales, estas funciones son linealmente independientes y cualquier autofunción $\Phi_E(x)$ se escribirá como combinación lineal de las mismas. El motivo por el que hemos escogido estas funciones será evidente dentro de un momento.

- Para la función $\Phi_{E,\rightarrow}(x)$ tenemos que (10.9) se reduce a

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} \\ \mathcal{B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_E & r_E^* \\ r_E & a_E^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{C} \\ 0 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \mathcal{C} = \frac{1}{a_E} \mathcal{A} ; \quad \mathcal{B} = \frac{r_E}{a_E} \mathcal{A}$$

y los límites asintóticos (10.6) para esta autofunción son

$$\boxed{\Phi_{E,\rightarrow}(x) = \mathcal{A} \times \begin{cases} e^{+ikx} + \frac{r_E}{a_E} e^{-ikx} & \text{si } x \ll 0 \\ \frac{1}{a_E} e^{+iqx} & \text{si } x \gg 0. \end{cases}} \quad (10.10)$$

El coeficiente \mathcal{A} es aquí una mera constante multiplicativa ya que los coeficientes a_E y r_E dependen únicamente de la energía E .

Si interpretamos esta autofunción siguiendo las mismas ideas que en el epígrafe anterior, $\Phi_{E \rightarrow}(x, t)$ estará físicamente asociada a la evolución cuasiestacionaria de una partícula que procede desde $x \ll 0$ con momento lineal $\hbar k$ (vea la FIG. 10-2). Para $t \ll 0$, la función de onda $\Psi(x, t)$ de este estado cuasiestacionario cumplirá que

$$\Psi_{\text{in}}(x, t) \simeq \mathcal{A} e^{ikx} e^{-i\omega t} \quad \text{en } x \ll 0 \quad \text{para } t \ll 0 \quad (10.11)$$

mientras que, tras sufrir la acción de la fuerza $F(x)$,

$$\Psi_{\text{fin}}(x, t) \simeq \mathcal{A} \times \begin{cases} \frac{r_E}{a_E} e^{-i(kx + \omega t)} & \text{en } x \ll 0 \\ \frac{1}{a_E} e^{+i(qx - \omega t)} & \text{en } x \gg 0 \end{cases} \quad \text{para } t \gg 0 \quad (10.12)$$

Así, la función de onda de la partícula se ha difractado, dividiéndose en una onda reflejada y en otra transmitida, cuyas partes espaciales son

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{refl}}(x) &= \frac{r_E}{a_E} \mathcal{A} e^{-ikx} & \text{en } x \ll 0 \\ \Phi_{\text{tran}}(x) &= \frac{1}{a_E} \mathcal{A} e^{+iqx} & \text{en } x \gg 0. \end{aligned} \quad (10.13)$$

Existe entonces una probabilidad no nula, r_E/a_E , de que la partícula regrese a $x \ll 0$ ja pesar de que la energía es mayor que la diferencia de energía potencial entre $+\infty$ y $-\infty$!

Por otra parte, la densidad de corriente de probabilidad de la función de onda incidente (véase la ecuación (6.26)), introduciendo la parte espacial $\Phi_{\text{in}}(x)$, es

$$J_{\text{in}}(x) \simeq \frac{i\hbar}{2M} \left[\Phi_{\text{in}}(x) \frac{d\Phi_{\text{in}}^*(x)}{dx} - \Phi_{\text{in}}^*(x) \frac{d\Phi_{\text{in}}(x)}{dx} \right] = \frac{\hbar k}{M} |\mathcal{A}|^2 \quad \text{en } x \ll 0 \quad (10.14)$$

y, de similar manera, obtenemos que las densidades de corriente de probabilidad de las ondas reflejada y transmitida son

$$J_{\text{refl}} = -\frac{\hbar k}{M} \left| \frac{r_E}{a_E} \mathcal{A} \right|^2 \quad ; \quad J_{\text{tran}} = +\frac{\hbar q}{M} \left| \frac{1}{a_E} \mathcal{A} \right|^2. \quad (10.15)$$

Si un haz uniforme formado por partículas con momento lineal $\hbar k$ incide desde $x \ll 0$, entonces J_{in} será proporcional a la intensidad del tal haz (número de partículas que atraviesan un punto por unidad de tiempo). J_{refl} y J_{tran} tendrían

idéntico significado pero para los haces reflejado y transmitido, respectivamente. Esta división del haz incidente se describe mediante los llamados *coeficientes de reflexión y transmisión*

$$\mathcal{R}(E) = \left| \frac{J_{\text{refl}}}{J_{\text{in}}} \right| \quad ; \quad \mathcal{T}(E) = \left| \frac{J_{\text{tran}}}{J_{\text{in}}} \right|. \quad (10.16)$$

Para la autofunción $\Phi_{E,\rightarrow}(x)$,

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(E) &= \left| \frac{J_{\text{refl}}}{J_{\text{in}}} \right| = \frac{|\mathbf{r}_E|^2}{|\mathbf{a}_E|^2} \\ \mathcal{T}(E) &= \left| \frac{J_{\text{tran}}}{J_{\text{in}}} \right| = \frac{q}{k} \frac{1}{|\mathbf{a}_E|^2} = 1 - \frac{|\mathbf{r}_E|^2}{|\mathbf{a}_E|^2} \end{aligned} \quad (10.17)$$

(hemos usado que $|\mathbf{a}_E|^2 - |\mathbf{r}_E|^2 = q/k$) y, en consecuencia,

$$\mathcal{R}(E) + \mathcal{T}(E) = 1. \quad (10.18)$$

Este resultado es lógico: la intensidad del haz incidente debe ser igual a la suma de las intensidades de los haces reflejado y transmitido puesto que de lo contrario se estaría produciendo absorción o emisión de partículas desde la zona en la que actúa la fuerza $F(x)$, fenómeno que no estamos contemplando en absoluto. La igualdad (10.7), completamente equivalente a

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{i\hbar}{2M} \left[\Phi_E(x) \frac{d\Phi_E^*(x)}{dx} - \Phi_E^*(x) \frac{d\Phi_E(x)}{dx} \right] \right) = 0,$$

puede así interpretarse como una ley de conservación del flujo de partículas en un régimen estacionario.

- La autofunción $\Phi_{E,\leftarrow}(x)$, que corresponde a $\mathcal{A} = 0$ en (10.9), está dada por:

$$\Phi_{E,\leftarrow}(x) = \mathcal{D} \times \begin{cases} \frac{q}{k} \frac{1}{\mathbf{a}_E} e^{-ikx} & \text{si } x \ll 0 \\ -\frac{\mathbf{r}_E^*}{\mathbf{a}_E} e^{+iqx} + e^{-iqx} & \text{si } x \gg 0 \end{cases} \quad (10.19)$$

Su interpretación física es muy similar a la de $\Phi_{E,\rightarrow}(x)$, sólo que ahora la onda incidente corresponde a una partícula con momento $-q\hbar$ procedente desde $x \gg 0$.

Las partes espaciales y las densidades de corriente de probabilidad de las funciones de onda incidente, reflejada y transmitida estarán dadas por

$$\begin{aligned}\Phi_{\text{in}}(x) &= \mathcal{D}e^{-iqx} & J_{\text{in}} &= -\frac{\hbar q}{M}|\mathcal{D}|^2 & \text{en } x \gg 0 \\ \Phi_{\text{refl}}(x) &= \frac{-r_E^*}{a_E} \mathcal{D}e^{+iqx} & J_{\text{refl}} &= \frac{\hbar q}{M} \left| \frac{r_E}{a_E} \right|^2 |\mathcal{D}|^2 & \text{en } x \gg 0 \\ \Phi_{\text{tran}}(x) &= \frac{1}{a_E} \frac{q}{k} \mathcal{D}e^{-ikx} & J_{\text{tran}} &= -\frac{\hbar k}{M} \left(\frac{q}{k} \right)^2 \left| \frac{1}{a_E} \right|^2 |\mathcal{D}|^2 & \text{en } x \ll 0\end{aligned}\quad (10.20)$$

Es entonces inmediato comprobar que los coeficientes de reflexión y transmisión coinciden para cada autoenergía E con los que se obtuvieron antes en (10.17) para la autofunción $\Phi_{E,\rightarrow}(x)$. Esta interesante propiedad (fijada una energía, los valores de \mathcal{R} y \mathcal{T} no dependen de dónde proceda la partícula) facilitará enormemente el análisis de muchos problemas.

§ 4. La caracterización de un estado estacionario de colisión en términos de coeficientes de reflexión y transmisión es también posible para una autofunción $\Phi_E(x)$ perteneciente a la parte no degenerada del espectro. Tal y como vimos en el epígrafe **§2**, las partes espaciales de las funciones de onda incidente y reflejada son

$$\begin{aligned}\Phi_{\text{in}}(x) &= \mathcal{A}e^{+ikx} \\ \Phi_{\text{refl}}(x) &= \mathcal{A}^*e^{-ikx}\end{aligned}\quad \text{en } x \ll 0$$

por lo que las corrientes de probabilidad respectivas son

$$J_{\text{in}} = \frac{\hbar k}{M}|\mathcal{A}|^2 \quad ; \quad J_{\text{refl}} = -\frac{\hbar k}{M}|\mathcal{A}^*|^2 = -\frac{\hbar k}{M}|\mathcal{A}|^2.$$

Como consecuencia, $|J_{\text{in}}| = |J_{\text{refl}}|$ y el coeficiente de reflexión es igual a la unidad. A su vez, la onda “transmitida” no es tal sino una onda amortiguada dada por

$$\Phi_{\text{tran}}(x) = \mathcal{D}e^{-\eta x} \quad \text{en } x \gg 0$$

y la corriente de probabilidad es idénticamente nula: $J_{\text{tran}} = 0$. El coeficiente de transmisión es igual a cero.

10.2. EL POTENCIAL ESCALÓN

§ 1. Después de la discusión general de la sección anterior, y como primera aplicación, supongamos que sobre una partícula de masa M que se mueve en

una dimensión espacial actúa una fuerza constante $\mathbf{F} = -F\mathbf{u}_x$, pero únicamente cuando la partícula está en una zona de anchura δa muy pequeña centrada en el origen. Si δa es mucho menor que la longitud de onda característica de la partícula podemos aproximar la energía potencial mediante una *energía potencial escalón*

$$V(x) = \begin{cases} V_+ & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases} \quad \text{con } V_+ = F \delta a$$

(el porqué del nombre es evidente).

El espectro de energías de este sistema carece de parte puntual. La parte continua no degenerada es igual a $(0, V_+]$ y la continua degenerada es (V_+, ∞) . Conviene entonces analizar cada caso por separado.

§ 2. Estudiemos primero el caso $0 < E \leq V_+$.

Para cualquier energía $0 < E \leq V_+$ tenemos únicamente un estado estacionario, no realizable. En la zona $x \leq 0$ su autofunción es

$$\Phi_E(x) = \mathcal{A}e^{ikx} + \mathcal{B}e^{-ikx} \quad \text{con } k = \frac{\sqrt{2ME}}{\hbar} \quad \text{si } x \leq 0$$

mientras que en la zona $x \geq 0$, clásicamente prohibida,

$$\Phi_E(x) = \mathcal{D}e^{-\eta x} \quad \text{con } \eta = \frac{\sqrt{2M(V_+ - E)}}{\hbar} \quad \text{si } x \geq 0.$$

La función $\Phi_E(x)$ y su derivada han de ser continuas en $x = 0$. De esta manera

$$\Phi_E(0^-) = \Phi_E(0^+) \Rightarrow \mathcal{A} + \mathcal{B} = \mathcal{D}$$

$$\Phi'_E(0^-) = \Phi'_E(0^+) \Rightarrow ik(\mathcal{A} - \mathcal{B}) = -\eta\mathcal{D}$$

obteniendo así un sistema de dos ecuaciones que nos permite hallar \mathcal{A} y \mathcal{B} en función de \mathcal{D} :

$$\mathcal{A} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{i\eta}{k} \right) \mathcal{D} ; \quad \mathcal{B} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{i\eta}{k} \right) \mathcal{D}.$$

Nótese que $\mathcal{B} = \mathcal{A}^*$ si hacemos que \mathcal{D} sea real, tal y como corresponde a las autofunciones de la parte continua no degenerada del espectro. En suma:

$$\Phi_E(x) = \mathcal{D} \times \begin{cases} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{i\eta}{k} \right) e^{+ikx} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{i\eta}{k} \right) e^{-ikx} & \text{si } x \leq 0 \\ e^{-\eta x} & \text{si } x \geq 0. \end{cases}$$

Siguiendo la discusión general de la sección anterior, reescribamos $\Phi_E(x)$ usando la forma polar del coeficiente complejo \mathcal{A} ,

$$\mathcal{A} = |\mathcal{A}|e^{i\delta},$$

de manera que

$$|A| = \frac{\mathcal{D}}{2} \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{k^2}} = \frac{\mathcal{D}}{2} \sqrt{\frac{V_+}{E}} \quad , \quad \delta = \arctan \frac{\eta}{k} = \arctan \sqrt{\frac{V_+ - E}{E}}$$

y finalmente

$$\Phi_E(x, t) \propto e^{-i\omega t} \times \begin{cases} \cos(kx + \delta) & \text{si } x \leq 0 \\ \sqrt{\frac{E}{V_+}} \exp(-\eta x) & \text{si } x \geq 0 \end{cases}$$

$$\text{con } \omega = \frac{E}{\hbar}, \quad k = \frac{\sqrt{2ME}}{\hbar}, \quad \eta = \frac{\sqrt{2M(V_+ - E)}}{\hbar}, \quad \delta = \arctan \sqrt{\frac{V_+ - E}{E}}.$$

(10.21)

Vemos que la función de onda es igual a una onda estacionaria en la región $x \leq 0$ que es el resultado de la superposición de una onda incidente $\Phi_{\text{in}}(x, t) = \mathcal{A} \exp[i(kx - \omega t)]$ y otra reflejada $\Phi_{\text{refl}}(x, t) = \mathcal{A}^* \exp[i(-kx - \omega t)]$. En la zona $x \geq 0$ tenemos una onda evanescente que decrece exponencialmente a medida que nos adentramos en esta región clásicamente prohibida. Si $\Phi_E(x, t)$ se usase para describir la dependencia espacial de la función de onda de un estado cuasiestacionario con energía E durante el proceso de colisión de la partícula contra el escalón de potencial, la densidad de probabilidad $\rho(x)$ sería proporcional a $|\Phi_E(x)|^2$ (observe la utilización un tanto metafórica del lenguaje, por otro lado muy habitual). Esta densidad está representada en la **FIG. 10-3**.

En el límite $V_+ \rightarrow \infty$ tenemos que la función de onda se anula en $x > 0$, lo cual es lógico ya que al hacer que $V(x) = \infty$ en la zona $x > 0$ la partícula rebota elásticamente en $x = 0$ independientemente de cual sea su energía. Entonces el ángulo de desfase δ es igual a $\pi/2$ y la función de onda es proporcional a $\sin(kx)$ si $x \leq 0$, resultado que ya apareció al resolver el **problema propuesto 6.9**. En este límite, la función de onda sigue siendo continua en $x = 0$, pero no su derivada. Tal y como anticipamos en la **sección 9.1** esto es consecuencia de un comportamiento singular de $V(x)$, en este caso en el punto $x = 0$.

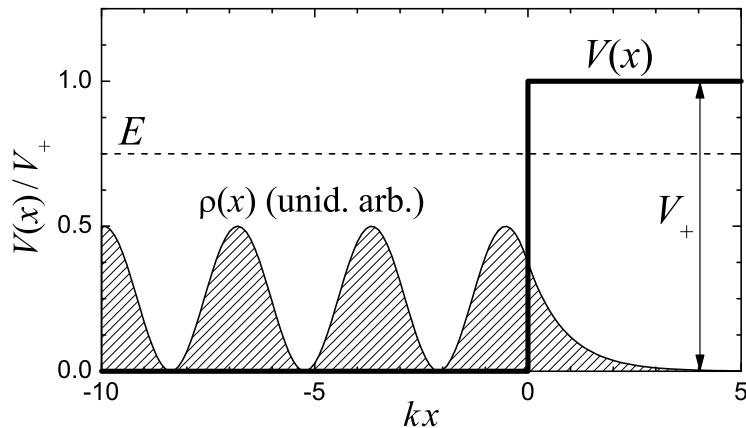


Figura 10-3. Densidad de probabilidad $\rho(x)$ de un estado cuasiestacionario con energía E para una partícula con energía potencial tipo escalón.

§ 3. Toca ahora el caso en que la energía $E > V_+$.

Para una energía $E > V_+$ la forma general de la autofunción $\Phi_E(x)$ es

$$\Phi_E(x) = \begin{cases} \mathcal{A}e^{ikx} + \mathcal{B}e^{-ikx} & \text{con } k = \frac{\sqrt{2ME}}{\hbar} \text{ si } x \leq 0 \\ \mathcal{C}e^{iqx} + \mathcal{D}e^{-iqx} & \text{con } q = \frac{\sqrt{2M(E - V_+)}}{\hbar} \text{ si } x \geq 0 \end{cases} \quad (10.22)$$

Si ahora imponemos la continuidad de $\Phi_E(x)$ y su derivada en $x = 0$ tenemos que

$$\left. \begin{array}{l} \mathcal{A} + \mathcal{B} = \mathcal{C} + \mathcal{D} \\ ik(\mathcal{A} - \mathcal{B}) = iq(\mathcal{C} - \mathcal{D}) \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{A} + \mathcal{B} = \mathcal{C} + \mathcal{D} \\ \mathcal{A} - \mathcal{B} = \frac{q}{k}(\mathcal{C} - \mathcal{D}) \end{array} \right.$$

Este sistema de dos ecuaciones nos permite hallar los valores de $(\mathcal{A}, \mathcal{B})$ en función de los de $(\mathcal{C}, \mathcal{D})$. Para ello basta sumar y restar miembro a miembro, obteniendo que

$$\begin{aligned} \mathcal{A} &= \frac{k+q}{2k}\mathcal{C} + \frac{k-q}{2k}\mathcal{D} \\ \mathcal{B} &= \frac{k-q}{2k}\mathcal{C} + \frac{k+q}{2k}\mathcal{D}. \end{aligned}$$

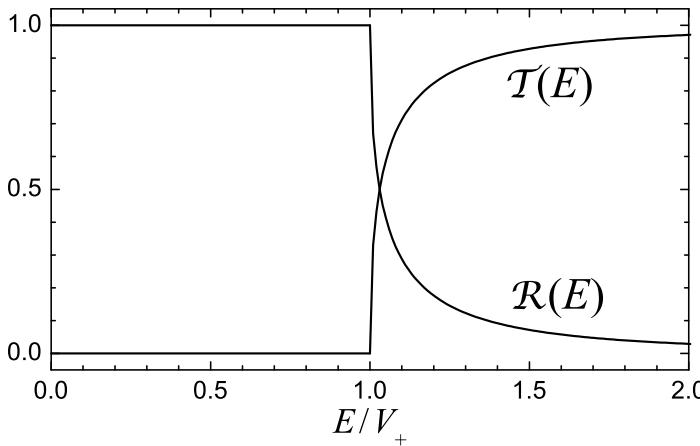


Figura 10-4. Coeficientes de reflexión y transmisión para una energía potencial tipo escalón. El coeficiente de reflexión es igual a la unidad si $E < V_+$

Si ahora reescribimos matricialmente las dos igualdades anteriores tenemos que

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} \\ \mathcal{B} \end{pmatrix} = \frac{1}{2k} \begin{pmatrix} k+q & k-q \\ k-q & k+q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{C} \\ \mathcal{D} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_E & r_E^* \\ r_E & a_E^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{C} \\ \mathcal{D} \end{pmatrix} \quad (10.23)$$

- Para hallar los coeficientes de reflexión y transmisión tomemos la solución particular $\Phi_{E,\rightarrow}(x)$, que es la correspondiente a hacer $\mathcal{D} = 0$. En este caso,

$$\left. \begin{array}{l} \mathcal{A} = \frac{k+q}{2k} \mathcal{C} \\ \mathcal{B} = \frac{k-q}{2k} \mathcal{C} \end{array} \right\} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} \mathcal{C} = \frac{2k}{k+q} \mathcal{A} \\ \mathcal{B} = \frac{k-q}{k+q} \mathcal{A} \end{array} \right\}$$

por lo que

$$\boxed{\Phi_{E,\rightarrow}(x) = \mathcal{A} \times \begin{cases} e^{ikx} + \frac{k-q}{k+q} e^{-ikx} & \text{si } x \leq 0 \\ \frac{2k}{k+q} e^{iqx} & \text{si } x \geq 0 \end{cases}} \quad (10.24)$$

y como consecuencia

$$\boxed{\begin{aligned}\mathcal{R}(E) &= \frac{J_{\text{refl}}}{J_{\text{in}}} = \frac{k|\mathcal{B}|^2}{k|\mathcal{A}|^2} = \left(\frac{k-q}{k+q}\right)^2 = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E-V_+}}{\sqrt{E} + \sqrt{E-V_+}}\right)^2 \\ \mathcal{T}(E) &= \frac{J_{\text{tran}}}{J_{\text{in}}} = \frac{q|\mathcal{C}|^2}{k|\mathcal{A}|^2} = \frac{q}{k} \left(\frac{2k}{k+q}\right)^2 = \frac{4\sqrt{E}\sqrt{E-V_+}}{\left(\sqrt{E} + \sqrt{E-V_+}\right)^2}\end{aligned}} \quad (10.25)$$

cumpliéndose que $\mathcal{R}(E) + \mathcal{T}(E) = 1$, como debe ser. Estos coeficientes están representados en la **FIG. 10-4**.

- Para la autofunción $\Phi_{E,\leftarrow}(x)$, que es la solución con $\mathcal{A} = 0$ dada por

$$\boxed{\Phi_{E,\leftarrow}(x) = \mathcal{D} \times \begin{cases} \frac{2q}{q+k} e^{-ikx} & \text{si } x \leq 0 \\ e^{-iqx} + \frac{q-k}{k+q} e^{+iqx} & \text{si } x \geq 0, \end{cases}} \quad (10.26)$$

se obtendrían los mismos coeficientes de reflexión y transmisión, de acuerdo con la discusión general de la **sección 10.1**.

10.3. LA BARRERA DE POTENCIAL

§ 1. Analicemos ahora un problema algo más complicado, el de una partícula de masa M cuya energía potencial es

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| > a/2 \\ V_0 & \text{si } |x| < a/2, \end{cases} \quad (10.27)$$

representada en la **FIG. 10-5**. Por motivos bastante claros diremos que $V(x)$ es una *barrera de [energía] potencial rectangular* de “altura” V_0 y “anchura” a .

Debido a la estructura de $V(x)$, todos los valores reales $E > 0$ constituyen el espectro (continuo y doblemente degenerado) del hamiltoniano del sistema, que es el único que tiene este sistema. Sin embargo las situaciones físicas son bastante diferentes dependiendo de que la energía de la partícula sea mayor o menor que V_0 , por lo que estudiaremos cada caso por separado.

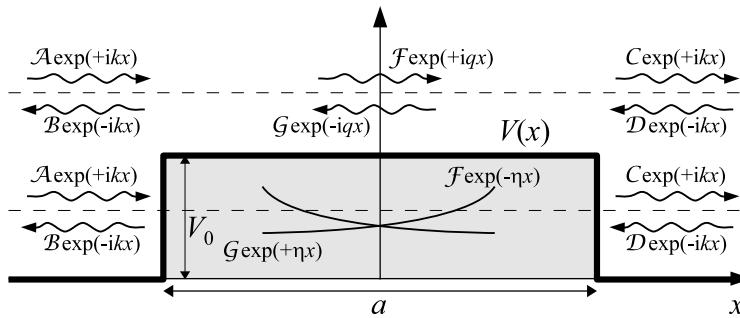


Figura 10-5. Diagrama de energías correspondientes a estados estacionarios en una barrera de potencial. Se muestran esquemáticamente los comportamientos de las funciones de onda si $E > V_0$ y si $E < V_0$

§ 2. Empecemos con las autoenergías $E > V_0$.

Como puede apreciarse en el esquema de la **FIG. 10-5**, la forma general de una autofunción $\Phi_E(x)$ es

$$\Phi_E(x) = \begin{cases} \mathcal{A} \exp(+ikx) + \mathcal{B} \exp(-ikx) & \text{si } x \leq -\frac{a}{2} \\ \mathcal{F} \exp(+iqx) + \mathcal{G} \exp(-iqx) & \text{si } -\frac{a}{2} \leq x \leq +\frac{a}{2} \\ \mathcal{C} \exp(+ikx) + \mathcal{D} \exp(-ikx) & \text{si } x \geq +\frac{a}{2}. \end{cases} \quad (10.28)$$

con $k = \sqrt{2ME}/\hbar$ y $q = \sqrt{2M(E - V_0)}/\hbar$.

La imposición de la continuidad de la autofunción y de su derivada en $x = \pm a/2$ da lugar a un sistema de cuatro ecuaciones. Esto nos permitirá hallar cuatro coeficientes en función de los otros dos (que actuarán como constantes arbitrarias), en lógica correspondencia con el hecho de que el conjunto de autofunciones con energía E forma un espacio lineal de dimensión dos. Sin embargo, y para evitar cálculos en exceso tediosos conviene ser sistemáticos.

- En $x = a/2$ tenemos que

$$\text{continuidad de } \Phi_E(x) : \quad \mathcal{F}e^{+iqa/2} + \mathcal{G}e^{-iqa/2} = \mathcal{C}e^{+ika/2} + \mathcal{D}e^{-ika/2}$$

$$\text{continuidad de } \Phi'_E(x) : \quad iq\mathcal{F}e^{+iqa/2} - iq\mathcal{G}e^{-iqa/2} = ik\mathcal{C}e^{+ika/2} - ik\mathcal{D}e^{-ika/2}$$

Estas ecuaciones se pueden escribir en forma matricial como:

$$\begin{pmatrix} e^{+iqa/2} & e^{-iqa/2} \\ qe^{+iqa/2} & -qe^{-iqa/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{F} \\ \mathcal{G} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{+ika/2} & e^{-ika/2} \\ ke^{+ika/2} & -ke^{-ika/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{C} \\ \mathcal{D} \end{pmatrix}.$$

Cuidando el orden del producto de matrices, podemos desarrollar como sigue:¹

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \mathcal{F} \\ \mathcal{G} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} e^{+iqa/2} & e^{-iqa/2} \\ qe^{+iqa/2} & -qe^{-iqa/2} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} e^{+ika/2} & e^{-ika/2} \\ ke^{+ika/2} & -ke^{-ika/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{C} \\ \mathcal{D} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2q} \begin{pmatrix} qe^{-iqa/2} & e^{-iqa/2} \\ qe^{+iqa/2} & -e^{+iqa/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{+ika/2} & e^{-ika/2} \\ ke^{+ika/2} & -ke^{-ika/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{C} \\ \mathcal{D} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2q} \begin{pmatrix} (q+k)e^{-i(q-k)a/2} & (q-k)e^{-i(q+k)a/2} \\ (q-k)e^{+i(q+k)a/2} & (q+k)e^{+i(q-k)a/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{C} \\ \mathcal{D} \end{pmatrix}. \quad (10.29) \end{aligned}$$

- En $x = -a/2$ se tiene que:

$$\text{continuidad de } \Phi_E(x) : \quad \mathcal{A}e^{-ika/2} + \mathcal{B}e^{+ika/2} = \mathcal{F}e^{-iqa/2} + \mathcal{G}e^{+iqa/2}$$

$$\text{continuidad de } \Phi'_E(x) : \quad ik\mathcal{A}e^{-ika/2} - ik\mathcal{B}e^{+ika/2} = iq\mathcal{F}e^{-iqa/2} - iq\mathcal{G}e^{+iqa/2}.$$

Procediendo de la misma forma que nos permitió llegar a (10.29), tenemos que

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} \\ \mathcal{B} \end{pmatrix} = \frac{1}{2k} \begin{pmatrix} (k+q)e^{-i(q-k)a/2} & (k-q)e^{+i(q+k)a/2} \\ (k-q)e^{-i(q+k)a/2} & (k+q)e^{+i(q-k)a/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{F} \\ \mathcal{G} \end{pmatrix}.$$

Este resultado es el esperable, ya que la matriz debe ser la de (10.29) tras intercambiar q y k por un lado y $+a/2$ y $-a/2$ por otro. Si ahora sustituimos la dupla $(\mathcal{F}, \mathcal{G})$ por su expresión (10.29) y efectuamos el producto de matrices,

¹ Es bastante útil recordar que la inversa de una matriz 2×2 es

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$$

llegamos a que

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} \\ \mathcal{B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_E & r_E^* \\ r_E & a_E^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{C} \\ \mathcal{D} \end{pmatrix}$$

con $\begin{cases} a_E = \left(\cos(qa) + \frac{k^2 + q^2}{2ikq} \sin(qa) \right) e^{ika} \\ r_E = \frac{k^2 - q^2}{2ikq} \sin(qa) \end{cases} \quad (10.30)$

mientras que los coeficientes \mathcal{F}, \mathcal{G} se obtienen de (10.29).

La autofunción $\Phi_{E,\rightarrow}(x)$ se obtiene ahora haciendo $\mathcal{D} = 0$, por lo que los coeficientes de reflexión y transmisión serán

$$\mathcal{R}(E) = \frac{k |\mathcal{B}|^2}{k |\mathcal{A}|^2} = \frac{|r_E|^2}{|a_E|^2} ; \quad \mathcal{T}(E) = \frac{k |\mathcal{C}|^2}{k |\mathcal{A}|^2} = \frac{1}{|a_E|^2}.$$

Sustituyendo y operando obtenemos para $E > V_0$

$$\mathcal{R}(E) = \frac{\sin^2(qa)}{4\varepsilon(\varepsilon - 1) + \sin^2(qa)} ; \quad \mathcal{T}(E) = \frac{4\varepsilon(\varepsilon - 1)}{4\varepsilon(\varepsilon - 1) + \sin^2(qa)}$$

con $\varepsilon = \frac{E}{V_0} > 1$; $qa = \sqrt{\frac{2Ma^2}{\hbar^2}(E - V_0)}$.

(10.31)

Como puede verse en la **FIG. 10-6**, para aquellos valores de la energía que cumplen

$$qa = n\pi \Rightarrow \frac{2Ma^2}{\hbar^2}(E - V_0) = n^2\pi^2 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

el seno que aparece en \mathcal{R} y \mathcal{T} se anula, lo que implica que $\mathcal{R} = 0$ y $\mathcal{T} = 1$ para esos valores. Por consiguiente, para estas energías de incidencia la barrera es “invisible”. Este es el llamado **efecto Ramsauer**, que es observable experimentalmente. Nótese que la longitud de onda De Broglie de la partícula en la zona $(-a/2, a/2)$ es $2\pi/q$, lo que implica que para que se produzca el efecto Ramsauer la anchura de la barrera a ha de ser un múltiplo de una semilongitud de onda De Broglie. En términos de la función de onda, se produce una interferencia destructiva entre las ondas difractadas en los puntos $x = -a/2$ y $x = +a/2$ que lleva a que la onda reflejada $\mathcal{B} \exp(-ikx)$ sea nula.

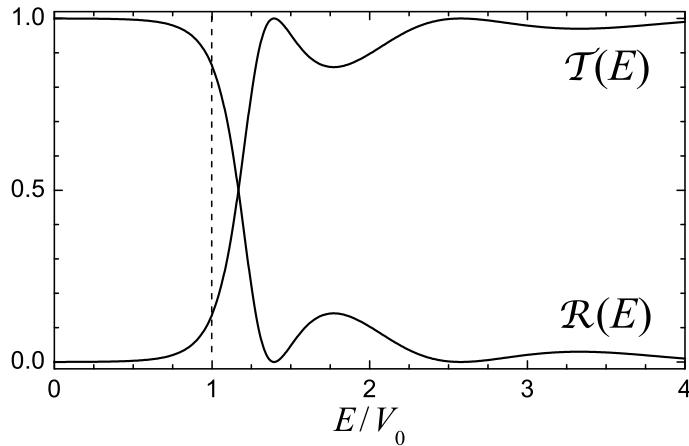


Figura 10-6. Coeficientes de reflexión y transmisión para una barrera de potencial de altura V_0 y anchura a . Los valores representados corresponden a $2Ma^2V_0/\hbar^2 = 25$

§ 3. Abordemos ahora el caso $E < V_0$.

La forma de una autofunción $\Phi_E(x)$ será

$$\Phi_E(x) = \begin{cases} \mathcal{A} \exp(+ikx) + \mathcal{B} \exp(-ikx) & \text{si } x \leq -\frac{a}{2} \\ \mathcal{F} \exp(+\eta x) + \mathcal{G} \exp(-\eta x) & \text{si } -\frac{a}{2} \leq x \leq +\frac{a}{2} \\ \mathcal{C} \exp(+ikx) + \mathcal{D} \exp(-ikx) & \text{si } x \geq +\frac{a}{2} \end{cases} \quad (10.32)$$

con $k = \sqrt{2ME}/\hbar$ y $\eta = \sqrt{2M(V_0 - E)}/\hbar$. Esta función es exactamente igual a la autofunción (10.28) excepto en la región de la barrera, donde el factor iq se sustituye por η . De esta manera podemos aprovechar los resultados para $E > V_0$ simplemente haciendo la sustitución $q \rightarrow -i\eta$. Las expresiones (10.29) y (10.30) son entonces

$$\begin{pmatrix} \mathcal{F} \\ \mathcal{G} \end{pmatrix} = \frac{1}{2\eta} \begin{pmatrix} (\eta + ik)e^{-(\eta - ik)a/2} & (\eta - ik)e^{-(\eta + ik)a/2} \\ (\eta - ik)e^{+(\eta + ik)a/2} & (\eta + ik)e^{+(\eta - ik)a/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{C} \\ \mathcal{D} \end{pmatrix} \quad (10.33)$$

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} \\ \mathcal{B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_E & r_E^* \\ r_E & a_E^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{C} \\ \mathcal{D} \end{pmatrix}$$

con $\left\{ \begin{array}{l} a_E = \left(\cosh(\eta a) + \frac{k^2 - \eta^2}{2ik\eta} \sinh(\eta a) \right) e^{ika} \\ r_E = \frac{k^2 + \eta^2}{2ik\eta} \sinh(\eta a), \end{array} \right.$ (10.34)

donde hemos usado las igualdades $\cos(i\alpha) = \cosh \alpha$ y $\sin(i\alpha) = i \sinh \alpha$.

En este rango de energías $E < V_0$ los coeficientes de reflexión y transmisión serán

$$\mathcal{R}(E) = \frac{\sinh^2(\eta a)}{4\varepsilon(1-\varepsilon) + \sinh^2(\eta a)} ; \quad \mathcal{T}(E) = \frac{4\varepsilon(1-\varepsilon)}{4\varepsilon(1-\varepsilon) + \sinh^2(\eta a)}$$

$$\text{con } \varepsilon = \frac{E}{V_0} \in (0, 1] ; \quad \eta a = \sqrt{\frac{2Ma^2}{\hbar^2} (V_0 - E)}.$$

(10.35)

Por consiguiente, para cualquier energía $E \in (0, V_0)$ hay una probabilidad no nula de que la partícula incidente con onda de De Broglie $A \exp(ikx - iEt/\hbar)$ atravesie la zona $(-a/2, +a/2)$, algo que sería imposible de acuerdo con la mecánica clásica. Este es el **efecto túnel**, que tiene importantísimas implicaciones físicas y tecnológicas, y que analizaremos con algo más de detalle en las próximas secciones.

§ 4. Para $E < V_0$, y en función de la anchura, en bastantes casos el coeficiente de transmisión $\mathcal{T}(E)$ por efecto túnel es muy pequeño. Para ello debe cumplirse que $\eta a \gg 0$. En este caso podemos hacer la aproximación $\exp(-\eta a) \simeq 0$, de manera que

$$\begin{pmatrix} \mathcal{F} \\ \mathcal{G} \end{pmatrix} \simeq \frac{e^{\eta a/2}}{2\eta} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ (\eta - ik)e^{+ika/2} & (\eta + ik)e^{-ika/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{C} \\ \mathcal{D} \end{pmatrix} \Rightarrow \mathcal{F} \simeq 0,$$

por lo que la función de onda dentro de la barrera es una exponencial decreciente. A su vez, como en ese límite $\sinh(\eta a) \simeq \exp(\eta a)/2$ tenemos que

$$\mathcal{R}(E) \simeq 1 ; \quad \mathcal{T}(E) \simeq \frac{16E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right) \exp(-2\eta a).$$

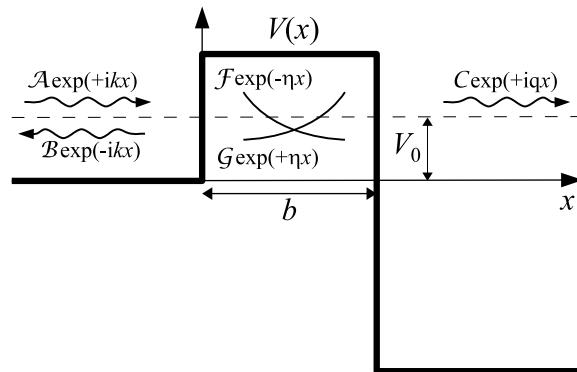


Figura 10-7. Barrera de potencial asimétrica (**ejemplo 10.a**)

El prefactor de la exponencial en $\mathcal{T}(E)$ toma valores entre 0 y 4, por lo que una simple estimación en orden de magnitud del coeficiente de transmisión túnel es

$$\mathcal{T}(E) \sim 2 \exp(-2\eta a) \quad \text{si } \mathcal{T}(E) \ll 1. \quad (10.36)$$

Esta expresión será válida siempre y cuando E no esté muy próxima a 0 o a V_0 (ya que en esos casos el prefactor se anula).

EJEMPLO 10.a. Barrera de potencial asimétrica

Consideremos la energía potencial representada en la **FIG.10-7**:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ 2V_0 & \text{si } x \in (0, b) \quad \text{con } V_0 = 2 \text{ eV} \\ -3V_0 & \text{si } x > b \end{cases}$$

Desde $x \ll 0$ procede un electrón con energía cinética $E = V_0$. Obtenga en función de b el coeficiente de transmisión a través de la barrera y compare el resultado con el proporcionado por la fórmula aproximada (10.36)

Solución:

a) La función de onda del electrón es

$$\Phi_{E,\rightarrow}(x) = \begin{cases} \mathcal{A} e^{ikx} + \mathcal{B} e^{-ikx} & \text{con } k = \sqrt{2m_e E}/\hbar \quad \text{si } x \leq 0 \\ \mathcal{F} e^{\eta x} + \mathcal{G} e^{-\eta x} & \text{con } \eta = \sqrt{2m_e(2V_0 - E)}/\hbar \quad \text{si } 0 \leq x \leq b \\ \mathcal{C} e^{iqx} + \mathcal{D} e^{-iqx} & \text{con } q = \sqrt{2m_e(E + 3V_0)}/\hbar \quad \text{si } x \geq b. \end{cases}$$

Como $E = V_0$,

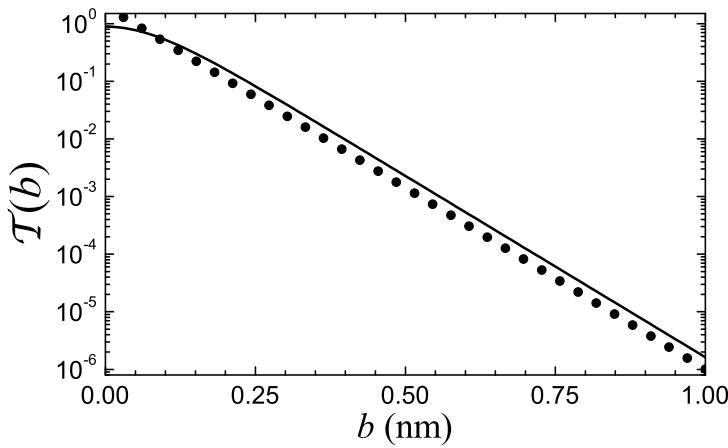


Figura 10-8. Coeficiente de transmisión en función de la anchura b para la barrera de potencial asimétrica del **ejemplo 10.a**. Los círculos representan los resultados de la aproximación dada por la ecuación (10.36)

$$\Phi_{E,\rightarrow}(x) = \begin{cases} \mathcal{A}e^{ikx} + \mathcal{B}e^{-ikx} & \text{si } x \leq 0 \\ \mathcal{F}e^{kx} + \mathcal{G}e^{-kx} & \text{si } 0 \leq x \leq b \quad \text{con } k = \eta \simeq 7,234 \text{ nm}^{-1} \\ \mathcal{C}e^{2ikx} + 0e^{-2ikx} & \text{si } x \geq b. \end{cases}$$

Imponiendo la continuidad de la función de onda y la de su derivada en $x = b$ y $x = 0$ tenemos que

$$x = b : \quad \begin{pmatrix} e^{kb} & e^{-kb} \\ ke^{kb} & -ke^{-kb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{F} \\ \mathcal{G} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{2ikb}\mathcal{C} \\ 2ike^{2ikb}\mathcal{C} \end{pmatrix}$$

$$x = 0 : \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{A} \\ \mathcal{B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ k & -k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{F} \\ \mathcal{G} \end{pmatrix}.$$

Por tanto

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} \\ \mathcal{B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ k & -k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{kb} & e^{-kb} \\ ke^{kb} & -ke^{-kb} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} e^{2ikb}\mathcal{C} \\ 2ike^{2ikb}\mathcal{C} \end{pmatrix}$$

Invirtiendo las matrices tenemos que

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} \\ \mathcal{B} \end{pmatrix} = \frac{1}{4k^2} \begin{pmatrix} k & -i \\ k & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ k & -k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ke^{-kb} & e^{-kb} \\ ke^{+kb} & -e^{+kb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{2ikb}\mathcal{C} \\ 2ike^{2ikb}\mathcal{C} \end{pmatrix}$$

y efectuando los productos y simplificando llegamos a

$$\mathcal{A} = \left\{ \frac{3 \cosh(kb) - i \sinh(kb)}{2} e^{+2ikb} \right\} \mathcal{C}$$

$$\mathcal{B} = \left\{ -\frac{\cosh(kb) + 3i \sinh(kb)}{2} e^{+2ikb} \right\} \mathcal{C}.$$

De esta manera el coeficiente de transmisión es, en función de la anchura b ,

$$\mathcal{T}(b) = \frac{q}{k} \frac{|\mathcal{C}|^2}{|\mathcal{A}|^2} = \frac{2}{\frac{9}{4} \cosh^2(kb) + \frac{1}{4} \sinh^2(kb)} = \frac{8}{10 \cosh^2 \left(\frac{b}{0,138 \text{ nm}} \right) - 1},$$

habiendo usado en el último paso $\cosh^2 \alpha - \sinh^2 \alpha = 1$ y el valor numérico de k .

La estimación (10.36) sería simplemente

$$\mathcal{T}(b) \sim 2 \exp(-2\eta b) = 2 \exp \left(-\frac{2b}{0,138 \text{ nm}} \right)$$

y ambos resultados están representados en la **FIG. 10-8**. Vemos que la fórmula (10.36) proporciona resultados correctos en orden de magnitud si $\mathcal{T} \lesssim 0,1$ incluso en este caso, en el que la barrera de potencial no es simétrica.

10.4. LA FÓRMULA DE GAMOW

§ 1. En general, el cálculo del coeficiente de transmisión por efecto túnel requiere la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger o un cálculo equivalente. Pero si estamos únicamente interesados en una estimación de $\mathcal{T}(E)$ en orden de magnitud es posible generalizar la expresión (10.36) a una barrera de potencial de forma arbitraria.

Recordemos que si $\mathcal{T}(E) \ll 1$ y si E toma valores en la región intermedia de una barrera rectangular de potencial de altura V_0 ,

$$\mathcal{T}(E) \sim 2 \exp \left[-\frac{2\sqrt{2M}a}{\hbar} \sqrt{V_0 - E} \right]. \quad (10.37)$$

Consideremos ahora una barrera de perfil arbitrario y dividámosla en barreras rectangulares de espesor dx y altura $V(x_i)$ (véase la **FIG. 10-9**). Para cada una de ellas, el término $(V_0 - E)^{1/2}$ toma un valor $[V(x_i) - E]^{1/2}$, pero si la

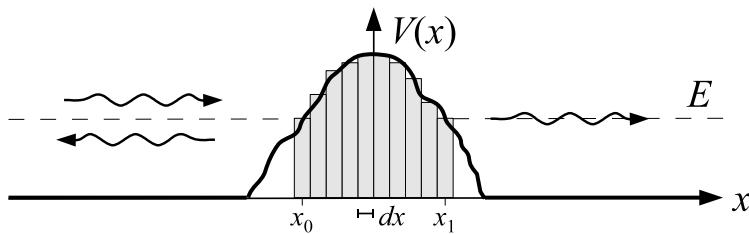


Figura 10-9. Esquema energético para la transmisión de una partícula a través de una barrera de potencial de forma arbitraria

energía potencial varía suavemente podemos calcular el promedio de estos valores y sustituirlo en (10.37), algo que es legítimo ya que la propia expresión de partida es una mera aproximación en orden de magnitud. Para una energía E la anchura total de la barrera es $a = x_1 - x_0$, donde $x_{0,1}$ son los puntos de retroceso clásicos en los que $V(x) = E$, por lo que tomando el límite dx infinitesimal tal promedio será

$$\left\langle \sqrt{V(x) - E} \right\rangle = \frac{1}{a} \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{V(x) - E} dx.$$

Sustituyendo en (10.37) llegamos a la llamada **fórmula de Gamow**

$$\mathcal{T}(E) \sim 2 \exp \left(-\frac{2\sqrt{2M}}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{V(x) - E} dx \right) \quad \text{si } 0 < \mathcal{T}(E) \ll 1, \quad (10.38)$$

que es una aproximación muy fiable en barreras de potencial anchas en las que la variación de $V(x)$ es suave. Veamos su aplicación en un ejemplo concreto.

EJEMPLO 10.b. Barrera de potencial triangular

Consideremos la energía potencial representada en la FIG. 10-10. Usando la fórmula de Gamow estime el coeficiente de transmisión de una partícula de masa M y energía $E < V_0$.

Solución:

La partícula atraviesa la barrera en los puntos

$$x_0 = - \left(1 - \frac{E}{V_0} \right) \frac{b}{2} ; \quad x_1 = + \left(1 - \frac{E}{V_0} \right) \frac{b}{2},$$

por lo que según la fórmula de Gamow

$$\mathcal{T}(E) \sim 2 \exp \left(-\frac{2\sqrt{2M}}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{V(x) - E} dx \right)$$

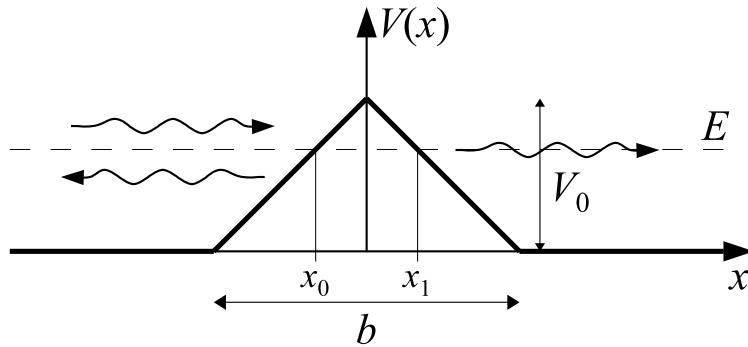


Figura 10-10. Barrera de potencial triangular (ejemplo 10.b)

Para efectuar la integral basta tener en cuenta que

$$V(x) = \left(1 - \frac{2x}{b}\right) V_0 \quad \text{si } 0 \leq x \leq \frac{b}{2}$$

y que el integrando es par. Entonces,

$$\int_{x_0}^{x_1} \sqrt{V(x) - E} dx = 2 \int_0^{x_1} \sqrt{\left(1 - \frac{2x}{b}\right) V_0 - E} dx = \frac{2b\sqrt{V_0}}{3} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right)^{3/2}$$

y, en definitiva,

$$\mathcal{T}(E) \sim 2 \exp \left[-\frac{4b\sqrt{2MV_0}}{3\hbar} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right)^{3/2} \right].$$

10.5. EL MICROSCOPIO DE EFECTO TÚNEL

§ 1. La estructura atómica de la superficie de un material conductor puede determinarse usando el llamado *microscopio de efecto túnel* (*scanning tunneling microscope* (STM), Rohrer y Binnig, 1981). Como mostramos en la **FIG. 10-11**, el dispositivo consiste esencialmente en un circuito que establece una diferencia de potencial (ddp) entre la muestra que se quiere analizar y una punta (de wolframio o platino, generalmente) con una terminación a escala atómica que se sitúa a una distancia de unos pocos angstrom de la superficie de la muestra. Dependiendo del signo de la ddp los electrones pasan por efecto túnel de la punta al material o viceversa pero, como hemos visto en el **ejemplo 10.a**, la corriente así establecida, que es proporcional al coeficiente de transmisión, es muy sensible a un cambio en

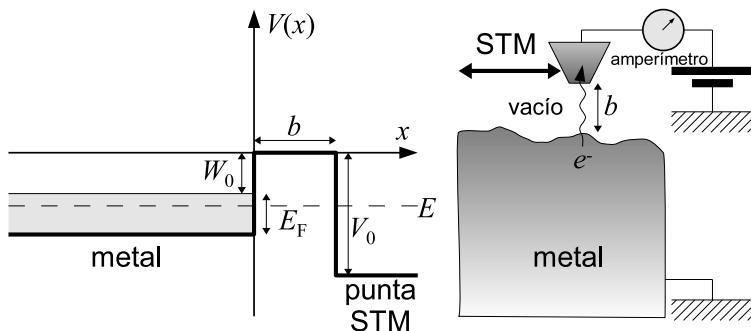


Figura 10-11. Esquema simplificado del funcionamiento de un microscopio de efecto túnel

la distancia entre la punta y el material. Por tanto, si movemos la punta sobre la muestra (sin tocarla, claro está) cualquier variación en la estructura de la superficie va a afectar a esta *corriente túnel*. También se puede proceder a la inversa: con un controlador de alta precisión se mueve la punta subiéndola o bajándola de modo que la intensidad de la corriente túnel permanezca constante, siendo entonces el propio movimiento vertical de la punta el que sirve para deducir la topografía de la superficie de la muestra. Debido a la propia naturaleza del montaje experimental, el microscopio sólo se puede usar en condiciones muy controladas.

§ 2. Con algo más de detalle, el material cuya superficie queremos estudiar ocupa la región $x < 0$, mientras que la punta del STM está a una distancia b de la superficie. Los electrones de conducción de la muestra tienen una energía $-(W_0 + E_F) \leq E \leq -W_0$, donde W_0 es la *función de trabajo* y E_F es la llamada *energía de Fermi*, cuyos valores son en orden de magnitud de unos pocos eV.

Si aplicamos la fórmula de Gamow, de acuerdo con el esquema energético de la **FIG. 10-11** el coeficiente de transmisión será

$$\mathcal{T}(b, E) \sim 2 \exp[-(-8m_e b^2 E)^{1/2} / \hbar] \quad \text{con } -(E_F + W_0) < E < -W_0.$$

La dependencia exponencial de $\mathcal{T}(b, E)$ en $\sqrt{-E}$ hace que la corriente túnel esté formada fundamentalmente por los electrones menos ligados del material, es decir, por aquellos para los que $E \sim -W_0$. Queda entonces que

$$\mathcal{T}(b) \simeq \mathcal{T}(b, -W_0) \sim 2e^{-b/b_0}, \quad \text{con } b_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{8m_e W_0}}, \quad (10.39)$$

donde hemos enfatizado la dependencia de \mathcal{T} con la distancia b .

§ 3. Naturalmente, la descripción anterior es muy simplificada. Por ejemplo, es la estructura atómica del material la que determina cómo son las funciones de ondas de los electrones cerca de la superficie. A pesar de ello podemos estimar en orden de magnitud la intensidad de la corriente túnel.

Para ello partamos de que la densidad de los electrones de la muestra que van a contribuir a la corriente túnel es n_0 . Ese valor dependerá bastante de los detalles del material pero, típicamente, $n_0 \sim 10^{29} \text{ m}^{-3}$. Esta densidad de electrones nos fija la llamada *energía de Fermi*, E_F del material, y se sabe (por conocimientos básicos de física del estado sólido) que los electrones con energía $E \sim -W_0$ tienen una velocidad media dada por la energía de Fermi del sistema, esto es, $\langle v \rangle \sim \sqrt{2E_F/m_e}$. Por otra parte, si la región en la que se produce la transmisión de electrones tiene una sección S , el número de electrones que llegan desde el interior del material a dicha zona (por unidad de tiempo) es

$$\frac{dN_{\text{in}}}{dt} \sim n_0 \langle v \rangle S = n_0 S \sqrt{\frac{2E_F}{m_e}} \quad (10.40)$$

La intensidad de la corriente túnel es $I_{\text{tun}}(b) \simeq e \times (dN_{\text{tran}}/dt)$, donde $-e$ es la carga del electrón y dN_{tran}/dt es el número de electrones transmitidos por unidad de tiempo. Por la definición de coeficiente de transmisión, $dN_{\text{tran}}/dt = \mathcal{T}(b) \times (dN_{\text{in}}/dt)$, usando (10.39) y (10.40) tenemos que

$$I_{\text{tun}}(b) \sim 2en_0 S \sqrt{\frac{2E_F}{m_e}} \exp(-b/b_0). \quad (10.41)$$

Si ahora escogemos los valores típicos $W_0 \sim E_F \sim 2 \text{ eV}$, $n_0 \sim 10^{29} \text{ m}^{-3}$ y $S \sim 10 \text{ \AA}^2$ (la punta está terminada a escala atómica),

$$b_0 \simeq \frac{\hbar}{\sqrt{8m_e W_0}} \simeq 0,07 \text{ nm} \quad ; \quad 2en_0 S \sqrt{\frac{2E_F}{m_e}} \simeq 2,7 \times 10^{-3} \text{ A} \sim 3 \text{ mA}$$

y queda que la intensidad de la corriente túnel es

$$I_{\text{tun}}(b) \sim 3 \exp(-15b) \text{ mA} \quad (b \text{ en nm}). \quad (10.42)$$

Para valores de $b \sim 1 \text{ nm}$ esta intensidad es del orden de los nA. La corriente túnel es entonces muy pequeña pero detectable y, tal y como hemos dicho, depende muy sensiblemente de la distancia b entre la muestra y la punta. En efecto, si I_0 es la intensidad correspondiente a una distancia b_0 de 1 nm, de acuerdo con la expresión (10.42)

$$\frac{I(b)}{I_0} \sim \exp[-15(b - b_0)] \quad (b \text{ en nm})$$

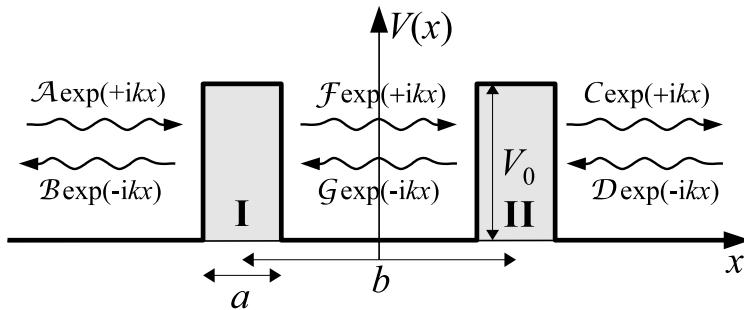


Figura 10-12. Esquema de las autofunciones de la energía de una partícula sometida a la acción de dos barreras de potencial

y un cambio de -1 \AA en la distancia b implica que $I(b)/I_0 \sim 5$: la corriente túnel se quintuplicaría como resultado de una variación a escala atómica. Esta sensibilidad de la corriente túnel es la que permite la determinación experimental muy precisa de la estructura atómica de la superficie del material.

APÉNDICE: RESONANCIAS

Nota: tal y como hemos señalado en la introducción a este capítulo, en esta sección debe prestar más atención a la interpretación física de los resultados que a los detalles matemáticos que nos permiten llegar a los mismos.

§ 1. Consideremos la energía potencial de la **FIG. 10-12**, formada por dos barreras de potencial de altura V_0 , anchura a y cuyos centros están separados una distancia $b = L + a$, donde L es la anchura de la región limitada por las dos barreras. Para este sistema físico el espectro de energías es $\sigma_c = \mathbb{R}^+$ y doblemente degenerado, y las autofunciones de la energía tienen la estructura general

$$\Phi_E(x) = \begin{cases} \mathcal{A}e^{+ikx} + \mathcal{B}e^{-ikx} & \text{si } x \leq -(b+a)/2 \\ \mathcal{A}_{\text{bar}}e^{+iqx} + \mathcal{B}_{\text{bar}}e^{-iqx} & \text{si } -(b+a)/2 \leq x \leq -(b-a)/2 \\ \mathcal{F}e^{+ikx} + \mathcal{G}e^{-ikx} & \text{si } -(b-a)/2 \leq x \leq +(b-a)/2 \\ \mathcal{F}_{\text{bar}}e^{+iqx} + \mathcal{G}_{\text{bar}}e^{-iqx} & \text{si } +(b-a)/2 \leq x \leq +(b+a)/2 \\ \mathcal{C}e^{+ikx} + \mathcal{D}e^{-ikx} & \text{si } x \geq +(b+a)/2 \end{cases} \quad (10.43)$$

con $k = \sqrt{2ME}/\hbar$ y $q = \sqrt{2M(E - V_0)}/\hbar$ (fíjese que si $E < V_0$ entonces $q = i\eta$ con $\eta = |q| = [2M(V_0 - E)]^{1/2}/\hbar$, por lo que la anterior expresión es válida tanto si $E > V_0$ como si $E \in (0, V_0]$).

El problema puede parecer inabordable ya que la aplicación directa de las condiciones de continuidad de la función de onda y de su derivada nos llevaría a un conjunto de 8 ecuaciones lineales para 10 coeficientes. Sin embargo, si seguimos el mismo procedimiento que en la **sección 10.3**, tales condiciones se podrán escribir como un conjunto de cuatro ecuaciones matriciales encadenadas, que nos permitirán expresar todos los coeficientes en función de \mathcal{C} y \mathcal{D} .

Así, la continuidad de $\Phi_E(x)$ y de su derivada en $x = (b + a)/2$ lleva a que

$$\begin{pmatrix} \mathcal{F}_{\text{bar}} \\ \mathcal{G}_{\text{bar}} \end{pmatrix} = \frac{1}{2q} \begin{pmatrix} (q+k)e^{-i(q-k)(b+a)/2} & (q-k)e^{-i(q+k)(b+a)/2} \\ (q-k)e^{+i(q+k)(b+a)/2} & (q+k)e^{+i(q-k)(b+a)/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{C} \\ \mathcal{D} \end{pmatrix}$$

(observe que ésta es la expresión (10.29) pero cambiando $a/2$ por $(b + a)/2$). Intercambiando en la anterior matriz q y k y sustituyendo a por $-a$, las condiciones de continuidad en $x = (b - a)/2$ son

$$\begin{pmatrix} \mathcal{F} \\ \mathcal{G} \end{pmatrix} = \frac{1}{2k} \begin{pmatrix} (k+q)e^{-i(k-q)(b-a)/2} & (k-q)e^{-i(k+q)(b-a)/2} \\ (k-q)e^{+i(k+q)(b-a)/2} & (k+q)e^{+i(k-q)(b-a)/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{F}_{\text{bar}} \\ \mathcal{G}_{\text{bar}} \end{pmatrix}.$$

Procediendo de manera análoga tenemos que las condiciones de continuidad en $x = -(b - a)/2$ y $x = -(b + a)/2$ son, respectivamente,

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A}_{\text{bar}} \\ \mathcal{B}_{\text{bar}} \end{pmatrix} = \frac{1}{2q} \begin{pmatrix} (q+k)e^{+i(q-k)(b-a)/2} & (q-k)e^{+i(q+k)(b-a)/2} \\ (q-k)e^{-i(q+k)(b-a)/2} & (q+k)e^{-i(q-k)(b-a)/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{F} \\ \mathcal{G} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} \\ \mathcal{B} \end{pmatrix} = \frac{1}{2k} \begin{pmatrix} (k+q)e^{-i(k-q)(b+a)/2} & (k-q)e^{+i(k+q)(b+a)/2} \\ (k-q)e^{-i(k+q)(b+a)/2} & (k+q)e^{-i(k-q)(b+a)/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{A}_{\text{bar}} \\ \mathcal{B}_{\text{bar}} \end{pmatrix}.$$

Nuestro interés principal va a ser el comportamiento de la función de onda en las regiones exteriores a las barreras. Si combinamos las cuatro ecuaciones anteriores dos a dos, y tras una serie de cálculos algebraicos tediosos, llegamos a que

$$\begin{pmatrix} \mathcal{F} \\ \mathcal{G} \end{pmatrix} = \mathbb{T}_{\text{II}} \begin{pmatrix} \mathcal{C} \\ \mathcal{D} \end{pmatrix} \quad \text{con } \mathbb{T}_{\text{II}} = \begin{pmatrix} \alpha_E e^{+ika} & i\beta_E e^{-ikb} \\ -i\beta_E e^{+ikb} & \alpha_E^* e^{-ika} \end{pmatrix} \quad (10.44)$$

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} \\ \mathcal{B} \end{pmatrix} = \mathbb{T}_{\text{I}} \begin{pmatrix} \mathcal{F} \\ \mathcal{G} \end{pmatrix} \quad \text{con } \mathbb{T}_{\text{I}} = \begin{pmatrix} \alpha_E e^{+ika} & i\beta_E e^{+ikb} \\ -i\beta_E e^{-ikb} & \alpha_E^* e^{-ika} \end{pmatrix} \quad (10.45)$$

donde hemos introducido las funciones

$$\beta_E = \begin{cases} \frac{k^2 + |q|^2}{2k|q|} \sinh(|q|a) & \text{si } E \leq V_0 \\ \frac{k^2 - q^2}{2kq} \sin(qa) & \text{si } E \geq V_0 \end{cases} \quad \text{con} \quad \begin{cases} k = \frac{\sqrt{2ME}}{\hbar} \\ q = \frac{\sqrt{2M(E - V_0)}}{\hbar} \end{cases} \quad (10.46)$$

$$\alpha_E = \sqrt{1 + \beta_E^2} e^{i\gamma_\alpha} = \begin{cases} \cosh(|q|a) - i \frac{k^2 - |q|^2}{2k|q|} \sinh(|q|a) & \text{si } E \leq V_0 \\ \cos(qa) - i \frac{k^2 + q^2}{2kq} \sin(qa) & \text{si } E \geq V_0 \end{cases}$$

En una barrera cualquiera, las matrices \mathbb{T} reciben el nombre de **matrices de transmisión**, y sus cuatro elementos toman valores que dependen de la anchura y altura de la barrera. En este caso, \mathbb{T}_I y \mathbb{T}_{II} corresponden a barreras de anchura a y centradas en $-b$ y $+b$, respectivamente. De esta forma, las duplas $(\mathcal{A}, \mathcal{B})$ y $(\mathcal{C}, \mathcal{D})$ están relacionadas entre sí mediante la igualdad

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} \\ \mathcal{B} \end{pmatrix} = \mathbb{T}_I \begin{pmatrix} \mathcal{F} \\ \mathcal{G} \end{pmatrix} = \mathbb{T}_I \mathbb{T}_{II} \begin{pmatrix} \mathcal{C} \\ \mathcal{D} \end{pmatrix} \equiv \mathbb{T}_{tot} \begin{pmatrix} \mathcal{C} \\ \mathcal{D} \end{pmatrix} \quad (10.47)$$

siendo \mathbb{T}_{tot} la matriz \mathbb{T} del sistema formado por las dos barreras y dada por

$$\mathbb{T}_{tot} = \begin{pmatrix} a_E & r_E^* \\ r_E & a_E^* \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad \begin{cases} a_E = \alpha_E^2 e^{2ika} + \beta_E^2 e^{2ikb} \\ r_E = -i\beta_E (\alpha_E e^{-ik(b-a)} + \alpha_E^* e^{ik(b-a)}) \end{cases} \quad (10.48)$$

El conocimiento de \mathbb{T}_{tot} nos permite evaluar directamente el coeficiente de transmisión mediante la igualdad $\mathcal{T}(E) = 1/|a_E|^2$ (los momentos lineales de la partícula incidente y transmitida son iguales). A partir de (10.48) y (10.46) tenemos tras operar que

$$\mathcal{T}(E) = \frac{1}{1 + 4\beta_E^2(1 + \beta_E^2) \cos^2(kL - \gamma_\alpha)} \quad \text{con} \quad \gamma_a = \arg(\alpha_E) \quad (10.49)$$

(recuerde que $L = b - a$ es la anchura del pozo limitado por las dos barreras).

§ 2. Procedamos ahora al cálculo de las autofunciones (no normalizables) del sistema. Como sabemos, cualquier autofunción $\Phi_E(x)$ puede escribirse como combinación lineal de las autofunciones $\Phi_{E,\rightarrow}(x)$ y $\Phi_{E,\leftarrow}(x)$. Sin embargo, siendo éstas una elección lógica si queremos estudiar fenómenos de dispersión de partículas, tienen el problema de que en general no son ortogonales entre sí. Como en nuestro caso la energía potencial es par

y cada autoenergía es doblemente degenerada, existen dos autofunciones *reales*, $\Phi_{E,g}(x)$ y $\Phi_{E,u}(x)$, que son respectivamente par e impar y, por tanto, ortogonales entre sí.²

Si partimos de la expresión (10.43), la forma más general de una autofunción real y par de la energía es

$$\Phi_{E,g}(x) = \begin{cases} \mathcal{A}e^{+ikx} + \mathcal{A}^*e^{-ikx} & \text{si } x \leq -(b+a)/2 \\ \mathcal{A}_{\text{bar}}e^{iqx} + \mathcal{B}_{\text{bar}}e^{-iqx} & \text{si } -(b+a)/2 \leq x \leq -(b-a)/2 \\ \mathcal{F}e^{+ikx} + \mathcal{F}e^{-ikx} & \text{si } -(b-a)/2 \leq x \leq +(b-a)/2 \\ \mathcal{B}_{\text{bar}}e^{+iqx} + \mathcal{A}_{\text{bar}}e^{-iqx} & \text{si } +(b-a)/2 \leq x \leq +(b+a)/2 \\ \mathcal{A}^*e^{+ikx} + \mathcal{A}e^{-ikx} & \text{si } x \geq +(b+a)/2 \end{cases} \quad (10.50)$$

donde \mathcal{F} es real y, sin pérdida de generalidad, positivo. Como $\Phi_{E,g}(x)$ es real, si $E > V_0$ entonces q es real y $\mathcal{A}_{\text{bar}}^* = \mathcal{B}_{\text{bar}}$, mientras que si $0 < E < V_0$ entonces q es imaginario puro y \mathcal{A}_{bar} y \mathcal{B}_{bar} han de ser reales. En cualquiera de los dos casos, la matriz \mathbb{T}_I relaciona las duplas $(\mathcal{F}, \mathcal{F})$ y $(\mathcal{A}, \mathcal{A}^*)$ a través de

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} \\ \mathcal{A}^* \end{pmatrix} = \mathbb{T}_I \begin{pmatrix} \mathcal{F} \\ \mathcal{F} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_E e^{ika} & i\beta_E e^{+ikb} \\ -i\beta_E e^{-ikb} & \alpha_E^* e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{F} \\ \mathcal{F} \end{pmatrix},$$

mientras que \mathcal{A}_{bar} y \mathcal{B}_{bar} se pueden obtener a partir de \mathcal{F} imponiendo la continuidad de la función de onda y de su derivada en $x = (b-a)/2$. Si δ_g es el argumento de \mathcal{A} , la relación anterior entre \mathcal{A} y \mathcal{F} puede escribirse como

$$\mathcal{A} = |\mathcal{A}| e^{i\delta_g} = (\alpha_E e^{ika} + i\beta_E e^{+ikb}) \mathcal{F}$$

y como $\mathcal{F} = |\mathcal{F}|$,

$$F_g \equiv \frac{\mathcal{F}}{|\mathcal{A}|} = \frac{1}{|\alpha_E e^{ika} + i\beta_E e^{+ikb}|} ; \quad \delta_g = \arg(\alpha_E e^{ika} + i\beta_E e^{+ikb}) \quad (10.51)$$

Entonces, reagrupando factores, $\Phi_{E,g}(x)$ es igual a

$$\Phi_{E,g}(x) = \mathcal{S} \times \begin{cases} \cos(kx + \delta_g) & \text{si } x \leq -\frac{b+a}{2} \\ A_{\text{bar}}e^{iqx} + B_{\text{bar}}e^{-iqx} & \text{si } -\frac{b+a}{2} \leq x \leq -\frac{b-a}{2} \\ F_g \cos(kx) & \text{si } -\frac{b-a}{2} \leq x \leq +\frac{b-a}{2} \\ B_{\text{bar}}e^{+iqx} + A_{\text{bar}}e^{-iqx} & \text{si } +\frac{b-a}{2} \leq x \leq +\frac{b+a}{2} \\ \cos(kx - \delta_g) & \text{si } x \geq +\frac{b+a}{2} \end{cases} \quad (10.52)$$

² Los subíndices g y u proceden de las palabras alemanas *gerade* y *ungerade* (par e impar)

donde $\mathcal{S} = 2|\mathcal{A}|$ juega el papel de una constante de regularización, $A_{\text{bar}} = \mathcal{A}_{\text{bar}}/\mathcal{S}$ y $B_{\text{bar}} = \mathcal{B}_{\text{bar}}/\mathcal{S}$. Procediendo de similar manera, la autofunción impar $\Phi_{E,u}(x)$ está dada por

$$\Phi_{E,u}(x) = \mathcal{S} \times \begin{cases} \sin(kx + \delta_u) & \text{si } x \leq -\frac{b+a}{2} \\ A_{\text{bar}}e^{+iqx} + B_{\text{bar}}e^{-iqx} & \text{si } -\frac{b+a}{2} \leq x \leq -\frac{b-a}{2} \\ F_u \sin(kx) & \text{si } -\frac{b-a}{2} \leq x \leq +\frac{b-a}{2} \\ -B_{\text{bar}}e^{+iqx} - A_{\text{bar}}e^{-iqx} & \text{si } +\frac{b-a}{2} \leq x \leq +\frac{b+a}{2} \\ \sin(kx - \delta_u) & \text{si } x \geq +\frac{b+a}{2} \end{cases} \quad (10.53)$$

donde ahora

$$F_u = \frac{1}{|\alpha_E e^{+ika} - i\beta_E e^{+ikb}|} ; \quad \delta_u = \arg(\alpha_E e^{+ika} - i\beta_E e^{+ikb}) \quad (10.54)$$

Finalmente, puede probarse que si

$$\mathcal{S} = \left(\frac{M}{2\pi^2 \hbar^2 E} \right)^{1/4}$$

las funciones de onda cumplen la relación de ortogonalidad

$$\langle \Phi_{E_1,g} | \Phi_{E_2,g} \rangle = \langle \Phi_{E_1,u} | \Phi_{E_2,u} \rangle = \delta(E_1 - E_2).$$

§ 3. Las funciones reales y positivas F_g y F_u van a ser muy importantes en el análisis que vamos a realizar a continuación. Para facilitar el mismo conviene reescribirlas usando (10.46), y se llega a

$$|F_g(E)|^2 = F_g^2(E) = \frac{1}{1 + 2\beta_E^2 - 2\beta_E(1 + \beta_E^2)^{1/2} \sin(kL - \gamma_\alpha)}$$

$$|F_u(E)|^2 = F_u^2(E) = \frac{1}{1 + 2\beta_E^2 + 2\beta_E(1 + \beta_E^2)^{1/2} \sin(kL - \gamma_\alpha)},$$

(10.55)

donde hemos señalado explícitamente que F_g^2 y F_u^2 dependen de la autoenergía E . A la vista de las expresiones (10.52) y (10.53), $|F_g(E)|^2$ y $|F_u(E)|^2$ son una medida de la “concentración” de $|\Phi_{E,g}(x)|^2$ y $|\Phi_{E,u}(x)|^2$ en la región limitada por las dos barreras. Además, a partir de (10.49) y de (10.55), es fácil comprobar que el coeficiente de transmisión $\mathcal{T}(E)$ depende de estas funciones a través de las igualdades

$$\mathcal{T}(E) = \frac{|F_g(E)|^2 + |F_u(E)|^2}{2 + 4\beta_E^2} = |F_g(E)|^2 |F_u(E)|^2 \quad (10.56)$$

En consecuencia, ya que $\mathcal{T}(E) \leq 1$, tenemos que si $|F_g(E)|^2$ es muy grande entonces $|F_u(E)|^2$ es muy pequeño y viceversa. Supongamos ahora que para una cierta energía E_{res} una de las dos funciones $|F_g(E)|^2$ ó $|F_u(E)|^2$ toma un valor mucho mayor que uno. Si, por ejemplo, $|F_g(E_{\text{res}})|^2 \gg 1$ entonces la función de onda $\Phi_{E_{\text{res}},g}(x)$ “parece” estar concentrada en la región entre las dos barreras, aunque debido a su comportamiento oscilante para $|x| > (b+a)/2$ tal función no es normalizable. Por tanto, si sustituimos el comportamiento asintótico $\cos(kx \pm \delta_g)$ de $\Phi_{E_{\text{res}},g}(x)$ por una función par de corto alcance $\xi(x)$ y multiplicamos por una constante adecuada \mathcal{N} , obtendremos una función de onda *normalizada* dada por

$$\Psi_{\text{res}}(x) = \mathcal{N} \times \begin{cases} \Phi_{E_{\text{res}},g}(x) & \text{si } |x| \leq (b+a)/2 \\ \xi(x) & \text{si } |x| \geq (b+a)/2 \end{cases}$$

en la que los valores de $\xi(x)$ van a ser prácticamente cero comparados con los que toma $\Psi_{\text{res}}(x)$ en la región entre las dos barreras. En consecuencia, $\Psi_{\text{res}}(x)$ es la función de onda correspondiente a un estado realizable de la partícula cuya forma, salvo constante multiplicativa, es muy similar a la de la autofunción no normalizable $\Phi_{E_{\text{res}},g}(x)$. Por tanto, $\Psi_{\text{res}}(x)$ es la función de onda de un estado cuasiestacionario, con energía media E_{res} , en un cierto instante de tiempo que por convenio tomaremos como $t = 0$. Otra forma de verlo es percibirse de que, por construcción, $\Psi_{\text{res}}(x)$ satisface estrictamente la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con autoenergía E_{res} en la región $|x| < (b+a)/2$, pero como toma valores muy pequeños fuera de tal región tenemos que $\Psi_{\text{res}}(x)$ es “casi” una autofunción de la energía.

A este tipo de estados cuasiestacionarios, en los que la función de onda inicial está concentrada en una región muy limitada del espacio, se les denomina **resonancias**. En lenguaje figurado, una resonancia es un estado cuasiestacionario y “cuasiligado”. A su vez, si ΔH es la incertidumbre de la resonancia $\Psi_{\text{res}}(x)$, su tiempo propio de evolución $\tau_{\text{res}} \simeq \hbar/(2\Delta H)$ puede interpretarse como el tiempo que ha de transcurrir hasta que la función de onda del estado cuasiestacionario cambie apreciablemente. En el presente caso, tal cambio consistirá en que $\Psi_{\text{res}}(x, \tau_{\text{res}})$ deje de estar concentrada en la región entre las barreras, por lo que τ_{res} es una estimación del tiempo que ha de transcurrir hasta que la partícula empiece a escapar hacia $\pm\infty$. Por ello diremos que τ_{res} es *la vida media de la resonancia*.

Como el conjunto de autofunciones $\{\Phi_{E,g}(x), \Phi_{E,u}(x)\}$ son una base de representación de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, la función de onda $\Psi_{\text{res}}(x)$ puede expresarse como una combinación lineal (continua a través de una integral) de las autofunciones $\Phi_{E,g}(x)$ si $\Psi_{\text{res}}(x)$ es par o de las $\Phi_{E,u}(x)$ si $\Psi_{\text{res}}(x)$ es impar. Sin embargo, como $\Psi_{\text{res}}(x)$ es cuasiestacionario, el rango de las autoenergías de las funciones que entran en tal combinación lineal está limitado a un intervalo muy pequeño centrado en E_{res} . Por otra parte, los módulos al cuadrado de los coeficientes de la combinación lineal son $|\langle \Phi_{E,g} | \Psi_{\text{res}} \rangle|^2$ ó $|\langle \Phi_{E,u} | \Psi_{\text{res}} \rangle|^2$ que, aproximadamente, son proporcionales a $|F_g(E)|^2$ o a $|F_u(E)|^2$ ya que $\Psi_{\text{res}}(x)$ está concentrada en la zona central del sistema. Por ello, $\Psi_{\text{res}}(x)$ será igual a una combinación lineal de aquellas autofunciones cuyas autoenergías estén cercanas a E_{res} y para las que $|F_g(E)|^2 \gg 1$ ó $|F_u(E)|^2 \gg 1$. Como consecuencia de todo

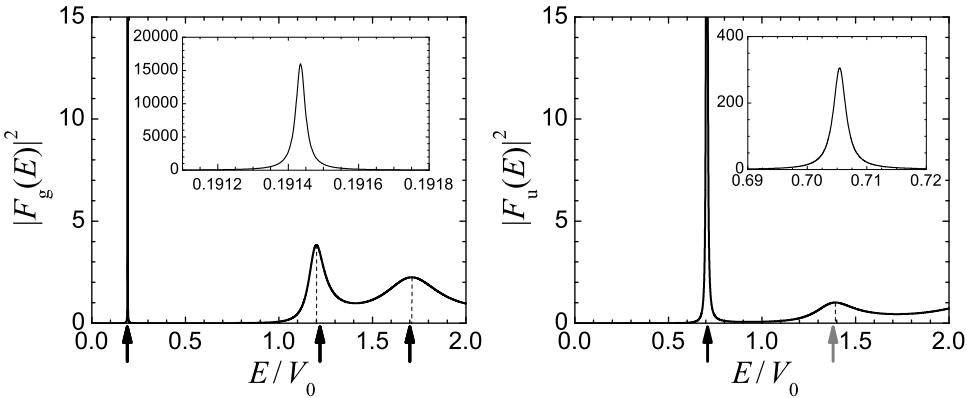


Figura 10-13. Funciones $|F_g(E)|^2$ y $|F_u(E)|^2$ para un electrón sometido a un potencial de dos barreras ($V_0 = 1$ eV, $a = 1$ nm y $b = 2$ nm). Los picos de resonancia correspondientes a energías de los estados ligados del pozo de potencial limitado por las dos barreras se muestran con más detalle dentro de cada gráfica

esto, la existencia de una resonancia con energía media E_{res} se traduce en la aparición en alguna de las funciones $|F_g(E)|^2$ ó $|F_u(E)|^2$ de un pico bien definido y centrado en E_{res} , llamado “pico de resonancia”. Además, si Γ_{res} es la anchura en energías del pico de resonancia, la incertidumbre ΔH de la energía de la resonancia será del orden de $\Gamma_{\text{res}}/2$ y, por tanto, su vida media será $\tau_{\text{res}} \simeq \hbar/\Gamma_{\text{res}}$.

En el sistema que estamos estudiando, el origen físico de una resonancia es fácil de entender si $E_{\text{res}} \in (0, V_0)$. Para ello pensemos en una partícula cuya función de onda *normalizada* en $t = 0$ es igual a la n -ésima autofunción $\Phi_n(x)$ ($n = 0, 1, \dots$) de un pozo cuadrado finito de anchura $L = b - a$ y profundidad V_0 centrado en el origen. Naturalmente, $\Phi_n(x)$ no es una autofunción estricta del hamiltoniano del sistema con dos barreras ya que no satisface la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en la región exterior a las mismas, $|x| > (a+b)/2$. Sin embargo, si el espesor a de las barreras es suficientemente grande entonces $\Phi_n(x)$ será prácticamente cero si $|x| > (a+b)/2$ y, por tanto, corresponderá a un estado de resonancia con energía $E_{\text{res}} = E_n$. **Las resonancias en el rango de energías $(0, V_0)$ corresponden así a los estados estacionarios del pozo finito limitado por las dos barreras**, que dejan de ser estacionarios porque la partícula puede atravesar las barreras por efecto túnel. En principio pueden existir resonancias con energía $E_{\text{res}} > V_0$, aunque sus vidas medias serán pequeñas comparadas con las correspondientes a estados estacionarios del pozo finito. En estas resonancias, las interferencias entre las ondas difractadas en cada punto de discontinuidad del potencial evitan durante un cierto tiempo (la vida media τ_{res}) que la función de onda de la partícula se propague hasta $\pm\infty$.

§ 4. Como ilustración, en la **FIG. 10-13** representamos las funciones $|F_g(E)|^2$ y $|F_u(E)|^2$ en el rango $0 < E < 2V_0$ para un electrón sometido a la acción de una

doble barrera de potencial en la que $V_0 = 1$ eV, $a = 1$ nm y $b = 2$ nm. Podemos observar que si $0 < E < V_0$, estas funciones son prácticamente cero *excepto* en picos de resonancia muy bien definidos y localizados alrededor de las energías $E_0 \simeq 0,19$ eV y $E_1 \simeq 0,71$ eV, respectivamente. Estas energías son, como hemos anticipado, las de los dos estados estacionarios ligados de un electrón en el seno de un pozo cuadrado finito de anchura $L = b - a = 1$ nm y profundidad $V_0 = 1$ eV. Las anchuras de estos dos picos de resonancia son $\Gamma_0 \simeq 3 \times 10^{-5}$ eV y $\Gamma_1 \simeq 2,5 \times 10^{-3}$ eV (hemos considerado que su anchura es la correspondiente a media altura), por lo que las vidas medias de las resonancias son $\tau_0 \simeq 2,2 \times 10^{-11}$ s y $\tau_1 \simeq 2,6 \times 10^{-13}$ s. Para energías $E \geq V_0$, la función $|F_g(E)|^2$ tiene un segundo pico de resonancia, aunque mucho más difuso, centrado en $E \simeq 1,2$ eV y con una anchura $\Gamma \simeq 0,1$ eV que corresponde a una vida media de $6,6 \times 10^{-15}$ s. Finalmente, las funciones $|F_g(E)|^2$ y $|F_u(E)|^2$ tienen máximos locales adicionales en $E \simeq 1,7$ eV y $E \simeq 1,4$ eV, respectivamente, pero muy poco definidos.

El coeficiente de transmisión (10.49) de este sistema físico está representado en la **FIG. 10-14**. Para el sistema de dos barreras, $\mathcal{T}(E)$ es prácticamente cero en la región $0 < E < V_0$ excepto en regiones muy localizadas alrededor de las energías de resonancia $E_0 \simeq 0,19$ eV y $E_1 \simeq 0,71$ eV, donde $\mathcal{T}(E) = 1$. Este hecho sorprendente (el coeficiente de transmisión es uno para ciertas energías de incidencia menores que la altura de las barreras de potencial) se denomina *transmisión resonante*, y tiene una importancia capital en nanoelectrónica. Para energías $E > V_0$, $\mathcal{T}(E)$ oscila muy apreciablemente y es igual a uno para las energías $E \simeq 1,22$ eV, $E \simeq 1,38$ eV, $E \simeq 1,70$ eV que, igualmente, son aquellas para las que existen resonancias (aunque tal y como indicamos en el párrafo anterior, las resonancias para las dos últimas energías apenas están definidas). Por el contrario, el coeficiente de transmisión para una única barrera de anchura a y altura V_0 es completamente distinto, creciendo monótonamente hasta que $E \simeq 1,38$ eV, donde toma el valor 1 por efecto Ramsauer.

Recordemos que el efecto Ramsauer es debido a la interferencia destructiva entre las ondas reflejadas en cada lado de una barrera de potencial, por lo que al no existir onda reflejada neta el coeficiente de transmisión es la unidad. En el presente caso (dos barreras) tenemos cuatro discontinuidades en el potencial, por lo que para una energía de incidencia $E > V_0$ hay cuatro ondas reflejadas, mientras que si $E < V_0$ hay únicamente dos, una por cada barrera. En cualquier caso, las ondas reflejadas pueden interferir destructivamente en la región de incidencia para ciertas energías que, como hemos señalado, son las de resonancia. Que el coeficiente de transmisión alcance su máximo valor, $\mathcal{T}(E) = 1$, para las energías de resonancia es fácil de comprender si tenemos en cuenta la relación (10.56) entre $\mathcal{T}(E)$ y las funciones $|F_g(E)|^2$ y $|F_u(E)|^2$.

§ 5. Detallaremos algo más el fenómeno de la transmisión resonante para energías de incidencia $E < V_0$. Partiendo de los resultados del §1, para esas energías

$$\mathcal{T}(E) = \frac{1}{1 + 4\beta_E^2(1 + \beta_E^2) \cos^2(kL - \gamma_\alpha)}, \quad \text{con} \quad \begin{cases} \beta_E = \frac{k^2 + \eta^2}{2k\eta} \sinh(\eta a) \\ \tan \gamma_a = \frac{\eta^2 - k^2}{2k\eta} \tanh(\eta a) \end{cases}$$

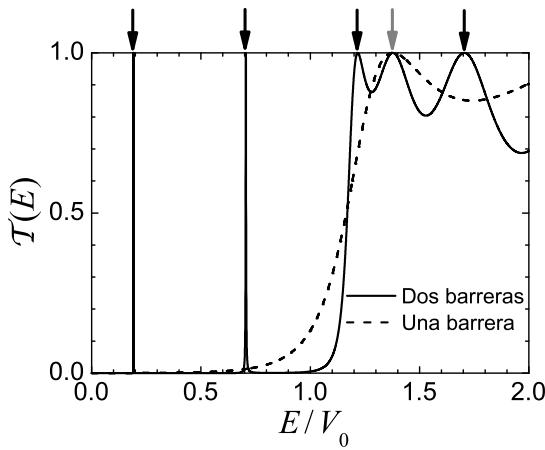


Figura 10-14. Coeficiente de transmisión para un electrón que incide contra una barrera doble (línea continua) comparado con el correspondiente a una única barrera (línea a trazos). Los parámetros son $V_0 = 1$ eV, $a = 1$ nm y $b = 2$ nm. Las flechas señalan las energías para las que $T(E) = 1$

siendo $\eta = |q| = \sqrt{2M(V_0 - E)/\hbar}$ y $k = \sqrt{2ME}/\hbar$. Como $\beta_E > 0$ es estrictamente mayor que cero, el coeficiente de transmisión sería igual a uno si $\cos(kL - \gamma_\alpha) = 0$ o, equivalentemente, si

$$\tan(kL) \tan \gamma_\alpha = -1$$

(hemos usado la expresión del coseno de una resta y reordenado términos). Sustituyendo $\tan \gamma_\alpha$ por su expresión, la condición de transmisión resonante es

$$\boxed{\mathcal{T}(E) = 1 \Leftrightarrow \tan(kL) = \frac{2k\eta}{k^2 - \eta^2} \frac{1}{\tanh(\eta a)} \quad \text{si } 0 < E < V_0.} \quad (10.57)$$

Para barreras suficientemente anchas ($\eta a \gg 1$) el término $\tanh(\eta a)$ en (10.57) es prácticamente la unidad, por lo que en este límite

$$\mathcal{T}(E) = 1 \Leftrightarrow \tan(kL) = \frac{2k\eta}{k^2 - \eta^2} \quad \text{si } 0 < E < V_0 \quad \text{y} \quad \eta a \gg 1. \quad (10.58)$$

Ésta es la ecuación trascendente para las autoenergías de un pozo cuadrado finito de anchura L y profundidad V_0 (cfr. la sección 9.2), por lo que queda confirmado que la transmisión resonante a través de dos barreras anchas se produce para energías de incidencia iguales a las autoenergías del pozo cuadrado finito limitado por las mismas. A su vez, la función β_E va a ser siempre muy grande en el rango $E \in (0, V_0)$. Esto explica por qué el coeficiente de transmisión es cero excepto para energías muy cercanas a la de resonancia. En este caso, y debido a la relación que hay entre $\mathcal{T}(E)$ y las funciones

$|F_g(E)|^2$ y $|F_u(E)|^2$, la dependencia de $\mathcal{T}(E)$ alrededor de una energía de resonancia es la correspondiente a una llamada *Lorentziana* de anchura Γ_{res} :

$$\mathcal{T}(E) \simeq \frac{1}{1 + 4(E - E_{\text{res}})^2/\Gamma_{\text{res}}^2} \quad \text{si } E \sim E_{\text{res}} \text{ y } E_{\text{res}} < V_0. \quad (10.59)$$

Como consecuencia, la información relativa a las resonancias del sistema (y, por tanto, a las autoenergías del pozo cuadrado definido por las barreras) se puede extraer directamente a partir del coeficiente de transmisión.

PROBLEMAS PROPUESTOS

PROBLEMA 10.1. *Reflexión parcial por un escalón de potencial*

Una partícula incide desde $x = -\infty$ con energía E muy bien definida contra el escalón de potencial

$$V(x) = \begin{cases} V_+ & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases} \quad \text{con } V_+ = 1 \text{ eV}$$

Sabemos que hay una probabilidad del 50 % que la partícula rebote contra el escalón de potencial y vuelva a $-\infty$.

- a) ¿Cuál es la energía de la partícula?
- b) Halle y represente la densidad de probabilidad $\rho_{E,\rightarrow}(x)$ de la partícula en su interacción con el escalón de potencial.

PROBLEMA 10.2. *Estados de colisión en un pozo finito*

Una partícula de masa M está sometida a la acción de una fuerza que deriva de una energía potencial tipo “pozo cuadrado finito”

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } |x| < a/2 \\ 0 & \text{si } |x| > a/2 \end{cases} \quad \text{con } V_0 > 0.$$

Si la partícula procede desde $x \ll 0$ con energía $E > 0$, ¿cuál es la probabilidad de que la partícula se transmita a la región $x \gg 0$? ¿Existen energías para las que dicha probabilidad es idénticamente igual a uno?

PROBLEMA 10.3. *Escalón doble de potencial*

La energía potencial de una partícula de masa M en una dimensión es igual al “doble escalón”

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ V_0/2 & \text{si } 0 < x < a \\ V_0 & \text{si } x > a \end{cases} \quad \text{con } V_0 > 0.$$

En el caso de que la partícula proceda desde $x \ll 0$ con energía cinética $E > V_0$, halle y represente en función de E el coeficiente de transmisión. Analice los casos $a \rightarrow 0$ y $a \gg 0$.

PROBLEMA 10.4. *Barrera de potencial tipo delta*

Consideremos una barrera de potencial rectangular centrada en $x = 0$, de altura V_0 y anchura a sobre la que incide desde la izquierda una partícula de masa M y energía $E < V_0$. En el límite $a \rightarrow 0$ y $V_0 = \gamma/a$ con γ constante, la energía potencial tiende a la delta de Dirac $\gamma \delta(x)$.

- a) A partir del resultado (10.34), demuestre que la matriz \mathbb{T} en este límite es

$$\mathbb{T} = \begin{pmatrix} 1 + i\sqrt{\frac{E_0}{E}} & i\sqrt{\frac{E_0}{E}} \\ -i\sqrt{\frac{E_0}{E}} & 1 - i\sqrt{\frac{E_0}{E}} \end{pmatrix}, \text{ con } E_0 = \frac{M\gamma^2}{2\hbar^2}.$$

- b) Obtenga y represente frente a E el coeficiente de transmisión del sistema
 c) Halle las autofunciones $\Phi_{E,\rightarrow}(x)$. ¿Cómo es su comportamiento en $x = 0$?
 d) La energía potencial es par. Ello implica que toda autofunción $\Phi_E(x)$ puede escribirse como combinación lineal de las autofunciones reales $\Phi_{E,g}(x)$ y $\Phi_{E,u}(x)$ (g : par, u : impar). Obtenga estas autofunciones y represéntelas para el caso $E = E_0$.

PROBLEMA 10.5. (*) Reflexión por una fuerza constante

Una partícula de masa M está sometida a una fuerza que deriva de la energía potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ \frac{\hbar^2}{2Ma^3}x & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad \text{con } V_0, k > 0$$

Esto es, su propagación es libre si $x < 0$ pero está sometida a una fuerza constante orientada en el sentido OX^- si $x > 0$. Obtenga y represente la autofunción de la energía $E = \hbar^2/(2Ma^2)$. ¿Cuál es el desfase entre la onda incidente desde $x \ll 0$ y la reflejada hacia $x \ll 0$? **Datos:** $Ai(-1) \simeq 0,536$; $Ai'(-1) \simeq 0,010$.

PROBLEMA 10.6. (!!) La emisión de campo

Pensemos en una muestra metálica que ocupa la región $x < 0$. Si sobre la misma actúa un campo eléctrico uniforme $\mathcal{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}, t) = -\mathcal{E}_0 \mathbf{u}_x$, el electromagnetismo clásico nos dice que se produce una redistribución de carga en la superficie del metal que apantalla a dicho campo en la región $x < 0$. De esta manera, los electrones de conducción del metal están sujetos a una fuerza efectiva que deriva de la energía potencial

$$V(x) = \begin{cases} -(W_0 + E_F) & \text{si } x < 0 \\ -2e\mathcal{E}_0 x & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad \text{con } W_0, E_F > 0,$$

donde $-e$ es la carga del electrón, W_0 es la función de trabajo, E_F es la energía de Fermi y el factor 2 en $V(x > 0)$ es resultado de considerar también el campo eléctrico inducido por $\mathcal{E}_{\text{in}}(\mathbf{r}, t)$. Como sabemos, las energías de los electrones están en el rango $(-W_0 - E_F, -W_0)$, pero debido al efecto túnel los electrones escaparán del metal en un proceso conocido como *emisión de campo*, que tiene múltiples aplicaciones tecnológicas.

- a) Usando la fórmula de Gamow, estime en función de W_0 y \mathcal{E}_0 el valor del coeficiente de transmisión de los electrones menos ligados del metal.

- b) Si $\mathcal{E}_0 = 10^8$ V/m, haga una estimación del número de electrones emitidos desde una muestra metálica cuya superficie S es de 1 cm². Tenga en cuenta el razonamiento que nos llevó a la expresión (10.40) y los órdenes de magnitud allí sugeridos.

PROBLEMA 10.7. (*) Resonancias en un sistema unidimensional

La energía potencial de un electrón que se mueve en una dimensión es

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{si } x < 0 \\ 0 & \text{si } 0 < x < a \\ V_0 & \text{si } a < x < 3a/2 \\ 0 & \text{si } x > 3a/2 \end{cases} \quad \text{con } V_0 = 1 \text{ eV} ; \frac{2m_e a^2 V_0}{\hbar^2} = 50$$

El espectro de energías de este sistema es continuo no degenerado e igual a \mathbb{R}^+ y, salvo constante de regularización, las autofunciones no normalizables $\Phi_E(x)$ cumplen que

$$\Phi_E(x) = \begin{cases} A \sin(kx) & \text{si } 0 \leq x \leq a \\ \cos(kx + \delta) & \text{si } x \geq 3a/2 \end{cases} \quad \text{con } k = \frac{\sqrt{2m_e E}}{\hbar} \quad (10.60)$$

donde la amplitud A y el desfase δ dependen de la autoenergía E .

- a) Justifique la expresión (10.60).
- b) Represente $|A|^2$ frente a E en el rango $E \in (0, V_0)$.
- c) Para aquellos valores de E en los que $|A|^2$ alcanza un máximo tendremos estados resonantes. Compare sus energías con las de los estados estacionarios obtenidos en el **ejemplo 9.c.**

PROBLEMA 10.8. (**) Vida media de una resonancia

En un instante de tiempo dado, una partícula de masa M se encuentra en una región de anchura L situada entre dos barreras de potencial de espesor a y altura V_0 . Supongamos que las barreras son muy anchas ($a \gg 0$). Si la partícula está en un estado resonante con energía $E_{\text{res}} < V_0$, demuestre que su vida media puede estimarse mediante la expresión

$$\tau_{\text{res}} \sim \frac{1}{2} \sqrt{\frac{ML^2}{2E_{\text{res}}}} \exp(2\eta_{\text{res}}a) \quad \text{con } \eta_{\text{res}} = \frac{\sqrt{2M(V_0 - E_{\text{res}})}}{\hbar}.$$

Interprete físicamente este resultado. Juzgue su validez para el caso tratado en el apéndice sobre resonancias.

Ayuda: Si $a \gg 0$, la función β_E definida en la sección 10.5 cumple que

$$\beta_E^2 \simeq \frac{V_0^2 \exp(2\eta_{\text{res}}a)}{16E_{\text{res}}(V_0 - E_{\text{res}})} \sim \frac{1}{2} \exp(2\eta_{\text{res}}a) \gg 1 \quad \text{si } E \sim E_{\text{res}} \quad (10.61)$$

Por otra parte, como la condición de resonancia es $\cos(kL - \gamma_\alpha) = 0$, haciendo un desarrollo de Taylor tenemos que

$$\cos^2(kL - \gamma_\alpha) \simeq (kL - \gamma_\alpha - [k_{\text{res}}L - \gamma_{\text{res}}])^2 \quad \text{si } E \sim E_{\text{res}}$$

donde k_{res} y γ_{res} son los valores de $k = \sqrt{2ME}/\hbar$ y de γ_α si $E = E_{\text{res}}$. En general, kL varía con E más rápidamente que γ_α , por lo que

$$\cos^2(kL - \gamma_\alpha) \sim (k - k_{\text{res}})^2 L^2 = \frac{2ML^2}{\hbar^2} (\sqrt{E} - \sqrt{E_{\text{res}}})^2$$

y desarrollando en serie $\sqrt{E} - \sqrt{E_{\text{res}}}$ alrededor de E_{res} se obtiene que

$$\cos^2(kL - \gamma_\alpha) \sim \frac{ML^2}{2\hbar^2 E_{\text{res}}} (E - E_{\text{res}})^2 \quad \text{si } E \sim E_{\text{res}}. \quad (10.62)$$

Las aproximaciones (10.61) y (10.62) nos permitirán reescribir el coeficiente de transmisión cerca de una resonancia como una función Lorentziana.

TEMA 11

EL OSCILADOR ARMÓNICO

Uno de los sistemas dinámicos más importantes es el oscilador armónico. Ello es debido a que muchos sistemas físicos son *de facto* formalmente equivalentes a un oscilador armónico (o a un conjunto de osciladores armónicos), ya que el primer término no nulo del desarrollo de la energía potencial de un sistema alrededor de su mínimo tiene la forma de un potencial armónico.

En primer lugar hallaremos las autoenergías y autofunciones de una partícula que se mueve en una dimensión bajo una fuerza armónica. A continuación estudiaremos algunas propiedades dinámicas del oscilador cuántico. Conocida la teoría básica, introduciremos los llamados *operadores de creación y destrucción*, de gran importancia en aplicaciones más avanzadas de la teoría, y estudiaremos las propiedades de los llamados *estados coherentes* de un oscilador armónico.

Finalizaremos el capítulo extendiendo los resultados obtenidos a varias dimensiones espaciales.

Orientaciones generales al plan de trabajo

Sugerimos unas **20 horas** de trabajo personal. Un tercio de este trabajo ha de dedicarse al estudio de la teoría y el resto al análisis de los ejemplos resueltos y a la resolución de problemas propuestos.

Objetivos del capítulo

- Conocer perfectamente las propiedades de los estados estacionarios de un oscilador armónico unidimensional.
- Saber resolver problemas dinámicos sencillos en este sistema físico.
- Manejar con soltura los operadores de creación y destrucción.
- Familiarizarse con los estados coherentes y sus propiedades.
- Saber obtener las propiedades de los niveles de energía de un oscilador armónico en varias dimensiones espaciales.

11.1. ESTADOS ESTACIONARIOS DE UN OSCILADOR

§ 1. Imaginemos que una partícula de masa M está sometida a la acción de una fuerza recuperadora $F_x = -K_e x$, donde K_e es la constante elástica de dicha fuerza. Clásicamente, la partícula oscila armónicamente alrededor de la posición de equilibrio $x = 0$ con una frecuencia natural o pulsación $\omega = \sqrt{K_e/M}$; de ahí el nombre de **oscilador armónico unidimensional** que se le da a este sistema físico.

Puesto que la energía potencial del oscilador es

$$V(x) = \frac{1}{2} K_e x^2 = \frac{1}{2} M \omega^2 x^2, \quad (11.1)$$

el operador hamiltoniano correspondiente es

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} = \frac{1}{2M} \hat{p}_x^2 + \frac{1}{2} M \omega^2 \hat{x}^2. \quad (11.2)$$

En la representación en posiciones es igual a

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} M \omega^2 x^2. \quad (11.3)$$

Conviene definir la *longitud natural* del oscilador

$$\alpha \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}} \quad (11.4)$$

lo que nos permite reescribir el hamiltoniano (11.3) como (compruébelo por sustitución directa)

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{du^2} + \frac{1}{2} u^2 \right), \quad \text{con} \quad u \equiv \frac{x}{\alpha}. \quad (11.5)$$

Como consecuencia, $\hbar\omega$ es la escala natural de energías en un oscilador armónico cuántico.

§ 2. Nuestro primer objetivo es la obtención de las autoenergías y las autofunciones de este sistema físico. Debido a la forma de la energía potencial, el espectro de energías resulta ser discreto y no degenerado, por lo que todas las autofunciones serán normalizables y reales (salvo constante multiplicativa irrelevante). Si designamos por $\Phi_n(x)$ a la autofunción con autoenergía E_n

($n = 0, 1, 2, \dots$), dado que la energía potencial $V(x)$ es par tendremos que las autofunciones con n par son pares y aquellas que tienen un valor de n impar, impares. Además, de acuerdo con el teorema de Sturm (véase el epígrafe §9.1.4), la autofunción $\Phi_n(x)$ tendrá n nodos.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una autofunción genérica es

$$\hat{H}\Phi_n(x) = E_n\Phi_n(x) \Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}M\omega^2x^2\right)\Phi_n(x) = E_n\Phi_n(x) \quad (11.6)$$

y si hacemos el cambio de variable $x \rightarrow u = x/\alpha$, nos queda una ecuación de autovalores adimensionalizada,

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{du^2} + \frac{1}{2}u^2\right)\phi_n(u) = \varepsilon_n\phi_n(u) \quad \text{con} \quad \begin{cases} \phi_n(u) = \Phi_n(\alpha u) \\ \varepsilon_n = \frac{1}{\hbar\omega}E_n \end{cases} \quad (11.7)$$

En principio, (11.7) tiene solución para cualquier valor de ε_n . Sin embargo únicamente son válidas aquellas soluciones acotadas (aquellas que cumplen que $\phi_n(u) \rightarrow 0$ si $|u| \rightarrow \infty$) que corresponderán a autofunciones normalizables. Esto únicamente será posible entonces para valores discretos de ε_n .

Obviamente no podemos aplicar las técnicas aprendidas en el **capítulo 9** para resolver este problema. Sin embargo podemos ensayar distintas soluciones basadas en las propiedades de las autofunciones que hemos comentado. En particular, una solución “factible” es

$$\phi_n(u) = \mathfrak{h}_n(u)e^{-\zeta u^2} \quad (11.8)$$

donde ζ es una constante positiva y $\mathfrak{h}_n(u)$ es un polinomio de grado n y con la misma paridad que el número cuántico n . Si sustituimos la expresión (11.8) en (11.7) tenemos que

$$\left(2\zeta - 2\varepsilon_n + (1 - 4\zeta^2)u^2\right)\mathfrak{h}_n(u) + 4\zeta u\mathfrak{h}'_n(u) - \mathfrak{h}''_n(u) = 0.$$

Observe que el término $(1 - 4\zeta^2)u^2\mathfrak{h}_n(u)$ es un polinomio de grado $n + 2$, cuyo comportamiento para valores grandes de u no puede compensarse con los otros términos del primer miembro de la igualdad anterior (ya que esos sumandos tienen grados menores que $n + 2$). Por tanto, para que (11.8) sea una posible solución de la ecuación de autovalores tiene que cumplirse dos condiciones: que $\zeta = 1/2$ y que exista un polinomio de grado n que satisfaga la igualdad

$$(1 - 2\varepsilon_n)\mathfrak{h}_n(u) + 2u\mathfrak{h}'_n(u) - \mathfrak{h}''_n(u) = 0. \quad (11.9)$$

Esta es la llamada *ecuación diferencial de Hermite*.¹ La ecuación es lineal, por lo que basta hallar los polinomios para encontrar cualquier solución de la misma. Para fijar un convenio, consideraremos que el coeficiente del monomio de máximo grado en $\mathfrak{h}_n(u)$ es 2^n .

Si $n = 0$, el polinomio $\mathfrak{h}_0(u)$ es una constante. Eligiendo esa constante igual a la unidad, y sustituyendo en (11.9), $1 - 2\varepsilon_0 = 0$ y $\varepsilon_0 = 1/2$. En consecuencia, $\Phi_0(x) \propto \exp[-x^2/(2\alpha^2)]$ es la función de onda del estado fundamental, cuya autoenergía es $E_0 = \hbar\omega/2$.

Para $n = 1$, $\mathfrak{h}_1(u)$ ha de ser impar y de grado uno, y de acuerdo con nuestro convenio, nos queda que $\mathfrak{h}_1(u) = 2u$. Sustituyendo en (11.9) tenemos que $\varepsilon_1 = 3/2$, por lo que la función de onda del primer estado excitado es $\Phi_1(x) \propto 2(x/\alpha) \exp[-x^2/(2\alpha^2)]$ y su energía es $E_1 = 3\hbar\omega/2$.

Para $n = 2$, $\mathfrak{h}_2(u)$ es par y de grado dos: $\mathfrak{h}_2(u) = 4u^2 + \beta_0$. Desconocemos tanto β_0 como ε_2 , pero sustituyendo de nuevo en la ecuación diferencial de Hermite y operando llegamos a que

$$(-2\beta_0\varepsilon_2 - 8 + \beta_0) + (5 - 2\varepsilon_2)4u^2 = 0.$$

Dado que esta igualdad ha de ser cierta para cualquier valor de la variable u , debe cumplirse que $\varepsilon_2 = 5/2$ y que $\beta_0 = -2$. La autofunción es pues $\Phi_2(x) \propto [4(x/\alpha)^2 - 2] \exp[-x^2/(2\alpha^2)]$, mientras que $E_2 = 5\hbar\omega/2$.

Para los siguientes valores de n el procedimiento es similar. Expresamos primero $\mathfrak{h}_n(u)$ como un polinomio de grado n y sustituimos en (11.9). Tras reordenar los términos, la igualdad nos dará un polinomio de grado n cuyos coeficientes han de ser cero. Esto nos proporciona un conjunto de ecuaciones encadenadas cuyas soluciones serán la autoenergía adimensionalizada ε_n y los coeficientes desconocidos de $\mathfrak{h}_n(u)$.

En particular, el monomio de grado n en el miembro izquierdo de la ecuación (11.9) será

$$(1 - 2\varepsilon_n + 2n)2^n u^n$$

y como ha de ser cero

$$1 - 2\varepsilon_n + 2n = 0 \quad \Rightarrow \quad \varepsilon_n = n + \frac{1}{2}. \tag{11.10}$$

¹ Por ese motivo, los polinomios $\mathfrak{h}_n(u)$ reciben el nombre de polinomios de Hermite.

Esto nos fija las autoenergías del oscilador armónico cuántico,

$$\boxed{E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad \text{con } n = 0, 1, 2, 3, \dots} \quad (11.11)$$

A su vez, los primeros polinomios $\mathfrak{h}_n(u)$ son

$$\begin{aligned} \mathfrak{h}_0(u) &= 1 & \mathfrak{h}_1(u) &= 2u \\ \mathfrak{h}_2(u) &= -2 + 4u^2 & \mathfrak{h}_3(u) &= -12u + 8u^3 \\ \mathfrak{h}_4(u) &= 12 - 48u^2 + 16u^4 & \mathfrak{h}_5(u) &= 120u - 160u^3 + 32u^5 \\ \mathfrak{h}_6(u) &= -120 + 720u^2 - 480u^4 + 64u^6 \end{aligned} \quad (11.12)$$

que como ya hemos dicho son los *polinomios de Hermite*, que vimos en la **sección 4.3**. Como consecuencia, la n -ésima autofunción de la energía del oscilador es

$$\boxed{\Phi_n(x) = \mathcal{C}_n \mathfrak{h}_n\left(\frac{x}{\alpha}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2\alpha^2}\right) \quad \text{con } \alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}} \quad (11.12)$$

siendo \mathcal{C}_n una constante de normalización. Puede probarse que $\|\Phi_n\| = 1$ si

$$\mathcal{C}_n = \frac{1}{(2^n n! \sqrt{\pi} \alpha)^{1/2}}. \quad (11.13)$$

Las funciones de onda de los primeros estados estacionarios están representadas en la **FIG. 11-1**.

Como $\Phi_n(x)$ son autofunciones normalizadas de un operador autoadjunto con autovalores E_n distintos entre sí, sabemos que constituyen una base ortonormal de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Ésta es la *base de Hermite*, que ya también introdujimos en la **sección 4.3**. A su vez, puede demostrarse que los polinomios de Hermite cumplen las igualdades

$$\begin{aligned} \mathfrak{h}_n(u) &= (-1)^n \exp(u^2) \frac{d^n \exp(-u^2)}{du^n} \\ \mathfrak{h}_n(u) &= 2u \mathfrak{h}_{n-1}(u) - 2(n-1) \mathfrak{h}_{n-2}(u) \quad \text{si } n \geq 2 \\ \mathfrak{h}'_n(u) &= 2n \mathfrak{h}_{n-1}(u) \quad \text{si } n \geq 1. \end{aligned} \quad (11.14)$$

En particular, la segunda de ellas nos permite hallar directamente $\mathfrak{h}_n(u)$ en términos de los polinomios de Hermite de grados $n-1$ y $n-2$.

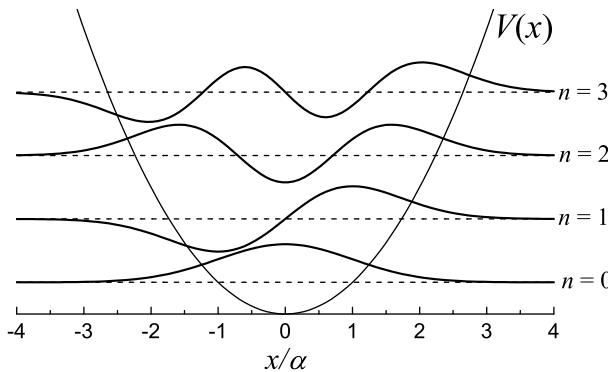


Figura 11-1. Perfiles de las primeras cuatro autofunciones de un oscilador armónico cuántico. Las autofunciones están desplazadas verticalmente para facilitar su visión

EJEMPLO 11.a. Representación matricial del operador posición

Consideremos un oscilador armónico de pulsación ω y longitud natural α . Obtenga la representación matricial del operador posición \hat{x} en la base de autofunciones de la energía.

Solución:

Recordemos que el elemento en la s -ésima fila y en la n -ésima columna de la matriz \mathbb{A} correspondiente a un operador genérico \hat{A} en una base ortonormal $\{|\Phi_n\rangle\}$ es²

$$\mathbb{A}_{s,n} = \langle \Phi_s | \hat{A} | \Phi_n \rangle \equiv \langle \Phi_s | \hat{A} | \Phi_n \rangle.$$

En este ejemplo necesitamos evaluar la actuación del operador \hat{x} sobre el n -ésimo autoestado de la energía $|\Phi_n\rangle$, que en la representación en posiciones es

$$\hat{x}\Phi_n(x) = x\Phi_n(x).$$

Para ello partamos de la segunda relación de (11.14). Si sustituimos u por x/α y tenemos en cuenta que

$$\mathfrak{h}_n\left(\frac{x}{\alpha}\right) = \frac{1}{\mathcal{C}_n} \Phi_n(x) \exp\left(\frac{x^2}{2\alpha^2}\right) = (2^n n! \sqrt{\pi\alpha})^{1/2} \Phi_n(x) \exp\left(\frac{x^2}{2\alpha^2}\right)$$

llegamos a que

$$\sqrt{2^n n!} \Phi_n(x) = 2\sqrt{2^{n-1}(n-1)!} \frac{x}{\alpha} \Phi_{n-1}(x) - 2(n-1) \sqrt{2^{n-2}(n-2)!} \Phi_{n-2}(x).$$

² En la notación de Dirac se usa con más frecuencia $\langle \Phi_s | \hat{A} | \Phi_n \rangle$, ya que muestra más claramente que $\mathbb{A}_{s,n}$ es el resultado de la actuación del bra $\langle \Phi_s |$ sobre el vector de estado $\hat{A} | \Phi_n \rangle$.

Simplificando y reordenando,

$$x\Phi_{n-1}(x) = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} (\sqrt{n} \Phi_n(x) + \sqrt{n-1} \Phi_{n-2}(x)).$$

Si ahora sumamos uno al índice n y volvemos a la notación de Dirac

$$\hat{x}|\Phi_n\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} (\sqrt{n+1} |\Phi_{n+1}\rangle + \sqrt{n} |\Phi_{n-1}\rangle) \quad (11.15)$$

y, en consecuencia,

$$\mathbb{X}_{s,n} = \langle \Phi_s | \hat{x} \Phi_n \rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} (\sqrt{n+1} \langle \Phi_s | \Phi_{n+1} \rangle + \sqrt{n} \langle \Phi_s | \Phi_{n-1} \rangle).$$

Como los estados $|\Phi_n\rangle$ son ortonormales, queda en definitiva que

$$\mathbb{X}_{s,n} = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} (\sqrt{n+1} \delta_{s,n+1} + \sqrt{n} \delta_{s,n-1}) = \begin{cases} 0 & \text{si } |s-n| \neq 1 \\ \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \sqrt{\max(s,n)} & \text{si } |s-n| = 1 \end{cases} \quad (11.16)$$

donde $\max(s,n)$ es el máximo valor del par de números cuánticos (s,n) . Observe que el operador \hat{x} “conecta” únicamente autoestados del oscilador armónico con números cuánticos consecutivos.

Una vez que se han obtenido los elementos de matriz de \hat{x} en la base de estados estacionarios del oscilador armónico, la matriz representativa de este operador es:

$$\mathbb{X} = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (11.17)$$

§ 3. Una propiedad muy interesante del oscilador armónico es que su tratamiento en la representación en momentos es prácticamente idéntico al de la representación en posiciones. En efecto, como los operadores \hat{x} y \hat{p}_x en la representación en momentos son

$$\hat{p}_x \rightarrow p_x \quad ; \quad \hat{x} \rightarrow +i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}$$

tenemos que el hamiltoniano del oscilador es

$$\hat{H} = \hat{V} + \hat{K} = -\frac{M\omega^2\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial p_x^2} + \frac{1}{2M} p_x^2 = \hbar\omega \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\kappa^2} + \frac{1}{2} \kappa^2 \right) \quad (11.18)$$

donde ahora κ es el momento lineal adimensionalizado

$$\kappa = \frac{\alpha}{\hbar} p_x \quad (11.19)$$

De esta manera, las autofunciones $\tilde{\Phi}_n(p_x)$ serán, salvo constante multiplicativa, idénticas a las autofunciones $\Phi_n(x)$, cambiando x por p_x y α por \hbar/α . Esto es,

$$\boxed{\tilde{\Phi}_n(p_x) = \mathcal{C}_n \hbar_n \left(\frac{\alpha p_x}{\hbar} \right) \exp \left(-\frac{\alpha^2 p_x^2}{2\hbar^2} \right) \quad \text{con } \alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}} \quad (11.20)$$

estando dada la constante de normalización \mathcal{C}_n por

$$\mathcal{C}_n = (-i)^n \left(\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi \hbar}} \right)^{1/2}. \quad (11.21)$$

donde el factor $(-i)^n$ se ha incluido para garantizar que $\tilde{\Phi}_n(p_x)$ sea estrictamente la transformada de Fourier de $\Phi_n(x)$:³

$$\tilde{\Phi}_n(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_n(x) e^{-ip_x x/\hbar} dx. \quad (11.22)$$

Trabajando en esta representación en momentos, y siguiendo un procedimiento prácticamente idéntico al desarrollado en el ejemplo anterior, es relativamente fácil ver que la matriz del operador de momento lineal en la base de estados estacionarios del operador es

$$\mathbb{P}_x = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}\alpha} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (11.23)$$

Esta matriz, naturalmente, es hermítica.

§ 4. Supongamos que el oscilador armónico se encuentra en su n -ésimo estado estacionario $|\Phi_n\rangle$.

- El valor medio de su posición es

$$\langle x \rangle_{|\Phi_n\rangle} = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Phi_n(x)|^2 dx = 0 \quad (11.24)$$

³ Esta es una propiedad general de las funciones de Hermite.

puesto que $|\Phi_n(x)|^2 = \Phi_n^2(x)$ es una función par.

Análogamente, el valor medio de su momento lineal será

$$\langle p_x \rangle_{|\Phi_n\rangle} = 0, \quad (11.25)$$

como corresponde a un estado estacionario ligado. Estos resultados son consistentes con el valor nulo de los elementos de las diagonales principales de (11.17) y (11.23).

- A su vez, el oscilador armónico verifica el llamado **teorema del virial**:

$$\langle K \rangle_{|\Phi_n\rangle} = \langle V \rangle_{|\Phi_n\rangle} = \frac{1}{2} E_n \quad (11.26)$$

es decir, *en un estado estacionario de un oscilador armónico los valores medios de las energías cinética y potencial coinciden*. Hay muchas maneras de probar este teorema, siendo una de ellas la siguiente. Si calculamos explícitamente el valor medio de la energía potencial en la representación en posiciones, tenemos que

$$\langle V \rangle_{|\Phi_n\rangle} = \frac{M\omega^2}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\Phi_n(x)|^2 dx = \frac{M\omega^2}{2} \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi} \alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \mathfrak{h}_n^2 \left(\frac{x}{\alpha} \right) e^{-x^2/\alpha^2} dx.$$

Si hacemos el cambio de variable $x \rightarrow u = x/\alpha$,

$$\langle V \rangle_{|\Phi_n\rangle} = \frac{M\omega^2 \alpha^2}{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 \mathfrak{h}_n^2(u) e^{-u^2} du = \frac{\hbar\omega}{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 \mathfrak{h}_n^2(u) e^{-u^2} du.$$

Por otro lado, si evaluamos el valor medio de la energía cinética pero en la representación en momentos,

$$\langle K \rangle_{|\Phi_n\rangle} = \frac{1}{2M} \int_{-\infty}^{+\infty} p_x^2 |\tilde{\Phi}_n(p_x)|^2 dp_x = \frac{1}{2M} \frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi} \hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} p_x^2 \mathfrak{h}_n^2 \left(\frac{\alpha p_x}{\hbar} \right) e^{-\alpha^2 p_x^2/\hbar^2} dp_x$$

y hacemos el cambio $p_x \rightarrow \kappa = \alpha p_x / \hbar$, tenemos tras operar que

$$\langle K \rangle_{|\Phi_n\rangle} = \frac{\hbar\omega}{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \kappa^2 \mathfrak{h}_n^2(\kappa) e^{-\kappa^2} d\kappa.$$

Esta integral es la misma que la que se ha obtenido en el cálculo anterior del valor medio de la energía potencial V , de manera que el resultado es coincidente. Otra manera de demostrar el teorema del virial, pero sin necesidad de acudir a las expresiones explícitas de las autofunciones, es partiendo de las propiedades

(11.14). Sin embargo, la forma más general y elegante de llegar a este resultado es la que vamos a presentar en el siguiente ejemplo.

EJEMPLO 11.b. (*) El teorema del virial

Consideremos una partícula que se mueve en una dimensión bajo la acción de una fuerza conservativa $F_x(x)$ que deriva de la energía potencial $V(x)$. Supongamos que la partícula está en un estado estacionario $|\Phi\rangle$ normalizable. Demuestre el **teorema del virial**

$$\boxed{\langle \hat{K} \rangle_{|\Phi\rangle} = -\frac{1}{2} \langle \hat{x} \hat{F}_x \rangle_{|\Phi\rangle}} \quad (11.27)$$

donde K es la energía cinética de la partícula. Particularice el resultado para un oscilador armónico.

Ayuda: Parte de que $\langle \Phi(t) | \hat{x} \hat{p}_x | \Phi(t) \rangle$ es constante en el tiempo.

Solución:

Sabemos que para cualquier operador \hat{A} (no necesariamente autoadjunto)

$$\frac{d}{dt} \langle \Phi(t) | \hat{A} | \Phi(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle \Phi(t) | [\hat{A}, \hat{H}] | \Phi(t) \rangle.$$

Por tanto, para un estado estacionario $|\Phi(t)\rangle = \exp(-iEt/\hbar)|\Phi\rangle$ se tiene que

$$-\frac{i}{\hbar} \langle \Phi(t) | [\hat{A}, \hat{H}] | \Phi(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle \Phi | [\hat{A}, \hat{H}] | \Phi \rangle = 0$$

y si hacemos

$$\hat{A} = \hat{x} \hat{p}_x \implies -\frac{i}{\hbar} \langle \Phi | [\hat{x} \hat{p}_x, \hat{H}] | \Phi \rangle = 0.$$

Desarrollamos el comutador

$$-\frac{i}{\hbar} [\hat{x} \hat{p}_x, \hat{H}] = -\frac{i}{\hbar} \hat{x} [\hat{p}_x, \hat{H}] - \frac{i}{\hbar} [\hat{x}, \hat{H}] \hat{p}_x$$

y sabiendo que

$$-\frac{i}{\hbar} [\hat{p}_x, \hat{H}] = \hat{F}_x \quad ; \quad -\frac{i}{\hbar} [\hat{x}, \hat{H}] = \frac{1}{M} \hat{p}_x,$$

tenemos

$$-\frac{i}{\hbar} \langle \Phi | [\hat{x} \hat{p}_x, \hat{H}] | \Phi \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle \Phi | \hat{x} \hat{F}_x | \Phi \rangle + \frac{1}{M} \langle \Phi | \hat{p}_x^2 | \Phi \rangle = 0.$$

Como $\hat{K} = \hat{p}_x^2/(2M)$, si $|\Phi\rangle$ está normalizado se obtiene directamente el teorema del virial (11.27).

Para un oscilador armónico $\hat{F}_x = -M\omega^2 \hat{x}$, por lo que el teorema del virial reza

$$\langle \hat{K} \rangle_{|\Phi\rangle} = \frac{M\omega^2}{2} \langle \hat{x}^2 \rangle_{|\Phi\rangle} = \langle \hat{V} \rangle_{|\Phi\rangle},$$

que es el resultado (11.26).

11.2. DINÁMICA CUÁNTICA DE UN OSCILADOR ARMÓNICO

§ 1. Una vez que hemos obtenido los estados estacionarios de un oscilador armónico y discutido algunas de sus propiedades, es el momento de abordar la dinámica de una partícula sometida a la fuerza $F_x = -M\omega^2x$.

- Como sabemos del **capítulo 6**, si en el instante $t = 0$ la función de onda de la partícula es $\Psi(x)$, para cualquier instante de tiempo tendremos que

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-iE_n t/\hbar} \Phi_n(x), \quad \text{con } c_n = \langle \Phi_n | \Psi \rangle. \quad (11.28)$$

Esto nos permite analizar la dinámica del estado cuántico con sólo conocer las coordenadas $\{c_n\}$ de su función de onda en $t = 0$ en la base de autofunciones de la energía.

- Por otro lado, si designamos por $\langle A \rangle_t$ al valor medio de un cierto observable A en el estado dinámico $|\Psi(t)\rangle$, sabemos que

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_t = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle_t \quad (11.29)$$

y, en particular, para los observables posición y momento lineal tenemos los teoremas de Ehrenfest

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle_t = \frac{1}{M} \langle p_x \rangle_t \quad \frac{d}{dt} \langle p_x \rangle_t = -M\omega^2 \langle x \rangle_t \quad (11.30)$$

donde ya hemos utilizado que $F_x = -M\omega^2x$. Si ahora derivamos respecto del tiempo la primera igualdad y sustituimos $d\langle p_x \rangle_t/dt$ de acuerdo con la segunda, llegamos a que

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle_t = -\omega^2 \langle x \rangle_t. \quad (11.31)$$

Esta es la ecuación de evolución de la posición de un oscilador clásico. Su solución general es

$$\langle x \rangle_t = \langle x \rangle_0 \cos(\omega t) + \frac{\langle p_x \rangle_0}{M\omega} \sin(\omega t), \quad (11.32)$$

siendo $\langle x \rangle_0$ y $\langle p_x \rangle_0$ los valores medios en $t = 0$ de la posición y el momento lineal, respectivamente. Como consecuencia, *en el oscilador armónico cuántico el valor medio de la posición sigue la misma ley de evolución que la posición de un oscilador clásico*.

Por el primer teorema de Ehrenfest esta afirmación también es cierta para el momento lineal. Sin embargo, ya que para cualquier observable $A(x, p_x)$ se tiene en general

$$\langle A(x, \hat{p}_x) \rangle_t \neq A(\langle x \rangle_t, \langle p_x \rangle_t),$$

la correspondencia anterior no se puede extender *a priori* a otras magnitudes físicas. El siguiente ejemplo ilustra este punto.

EJEMPLO 11.c. Evolución temporal en un oscilador armónico I

La función de onda normalizada en el instante $t = 0$ de una partícula de masa M que está sometida a la acción de una fuerza armónica de pulsación ω es

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi_0(x) + \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi_1(x),$$

donde

$$\Phi_0(x) = \frac{1}{(\sqrt{\pi}\alpha)^{1/2}}e^{-x^2/(2\alpha^2)} \quad ; \quad \Phi_1(x) = \frac{1}{(2\sqrt{\pi}\alpha)^{1/2}}\frac{2x}{\alpha}e^{-x^2/(2\alpha^2)}$$

son las dos primeras autofunciones de la energía del sistema y $\alpha = \sqrt{\hbar/(M\omega)}$ es la longitud natural del oscilador.

- a) Escriba la expresión para $\Psi(x, t)$. Como consecuencia, analice cómo evoluciona en el tiempo la densidad de probabilidad $\rho(x, t)$ asociada a la posición.
- b) Obtenga, para cualquier instante de tiempo, los valores medios de la posición y el momento de la partícula. Compruebe que los resultados son los correspondientes a un oscilador clásico.
- c) Halle para cualquier instante de tiempo el valor esperado de la energía potencial.

Solución:

- a) De manera directa

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi_0(x)e^{-iE_0t/\hbar} + \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar}$$

y como $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-i\omega t/2}\Phi_0(x) + \Phi_1(x)e^{-3i\omega t/2} \right) = \frac{e^{-i\omega t/2}}{\sqrt{2}} (\Phi_0(x) + \Phi_1(x)e^{-i\omega t})$$

(el último paso no es necesario pero, como veremos, facilitará bastante los siguientes cálculos).

La densidad de probabilidad para la posición es

$$\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} |\Phi_0(x) + \Phi_1(x)e^{-i\omega t}|^2$$

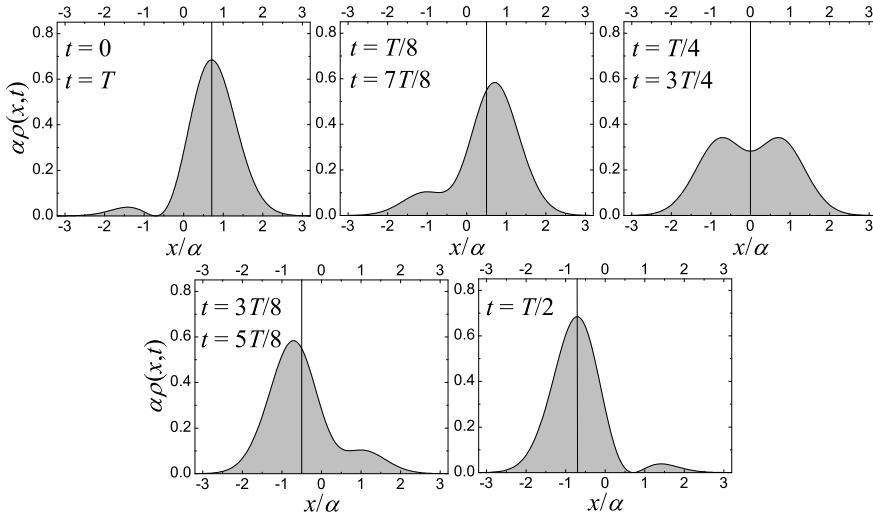


Figura 11-2. Evolución de la densidad de probabilidad $\rho(x, t)$ correspondiente al **ejemplo 11.3** durante un periodo de oscilación. Las líneas verticales señalan la posición del valor medio de x

y como las autofunciones $\Phi_n(x)$ son reales

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \frac{1}{2} (\Phi_0^2(x) + \Phi_1^2(x) + \Phi_0(x)\Phi_1(x)e^{-i\omega t} + \Phi_0(x)\Phi_1(x)e^{+i\omega t}) = \\ &= \frac{1}{2} (\Phi_0^2(x) + \Phi_1^2(x) + 2\Phi_0(x)\Phi_1(x)\cos(\omega t)) = \frac{e^{-x^2/\alpha^2}}{2\sqrt{\pi}\alpha} \left[1 + \frac{2x^2}{\alpha^2} + 2\frac{\sqrt{2}x}{\alpha} \cos(\omega t) \right] \end{aligned}$$

donde hemos usado que $\cos(\omega t) = [\exp(i\omega t) + \exp(-i\omega t)]/2$. La función $\rho(x, t)$ oscila entonces con periodo $T = 2\pi/\omega$ (vea la FIG. 11-2).

b) El valor medio de la posición es

$$\langle x \rangle_t = \langle \Psi(t) | \hat{x} | \Psi(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx$$

y sustituyendo $\Psi(x, t)$ por su expresión tenemos que

$$\langle x \rangle_t = \frac{1}{2} (\langle \Phi_0 | \hat{x} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_1 | \hat{x} | \Phi_1 \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{x} | \Phi_1 \rangle e^{-i\omega t} + \langle \Phi_1 | \hat{x} | \Phi_0 \rangle e^{+i\omega t}).$$

Ahora bien, el valor medio de la posición es cero para cualquier estado estacionario del oscilador. Por otro lado, como x y $\Phi_n(x)$ son reales, $\langle \Phi_0 | \hat{x} | \Phi_1 \rangle = \langle \Phi_1 | \hat{x} | \Phi_0 \rangle$, y queda que

$$\langle x \rangle_t = \langle \Phi_0 | \hat{x} | \Phi_1 \rangle \cos(\omega t).$$

Ya sólo basta evaluar el elemento de matriz, bien explícitamente o bien usando la representación matricial de \hat{x} dada en (11.17). Como mera ilustración procedamos al cálculo directo. Sustituyendo $\Phi_0(x)$ y $\Phi_1(x)$,

$$\langle \Phi_0 | \hat{x} | \Phi_1 \rangle = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}\alpha^2} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2/\alpha^2} dx = \frac{\sqrt{2}\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 e^{-u^2} du = \frac{\alpha}{\sqrt{2}}$$

y, en definitiva,

$$\langle x \rangle_t = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \cos(\omega t),$$

que corresponde a un movimiento oscilatorio armónico simple de pulsación ω y amplitud $\alpha/\sqrt{2}$. El valor medio de la posición evoluciona clásicamente.

A su vez, el valor esperado del momento lineal es

$$\langle p_x \rangle_t = \langle \Psi(t) | \hat{p}_x | \Psi(t) \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx.$$

Desarrollando y teniendo en cuenta que el valor esperado de \hat{p}_x es cero en cualquier estado estacionario normalizable,

$$\langle p_x \rangle_t = \frac{1}{2} (\langle \Phi_0 | \hat{p}_x | \Phi_1 \rangle e^{-i\omega t} + \langle \Phi_1 | \hat{p}_x | \Phi_0 \rangle e^{+i\omega t}).$$

Usando los elementos de matriz de \hat{p}_x dados en (11.23) (o evaluándolos explícitamente) tenemos que

$$\langle \Phi_0 | \hat{p}_x | \Phi_1 \rangle = \langle \Phi_1 | \hat{p}_x | \Phi_0 \rangle^* = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_0(x) \frac{d\Phi_1(x)}{dx} dx = -\frac{i\hbar}{\sqrt{2}\alpha}$$

por lo que

$$\langle p_x \rangle_t = -\frac{i\hbar}{2\sqrt{2}\alpha} (e^{-i\omega t} - e^{+i\omega t}) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2}\alpha} \sin(\omega t).$$

También podríamos haber usado directamente el primer teorema de Ehrenfest,

$$\langle p_x \rangle_t = M \frac{d\langle x \rangle_t}{dt} = -\frac{M\alpha\omega}{\sqrt{2}} \sin(\omega t) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2}\alpha} \sin(\omega t),$$

llegando, naturalmente, al mismo resultado.

c) El valor medio de la energía potencial es

$$\langle V \rangle_t = \frac{1}{2} \left(\langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_1 | \hat{V} | \Phi_1 \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_1 \rangle e^{-i\omega t} + \langle \Phi_1 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle e^{+i\omega t} \right)$$

Los dos primeros elementos de matriz los podemos calcular directamente a partir del teorema del virial $\langle \Phi_n | \hat{V} | \Phi_n \rangle = E_n/2$. Los dos últimos son cero porque el integrando en el producto escalar es impar,

$$\langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_1 \rangle = \langle \Phi_1 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle^* = \frac{1}{2} M\omega^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_0(x) x^2 \Phi_1(x) dx = 0.$$

Queda en definitiva que

$$\langle V \rangle_t = \frac{1}{2} \left(\frac{E_0}{2} + \frac{E_1}{2} \right) = \frac{1}{2} \hbar \omega,$$

que resulta ser constante en el tiempo, lo que no sucede en el análisis clásico del problema.

11.3. OPERADORES DE CREACIÓN Y DESTRUCCIÓN

§ 1. Consideremos un oscilador armónico unidimensional de frecuencia ω y longitud natural $\alpha = \sqrt{\hbar/(M\omega)}$. Definamos los operadores *creación*, \hat{a}^\dagger , y *destrucción*, \hat{a} , del oscilador como

$$\hat{a}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\alpha} \hat{x} - i \frac{\alpha}{\hbar} \hat{p}_x \right)$$

$$\hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\alpha} \hat{x} + i \frac{\alpha}{\hbar} \hat{p}_x \right)$$

(11.33)

Estos operadores no son autoadjuntos, por lo que no representan magnitud física alguna. Sin embargo, tal y como señala la notación que hemos escogido, son adjuntos el uno del otro. Usando estos operadores podremos hacer un tratamiento muy elegante de la dinámica cuántica del oscilador que, con pocas modificaciones, se usa en otras muchas aplicaciones más avanzadas de la teoría cuántica.

En primer lugar, a partir de (11.57), los operadores de posición y momento lineal se escriben como

$$\hat{x} = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad ; \quad \hat{p}_x = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}\alpha} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}). \quad (11.34)$$

Como consecuencia⁴

$$\begin{aligned} \hat{x}^2 &= \frac{\alpha^2}{2} ((\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) = \frac{\hbar}{2M\omega} ((\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) \\ \hat{p}_x^2 &= \frac{\hbar^2}{2\alpha^2} (-(\hat{a}^\dagger)^2 - \hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) = \frac{\hbar M \omega}{2} (-(\hat{a}^\dagger)^2 - \hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) \end{aligned}$$

⁴ Tenga cuidado con el orden en el producto de operadores puesto que, en principio, \hat{a} y \hat{a}^\dagger no commutan.

y el operador hamiltoniano del sistema es

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\hat{p}_x^2 + \frac{1}{2}M\omega^2\hat{x}^2 = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger). \quad (11.35)$$

Por otra parte el conmutador entre los operadores de destrucción y creación es

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\alpha}\hat{x} + i\frac{\alpha}{\hbar}\hat{p}_x, \frac{1}{\alpha}\hat{x} - i\frac{\alpha}{\hbar}\hat{p}_x \right]$$

y desarrollándolo y usando las reglas de conmutación canónicas, tenemos que

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{I} \quad (11.36)$$

donde \hat{I} es el operador unidad, que habitualmente escribiremos como “1”. De esta forma

$$\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger = 1 + 2\hat{a}^\dagger\hat{a}$$

y el operador hamiltoniano \hat{H} es

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \equiv \hbar\omega\left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right) \quad (11.37)$$

siendo $\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ un operador autoadjunto denominado *operador número*.

§ 2. Con la ayuda de los operadores \hat{a}^\dagger y \hat{a} podremos obtener el espectro de energías del oscilador y una relación de recurrencia para los estados estacionarios de manera mucho más simple que mediante la resolución directa de la ecuación de Schrödinger estacionaria que vimos en la sección 11.1.

Para ello empecemos evaluando el conmutador $[\hat{H}, \hat{a}]$. Partiendo de (11.61) y obviando aquellos conmutadores que son trivialmente nulos,

$$[\hat{H}, \hat{a}] = \hbar\omega[\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}] = \hbar\omega[\hat{a}^\dagger, \hat{a}]\hat{a} = -\hbar\omega[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]\hat{a}.$$

De acuerdo con la regla de conmutación (11.60), nos queda que

$$[\hat{H}, \hat{a}] = -\hbar\omega\hat{a}. \quad (11.38)$$

En consecuencia, para cualquier estado $|\Psi\rangle$ se tendrá que

$$(\hat{H}\hat{a} - \hat{a}\hat{H})|\Psi\rangle = -\hbar\omega\hat{a}|\Psi\rangle \Rightarrow \hat{H}(\hat{a}|\Psi\rangle) = (\hat{a}\hat{H} - \hbar\omega\hat{a})|\Psi\rangle = \hat{a}(\hat{H} - \hbar\omega)|\Psi\rangle.$$

En particular, si $|\Phi_n\rangle$ es un autoestado normalizado de \hat{H} con autovalor E_n ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$), de la última expresión tendremos que

$$\hat{H}(\hat{a}|\Phi_n\rangle) = \hat{a}\left((E_n - \hbar\omega)|\Phi_n\rangle\right) = (E_n - \hbar\omega)(\hat{a}|\Phi_n\rangle).$$

Por tanto, $\hat{a}|\Phi_n\rangle$ es autoestado de \hat{H} con autovalor $E_n - \hbar\omega$, aunque nada garantiza que $\hat{a}|\Phi_n\rangle$ esté normalizado. En consecuencia, si $|\Phi_0\rangle$ es el estado fundamental se debe cumplir que

$$\boxed{\hat{a}|\Phi_0\rangle = 0,} \quad (11.39)$$

ya que no existe ningún autoestado de la energía con autovalor menor que E_0 (observe que usamos 0 en lugar del ket nulo $|\text{nul}\rangle$ para no cargar la notación).

De similar manera se demuestra que

$$[\hat{H}, \hat{a}^\dagger] = \hbar\omega\hat{a}^\dagger \quad (11.40)$$

y que $\hat{a}^\dagger|\Phi_n\rangle$ es autoestado de \hat{H} con autovalor $E_n + \hbar\omega$.

Si ahora hacemos actuar \hat{H} sobre $|\Phi_0\rangle$, usando (11.61) tenemos que

$$\hat{H}|\Phi_0\rangle = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)|\Phi_0\rangle = \hbar\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}|\Phi_0\rangle + \frac{\hbar\omega}{2}|\Phi_0\rangle$$

pero como $\hat{a}|\Phi_0\rangle = 0$

$$\hat{H}|\Phi_0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}|\Phi_0\rangle \quad \Rightarrow \quad E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Hemos, pues, obtenido la energía del punto cero sin resolver ninguna ecuación diferencial. Si ahora hacemos actuar \hat{a}^\dagger sobre $|\Phi_0\rangle$ tendremos un autoestado con energía $3\hbar\omega/2$. Una segunda actuación de \hat{a}^\dagger daría un autoestado con energía $5\hbar\omega/2$ y, en general, la actuación de $(\hat{a}^\dagger)^n$ sobre $|\Phi_0\rangle$ resultaría en un autoestado con energía $(n+1/2)\hbar\omega$. Estos valores forman así parte del espectro de \hat{H} . Además, son los únicos posibles puesto que actuaciones sucesivas del operador destrucción \hat{a} sobre un hipotético autoestado cuya energía no sea igual a $(n + 1/2)\hbar\omega$, con $n \in \mathbb{N}$, terminaría condiciéndonos a un autoestado con energía menor que $\hbar\omega/2$, lo que es imposible.⁵

⁵ La única manera de evitarlo sería que existiese un estado $|\vartheta\rangle \neq |\Phi_0\rangle$ tal que $\hat{a}|\vartheta\rangle = 0$, pero ello es imposible, ya que el único estado que verifica la igualdad $\hat{a}|\vartheta\rangle = 0$ es el autoestado de la energía con autovalor $\hbar\omega/2$, el cual es único debido a que el espectro de energías es no degenerado.

En suma, el espectro de energías es

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad \text{con } n = 0, 1, 2, \dots \quad (11.41)$$

y el autoestado con energía E_n es

$$|\Phi_n\rangle \propto (\hat{a}^\dagger)^n |\Phi_0\rangle.$$

La actuación de los operadores de creación y destrucción sobre ese estado es

$$\hat{a}^\dagger |\Phi_n\rangle \propto |\Phi_{n+1}\rangle \quad ; \quad \hat{a} |\Phi_n\rangle \propto |\Phi_{n-1}\rangle.$$

Ya sólo falta obtener las constantes de proporcionalidad en las relaciones anteriores. Ello es sencillo si partimos de

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} |\Phi_n\rangle = \left(\frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} - \frac{1}{2} \right) |\Phi_n\rangle = n |\Phi_n\rangle, \quad (11.42)$$

y usando la regla de commutación (11.60),

$$\hat{a} \hat{a}^\dagger |\Phi_n\rangle = (n+1) |\Phi_n\rangle. \quad (11.43)$$

Como los autoestados están normalizados, tendremos que

$$|\Phi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\|\hat{a}|\Phi_n\rangle\|} \hat{a} |\Phi_n\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{a} |\Phi_n\rangle = \|\hat{a}|\Phi_n\rangle\| |\Phi_{n-1}\rangle$$

y basta evaluar $\|\hat{a}|\Phi_n\rangle\|$ (¡cuidado con la manipulación de adjuntos!):

$$\|\hat{a}|\Phi_n\rangle\| = \sqrt{\langle \hat{a}\Phi_n | \hat{a}\Phi_n \rangle} = \sqrt{\langle \Phi_n | \hat{a}^\dagger \hat{a}\Phi_n \rangle} = \sqrt{n \langle \Phi_n | \Phi_n \rangle} = \sqrt{n}$$

donde en el penúltimo paso se ha hecho uso de la ecuación (11.42). Llegamos así al primer resultado buscado:

$$\hat{a} |\Phi_n\rangle = \sqrt{n} |\Phi_{n-1}\rangle. \quad (11.44)$$

De similar manera tenemos que

$$|\Phi_{n+1}\rangle = \frac{1}{\|\hat{a}^\dagger|\Phi_n\rangle\|} \hat{a}^\dagger |\Phi_n\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{a}^\dagger |\Phi_n\rangle = \|\hat{a}^\dagger|\Phi_n\rangle\| |\Phi_{n+1}\rangle$$

donde ahora

$$\|\hat{a}^\dagger|\Phi_n\rangle\| = \sqrt{\langle \hat{a}^\dagger\Phi_n | \hat{a}^\dagger\Phi_n \rangle} = \sqrt{\langle \Phi_n | \hat{a}\hat{a}^\dagger\Phi_n \rangle} = \sqrt{n+1},$$

habiéndose utilizado (11.43). Por consiguiente,

$$\hat{a}^\dagger |\Phi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\Phi_{n+1}\rangle. \quad (11.45)$$

Finalmente, puesto que

$$\begin{aligned} (\hat{a}^\dagger)^n |\Phi_0\rangle &= \sqrt{1}(\hat{a}^\dagger)^{n-1} |\Phi_1\rangle = \sqrt{1 \times 2}(\hat{a}^\dagger)^{n-2} |\Phi_2\rangle \\ &= \sqrt{1 \times 2 \times 3}(\hat{a}^\dagger)^{n-3} |\Phi_3\rangle = \dots = \sqrt{1 \times 2 \times 3 \times \dots \times n} |\Phi_n\rangle \end{aligned}$$

tenemos que el n -ésimo autoestado normalizado de la energía está dado por

$$|\Phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |\Phi_0\rangle. \quad (11.46)$$

En resumen:

OPERADORES DE CREACIÓN Y DESTRUCCIÓN

- Definición:

$$\hat{a}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\alpha} \hat{x} - i \frac{\alpha}{\hbar} \hat{p}_x \right) \quad ; \quad \hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\alpha} \hat{x} + i \frac{\alpha}{\hbar} \hat{p}_x \right)$$

- Reglas de commutación:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{I} \quad ; \quad [\hat{H}, \hat{a}] = -\hbar\omega\hat{a} \quad ; \quad [\hat{H}, \hat{a}^\dagger] = \hbar\omega\hat{a}^\dagger$$

- Actuación sobre autoestados normalizados de \hat{H}

$$\hat{a} |\Phi_n\rangle = \sqrt{n} |\Phi_{n-1}\rangle \quad ; \quad \hat{a}^\dagger |\Phi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\Phi_{n+1}\rangle$$

- Magnitudes físicas en términos de \hat{a} y \hat{a}^\dagger :

$$\hat{x} = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad ; \quad \hat{p}_x = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}\alpha} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \quad ; \quad \hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right)$$

donde $\alpha = \sqrt{\hbar/(M\omega)}$ es la longitud natural del oscilador.

EJEMPLO 11.d. Representación en posiciones de \hat{a}

Una partícula de masa M se mueve en una dimensión bajo la acción de una fuerza armónica con pulsación ω .

- a) Obtenga el operador de destrucción \hat{a} en la representación de posiciones. Como consecuencia, obtenga la actuación del operador de creación en dicha representación.
- b) Halle la función de onda del estado fundamental $\Phi_0(x)$ a partir de la igualdad $\hat{a}|\Phi_0\rangle = 0$.
- c) Usando las propiedades del operador creación, encuentre una expresión cerrada que nos permita evaluar directamente la función de onda $\Phi_{n+1}(x)$ en términos de $\Phi_n(x)$.

Solución:

- a) Es inmediato obtener que ,

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\alpha} \hat{x} + i \frac{\alpha}{\hbar} \hat{p}_x \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\alpha} x + \alpha \frac{d}{dx} \right).$$

El operador adjunto de \hat{a} es el operador creación. Recordando que el adjunto de la derivada es menos la derivada,

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\alpha} x - \alpha \frac{d}{dx} \right).$$

- b) En la representación en posiciones, la igualdad $\hat{a}|\Phi_0\rangle = 0$ se escribe como

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\alpha} x + \alpha \frac{d}{dx} \right) \Phi_0(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dx} \Phi_0(x) = -\frac{x}{\alpha^2} \Phi_0(x).$$

La solución de esta ecuación diferencial es inmediata

$$\Phi_0(x) = C_0 \exp \left(-\frac{x^2}{2\alpha^2} \right),$$

donde C_0 es una constante multiplicativa arbitraria, que podemos determinar imponiendo la normalización de $\Phi_0(x)$.

- c) Partiendo de $\hat{a}^\dagger|\Phi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\Phi_{n+1}\rangle$ tenemos que

$$\Phi_{n+1}(x) = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}^\dagger \Phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\sqrt{n+1}}} \left(\frac{x}{\alpha} \Phi_n(x) - \alpha \frac{d\Phi_n(x)}{dx} \right), \quad (11.47)$$

que nos permite evaluar directamente la función de onda $\Phi_{n+1}(x)$ en términos de $\Phi_n(x)$.

§ 3. La utilidad de los operadores \hat{a} y \hat{a}^\dagger no se limita a la obtención algebraica del espectro de energías y de los autoestados correspondientes sin necesidad de resolver explícitamente la ecuación de Schrödinger estacionaria. Toda magnitud dinámica se expresa en función de \hat{x} y \hat{p}_x y, en consecuencia, de \hat{a} y \hat{a}^\dagger .

Como conocemos la actuación de estos operadores sobre la base de autoestados de la energía podemos entonces analizar cualquier problema dinámico en una representación puramente matricial.

Por ejemplo, la actuación de \hat{x} sobre los autoestados de la energía es

$$\hat{x}|\Phi_n\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) |\Phi_n\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} (\sqrt{n+1}|\Phi_{n+1}\rangle + \sqrt{n}|\Phi_{n-1}\rangle) \quad (11.48)$$

que, obviamente, coincide con la expresión (11.15) que obtuvimos utilizando la representación en posiciones y las reglas de recurrencia entre los polinomios de Hermite.

Igualmente, para el momento lineal tendremos que

$$\hat{p}_x|\Phi_n\rangle = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}\alpha} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) |\Phi_n\rangle = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}\alpha} (\sqrt{n+1}|\Phi_{n+1}\rangle - \sqrt{n}|\Phi_{n-1}\rangle), \quad (11.49)$$

resultado que es consistente con la matriz \mathbb{P}_x dada en (11.23).

Como ya hemos visto, los operadores \hat{x}^2 y \hat{p}^2 están dados por

$$\begin{aligned} \hat{x}^2 &= \frac{\alpha^2}{2} (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2 = \frac{\alpha^2}{2} ((\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) \\ \hat{p}_x^2 &= \frac{-\hbar^2}{2\alpha^2} (\hat{a}^\dagger - \hat{a})^2 = \frac{\hbar^2}{2\alpha^2} ((\hat{a}^\dagger)^2 - \hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) \end{aligned} \quad (11.50)$$

Si ahora tenemos en cuenta que $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger)/2$ y que $\alpha^2 = \hbar/(M\omega)$, los operadores de energía cinética y energía potencial son

$$\begin{aligned} \hat{K} &= \frac{1}{2M} \hat{p}_x^2 = \frac{1}{2} \hat{H} - \frac{\hbar\omega}{4} ((\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^2) \\ \hat{V} &= \frac{1}{2} M\omega^2 \hat{x}^2 = \frac{1}{2} \hat{H} + \frac{\hbar\omega}{4} ((\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^2). \end{aligned} \quad (11.51)$$

De esta forma, la actuación de \hat{K} y \hat{V} sobre el n -ésimo estado estacionario es

$$\hat{K}|\Phi_n\rangle = \frac{E_n}{2}|\Phi_n\rangle - \frac{\hbar\omega}{4} \left(\sqrt{(n+1)(n+2)} |\Phi_{n+2}\rangle + \sqrt{n(n-1)} |\Phi_{n-2}\rangle \right) \quad (11.52)$$

$$\hat{V}|\Phi_n\rangle = \frac{E_n}{2}|\Phi_n\rangle + \frac{\hbar\omega}{4} \left(\sqrt{(n+1)(n+2)} |\Phi_{n+2}\rangle + \sqrt{n(n-1)} |\Phi_{n-2}\rangle \right),$$

lo que nos permite hallar fácilmente los elementos de matriz $\langle \Phi_s | \hat{K} | \Phi_n \rangle$ y $\langle \Phi_s | \hat{V} | \Phi_n \rangle$. Observe que estos elementos de matriz son nulos excepto si $s = n$ ó $|s - n| = 2$ y, en particular,

$$\langle \hat{K} \rangle_{|\Phi_n\rangle} = \langle \Phi_n | \hat{K} | \Phi_n \rangle = \frac{E_n}{2} \quad ; \quad \langle \hat{V} \rangle_{|\Phi_n\rangle} = \langle \Phi_n | \hat{V} | \Phi_n \rangle = \frac{E_n}{2}$$

que es el teorema del virial.

EJEMPLO 11.e. Evolución temporal en un oscilador armónico II

El estado cuántico de un oscilador armónico de masa M y pulsación ω verifica que en una hipotética medida de la energía hay una probabilidad $1/3$ de hallar el valor $\hbar\omega/2$ y una probabilidad $2/3$ de obtener el resultado $5\hbar\omega/2$. Escriba el estado más general compatible con esta información. Halle cómo evolucionan en el tiempo el valor medio y la incertidumbre de la posición de la partícula.

Solución:

En el instante $t = 0$, el estado cuántico $|\Psi\rangle$ es una combinación lineal de los autoestados de la energía $|\Phi_0\rangle$ y $|\Phi_2\rangle$ con coeficientes c_0 y c_2 tales que $|c_0|^2 = 1/3$ y $|c_2|^2 = 2/3$. Como el vector de estado está definido salvo constante multiplicativa global, podemos escoger $c_0 = 1/\sqrt{3}$, pero con los datos que se nos suministran no sabemos cuál es el argumento δ de c_2 . En suma,

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|\Phi_0\rangle + e^{i\delta}\sqrt{\frac{2}{3}}|\Phi_2\rangle$$

y para cualquier instante de tiempo,

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|\Phi_0(t)\rangle + e^{i\delta}\sqrt{\frac{2}{3}}|\Phi_2(t)\rangle = \frac{e^{-i\omega t/2}}{\sqrt{3}}|\Phi_0\rangle + e^{i\delta}e^{-5i\omega t/2}\sqrt{\frac{2}{3}}|\Phi_2\rangle$$

donde hemos usado que $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$.

El valor esperado en un instante t de un observable A es $\langle A \rangle_t = \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle$. Desarrollando

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_t &= \frac{1}{3}\langle \Phi_0 | \hat{A} | \Phi_0 \rangle + \frac{2}{3}\langle \Phi_2 | \hat{A} | \Phi_2 \rangle \\ &\quad + \frac{\sqrt{2}}{3}e^{i(2\omega t - \delta)}\langle \Phi_2 | \hat{A} | \Phi_0 \rangle + \frac{\sqrt{2}}{3}e^{-i(2\omega t - \delta)}\langle \Phi_0 | \hat{A} | \Phi_2 \rangle. \end{aligned} \quad (11.53)$$

Para hallar $(\Delta x)_t$ debemos ver cómo evolucionan en el tiempo x y x^2 . Sin embargo, como el operador \hat{x} sólo conecta autoestados de \hat{H} con números cuánticos consecutivos

$$\langle \Phi_0 | \hat{x} | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_2 | \hat{x} | \Phi_2 \rangle = \langle \Phi_2 | \hat{x} | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \hat{x} | \Phi_2 \rangle = 0$$

por lo que $\langle x \rangle_t = 0$.

En la obtención de $\langle x^2 \rangle_t$ necesitamos evaluar previamente los elementos de matriz $\langle \Phi_0 | \hat{x}^2 | \Phi_0 \rangle$, $\langle \Phi_2 | \hat{x}^2 | \Phi_2 \rangle$ y $\langle \Phi_2 | \hat{x}^2 | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \hat{x}^2 | \Phi_2 \rangle^*$. Los dos primeros son inmediatos usando el teorema del virial:

$$\langle \Phi_n | \hat{x}^2 | \Phi_n \rangle = \frac{2}{M\omega^2} \langle \Phi_n | \hat{V} | \Phi_n \rangle = \frac{2}{M\omega^2} \frac{E_n}{2} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \alpha^2.$$

Para el tercero, si desarrollamos \hat{x}^2 en términos de \hat{a} y \hat{a}^\dagger ,

$$\langle \Phi_2 | \hat{x}^2 | \Phi_0 \rangle = \frac{\alpha^2}{2} \left\langle \Phi_2 \left| (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger \right| \Phi_0 \right\rangle$$

pero como sólo $(\hat{a}^\dagger)^2 | \Phi_0 \rangle$ da un resultado proporcional a $|\Phi_2\rangle$,

$$\langle \Phi_2 | \hat{x}^2 | \Phi_0 \rangle = \frac{\alpha^2}{2} \langle \Phi_2 | (\hat{a}^\dagger)^2 | \Phi_0 \rangle = \frac{\alpha^2}{2} \langle \Phi_2 | \hat{a}^\dagger | \Phi_1 \rangle = \frac{\alpha^2}{\sqrt{2}} \langle \Phi_2 | \Phi_2 \rangle = \frac{\alpha^2}{\sqrt{2}}.$$

Sustituyendo los elementos de matriz en la expresión general (11.53),

$$\langle x^2 \rangle_t = \frac{11}{6} \alpha^2 + \frac{1}{3} e^{i(2\omega t - \delta)} \alpha^2 + \frac{1}{3} e^{-i(2\omega t - \delta)} \alpha^2 = \frac{\alpha^2}{6} \left(11 + 2 \cos(4\omega t - \delta) \right)$$

y, en definitiva,

$$(\Delta x)_t = \sqrt{\langle x^2 \rangle_t - \langle x \rangle_t^2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle_t} = \frac{\alpha}{\sqrt{6}} \sqrt{11 + 4 \cos(2\omega t - \delta)}.$$

EJEMPLO 11.f. Espectro del operador creación

El operador creación \hat{a}^\dagger de un oscilador armónico unidimensional de frecuencia ω y masa M no es autoadjunto, por lo que no podemos anticipar nada respecto a la estructura de su espectro. Planteando en la representación de posiciones la ecuación de autovalores $\hat{a}^\dagger |\vartheta\rangle = z |\vartheta\rangle$, con $z \in \mathbb{C}$, demuestre que $\sigma(\hat{a}^\dagger) = \{\emptyset\}$

Solución:

La ecuación de autovalores es

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\alpha} x - \alpha \frac{d}{dx} \right) \vartheta(x) = z \vartheta(x)$$

o, equivalentemente,

$$\frac{d}{dx} \vartheta(x) = \frac{1}{\alpha^2} \left(x - \sqrt{2}\alpha z \right) \vartheta(x).$$

La solución de la ecuación diferencial es

$$\vartheta(x) = \mathcal{A} \exp \left[+\frac{1}{2\alpha^2} \left(x - \sqrt{2}\alpha z \right)^2 \right]$$

siendo \mathcal{A} una constante multiplicativa arbitraria. Independientemente del valor de z , esta función $\vartheta(x)$ va a divergir cuando $|x| \rightarrow \pm\infty$, por lo que ni es normalizable ni acotada. Se tiene entonces que el espectro del operador creación es el conjunto vacío.

Ingenuamente se podría pensar que lo mismo sucede para el operador de destrucción \hat{a} . Sin embargo ya hemos visto que el estado fundamental del oscilador es autoestado de \hat{a} con autovalor nulo. De hecho, y como vamos a ver en la próxima sección, el espectro puntual de \hat{a} es todo \mathbb{C} !

11.4. ESTADOS COHERENTES

§ 1. Analicemos en esta sección un tipo de estados no estacionarios de un oscilador armónico de masa M y pulsación ω que exhiben propiedades físicas muy notables.

Diremos que, en un cierto instante de tiempo, la partícula está en un *estado coherente* si su función de onda $\Psi_z(x)$ es autofunción del operador destrucción \hat{a} con autovalor z . Para obtener $\Psi_z(x)$, planteemos la ecuación de autovalores

$$\hat{a}\Psi_z(x) = z\Psi_z(x), \quad \text{con } z \in \mathbb{C}.$$

Sustituyendo \hat{a} por su expresión,

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\alpha}x + \alpha \frac{d}{dx} \right) \Psi_z(x) = z\Psi_z(x),$$

siendo α la longitud natural del oscilador. Reescribiendo tal ecuación como

$$\frac{d}{dx} \Psi_z(x) = -\frac{1}{\alpha^2} \left(x - \sqrt{2}\alpha z \right) \Psi_z(x)$$

es inmediato comprobar que su solución es

$$\Psi_z(x) = \mathcal{A} \exp \left[-\frac{1}{2\alpha^2} \left(x - \sqrt{2}\alpha z \right)^2 \right],$$

donde \mathcal{A} es una constante arbitraria.

La anterior función es normalizable para cualquier valor de $z \in \mathbb{C}$, lo que implica que $\sigma_p(\hat{a}) = \mathbb{C}$. En efecto, si escribimos el escalar complejo αz como

$$\sqrt{2}\alpha z = x_0 + i\alpha^2 k_0 \tag{11.54}$$

tenemos que

$$\Psi_z(x) = \mathcal{A} e^{k_0^2 \alpha^2 / 2} e^{-ik_0 x_0} \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{2\alpha^2} \right] \exp(+ik_0 x)$$

que resulta ser un *paquete gaussiano* centrado en $x_0 = \sqrt{2}\alpha \Re(z)$ y para el que el valor medio del momento lineal es $p_0 = \hbar k_0 = \sqrt{2}\hbar \Im(z)/\alpha$. Si ahora escogemos la constante \mathcal{A} de modo que $\Psi_z(x)$ esté normalizada, tenemos que para cada valor $z \in \mathbb{C}$ hay un estado coherente cuya función de onda normalizada es

$$\boxed{\Psi_z(x) = \frac{e^{+ik_0(x-x_0)}}{(\sqrt{\pi}\alpha)^{1/2}} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2\alpha^2}\right] \quad \text{con} \quad \begin{cases} x_0 = \sqrt{2}\alpha \Re(z) \\ k_0 = \frac{\sqrt{2}}{\alpha} \Im(z) \end{cases}} \quad (11.55)$$

A partir de (11.55), la densidad de probabilidad $\rho(x)$ asociada a una medida de la posición es la función gaussiana centrada en x_0 dada por

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\alpha} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{\alpha^2}\right], \quad \text{con } x_0 = \sqrt{2}\alpha \Re(z). \quad (11.56)$$

§ 2. Obtengamos ahora la función de onda normalizada $\Psi_z(x)$ de un estado coherente como combinación lineal de las autofunciones de la energía $\Phi_n(x)$. Partamos de la expresión general

$$\Psi_z(x) = \mathcal{B} \sum_{n=0}^{\infty} c_n \Phi_n(x), \quad \text{con } |\mathcal{B}| = \left(\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 \right)^{-1/2}. \quad (11.57)$$

Como

$$\hat{a}\Psi_z(x) = \mathcal{B} \sum_{n=0}^{\infty} c_n \hat{a}\Phi_n(x) = \mathcal{B} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{n} \Phi_{n-1}(x) = \mathcal{B} \sum_{n=0}^{\infty} c_{n+1} \sqrt{n+1} \Phi_n(x)$$

la condición $\hat{a}\Psi_z(x) = z\Psi_z(x)$ se traduce en la siguiente relación de recurrencia para las coordenadas c_n :

$$zc_n = c_{n+1} \sqrt{n+1} \Rightarrow c_{n+1} = \frac{z}{\sqrt{n+1}} c_n \Rightarrow c_n = \frac{z}{\sqrt{n}} c_{n-1}.$$

Por tanto, si hacemos sin pérdida de generalidad que $c_0 = 1$, inmediatamente llegamos a que $c_n = z^n / \sqrt{n!}$. En consecuencia, la constante de normalización \mathcal{B} cumple que

$$|\mathcal{B}| = \left(\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 \right)^{-1/2} = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{|z|^{2n}}{n!} \right)^{-1/2} = e^{-|z|^2/2}.$$

donde hemos usado el desarrollo de Taylor de la función exponencial. En suma, salvo constante multiplicativa de módulo unidad físicamente irrelevante, la función de onda normalizada de un estado coherente es

$$\boxed{\Psi_z(x) = e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \Phi_n(x), \quad \text{con } z \in \mathbb{C}.} \quad (11.58)$$

§ 3. Supongamos ahora que la función de onda de la partícula en el instante $t = 0$ es la correspondiente a un estado coherente con un cierto autovalor z_0 :

$$\Psi(x, 0) = \Psi_{z_0}(x) = e^{-|z_0|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z_0^n}{\sqrt{n!}} \Phi_n(x).$$

Puesto que $\Psi(x, 0)$ está expresada como combinación lineal de autofunciones de la energía, la función de onda $\Psi(x, t)$ en un instante t arbitrario es:

$$\Psi(x, t) = e^{-|z_0|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega_n t} \Phi_n(x), \quad \text{con } \omega_n = \frac{E_n}{\hbar} = \frac{\omega}{2} + n\omega. \quad (11.59)$$

Ahora bien,

$$e^{-i\omega_n t} = e^{-i\omega t/2} e^{-in\omega t} = e^{-i\omega t/2} (e^{-i\omega t})^n$$

y sustituyendo en (11.59) llegamos a que

$$\Psi(x, t) = e^{-i\omega t/2} e^{-|z_0|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z_0 e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} \Phi_n(x).$$

Por tanto, si definimos la función temporal $z(t) = z_0 e^{-i\omega t}$, cuyo módulo $|z(t)|$ es $|z_0|$ para todo t , tenemos que

$$\boxed{\Psi(x, t) = e^{-i\omega t/2} \Psi_{z(t)}(x), \quad \text{con } z(t) = z_0 e^{-i\omega t}.} \quad (11.60)$$

El factor $\exp(-i\omega t/2)$ es independiente de la posición, por lo que podemos concluir que *si en un instante $t = 0$ el oscilador armónico está en un estado coherente con autovalor z_0 , en un instante de tiempo posterior t sigue siendo un estado coherente pero con autovalor $z(t) = z_0 \exp(-i\omega t)$.*

A la vista de (11.60), los valores esperados de la posición y el momento lineal en un instante t arbitrario son

$$\langle x \rangle_t = \sqrt{2\alpha} \operatorname{Re}(z(t)) \quad ; \quad \langle p_x \rangle_t = \frac{\sqrt{2}\hbar}{\alpha} \operatorname{Im}(z(t))$$

y usando que $\exp(-i\omega t) = \cos(\omega t) - i \sin(\omega t)$ y que $\alpha = \sqrt{\hbar/(M\omega)}$, tenemos que

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_t &= \langle x \rangle_0 \cos(\omega t) + \frac{\langle p_x \rangle_0}{M\omega} \sin(\omega t) \\ \langle p_x \rangle_t &= \langle p_x \rangle_0 \cos(\omega t) - M\omega \langle x \rangle_0 \sin(\omega t) \end{aligned} \quad \text{con} \quad \begin{cases} \langle x \rangle_0 = \sqrt{2}\alpha \Re e z_0 \\ \langle p_x \rangle_0 = \frac{\sqrt{2}\hbar}{\alpha} \Im m z_0 \end{cases} \quad (11.61)$$

A su vez, la densidad de probabilidad es

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\alpha} \exp \left[-\frac{(x - \langle x \rangle_t)^2}{\alpha^2} \right]. \quad (11.62)$$

En consecuencia, $\rho(x, t)$ oscila como un todo, sin deformarse, y su centro $\langle x \rangle_t$ sigue la misma ley de evolución que la posición de un oscilador clásico de pulsación ω y masa M . Es por ello por lo que a los estados coherentes se les llama a menudo también *estados semicásicos*. Finalmente, como $\Psi(x, t)$ es un paquete gaussiano (recuerde la ecuación (11.55)), tendremos que

$$(\Delta x)_t = \frac{1}{\sqrt{2}}\alpha \quad ; \quad (\Delta p_x)_t = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\alpha} \quad (11.63)$$

tal y como obtuvimos en el **ejemplo 3.e.**

11.5. EL OSCILADOR ARMÓNICO EN VARIAS DIMENSIONES

§ 1. Consideremos ahora que una partícula de masa M se mueve en el espacio bajo la acción de una fuerza de la forma

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -K_x x \mathbf{u}_x - K_y y \mathbf{u}_y - K_z z \mathbf{u}_z, \quad \text{con } K_i > 0 \quad (i = x, y, z), \quad (11.64)$$

que deriva de la energía potencial

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}K_x x^2 + \frac{1}{2}K_y y^2 + \frac{1}{2}K_z z^2 = \frac{1}{2}M(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \quad (11.65)$$

donde $\omega_i = \sqrt{K_i/M}$ es la frecuencia natural asociada a la componente i -ésima de la fuerza $\mathbf{F}(\mathbf{r})$. Podemos apreciar que $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ es la suma de tres fuerzas recuperadoras, orientadas en direcciones perpendiculares del espacio y desacopladas entre sí. Tenemos entonces que la dinámica del sistema es separable

y el operador hamiltoniano de la partícula será, en la representación en posiciones,

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z$$

con
$$\begin{cases} \hat{H}_x = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} M \omega_x^2 x^2 \\ \hat{H}_y = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2} M \omega_y^2 y^2 \\ \hat{H}_z = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2} M \omega_z^2 z^2 \end{cases}$$

(11.66)

Si aplicamos ahora la teoría general de sistemas cuánticos separables que vimos en la **sección 6.7**, una base ortonormal del espacio de las funciones de onda de nuestro sistema estará compuesta por las autofunciones de la energía

$$\Phi_{n_x, n_y, n_z}(\mathbf{r}) = \Phi_{n_x}^{(\omega_x)}(x) \Phi_{n_y}^{(\omega_y)}(y) \Phi_{n_z}^{(\omega_z)}(z) \quad \text{con } n_i = 0, 1, 2, \dots$$

(11.67)

donde $\Phi_n^{(\omega)}$ es la n -ésima autofunción normalizada de la energía de un oscilador armónico *unidimensional* de masa M y pulsación ω . La autoenergía correspondiente a la autofunción $\Phi_{n_x, n_y, n_z}(\mathbf{r})$ será igual a la suma de las energías de oscilación parciales en cada dirección del espacio:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_z.$$

(11.68)

Estas autofunciones están entonces caracterizadas por tres números cuánticos, $\{n_x, n_y, n_z\}$, que están relacionados con la dinámica de la partícula en cada coordenada espacial. Observe que $\Phi_{n_x, n_y, n_z}(\mathbf{r})$ es autofunción simultánea de los operadores $\hat{H}_x, \hat{H}_y, \hat{H}_z$ que, en el presente caso, constituyen un CCOC: la base de representación formada por estas autofunciones es la asociada a este conjunto completo de operadores compatibles (en caso de necesitarlo, repase la discusión de la **sección 7.2**).

El nivel energético N (por convenio, $N = n_x + n_y + n_z = 0, 1, 2, \dots$) estará formado por todas aquellas autofunciones para las que se cumple que $E_{n_x, n_y, n_z} = E_N$, y todas las combinaciones lineales de esas autofunciones. Como consecuencia, el sistema tendrá niveles energéticos degenerados si hay diferentes combinaciones

de números cuánticos que den en (11.68) la misma energía. El siguiente ejemplo ilustra esta situación.

EJEMPLO 11.g. Degeneración en un oscilador tridimensional

La energía potencial de un oscilador armónico tridimensional de masa M es

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}M(\omega_x^2x^2 + \omega_y^2y^2 + \omega_z^2z^2),$$

siendo $\omega_x = \omega_y = \omega$ y $\omega_z = 2\omega$. Puesto que las tres pulsaciones ω_i no son iguales, se dice que éste es un *oscilador armónico anisotropo*.

- a) Obtenga las energías permitidas del sistema.
- b) Halle la degeneración de los cinco primeros niveles energéticos del sistema.

Solución:

- a) Si aplicamos (11.68), las energías permitidas están dadas por

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)2\hbar\omega$$

y reordenando términos

$$E_{n_x, n_y, n_z} = (n_x + n_y + 2n_z + 2)\hbar\omega \quad \text{con } n_i = 0, 1, 2, 3, \dots$$

- b) Asignando de manera ordenada valores a los números cuánticos $\{n_x, n_y, n_z\}$, los cinco primeros niveles energéticos son

N	E_N	$\{n_x, n_y, n_z\}$	g_N
0	$2\hbar\omega$	$\{0, 0, 0\}$	1
1	$3\hbar\omega$	$\{1, 0, 0\}, \{0, 1, 0\}$	2
2	$4\hbar\omega$	$\{2, 0, 0\}, \{0, 2, 0\}, \{1, 1, 0\}, \{0, 0, 1\}$	4
3	$5\hbar\omega$	$\{3, 0, 0\}, \{0, 3, 0\}, \{2, 1, 0\}, \{1, 2, 0\}, \{1, 0, 1\}, \{0, 1, 1\}$	6
4	$6\hbar\omega$	$\{4, 0, 0\}, \{0, 4, 0\}, \{3, 1, 0\}, \{1, 3, 0\}, \{2, 2, 0\}, \{2, 0, 1\}, \{0, 2, 1\}, \{1, 1, 1\}, \{0, 0, 2\}$	9

donde g_N es la degeneración del nivel N -ésimo. Observe que la energía del nivel fundamental es $E_0 = 2\hbar\omega$ (energía del punto cero) y que es no degenerado.

§ 2. Un caso particularmente importante es aquél en el que $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$ (*oscilador armónico isótropo tridimensional*). La energía potencial es

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}M\omega^2(x^2 + y^2 + z^2) = \frac{1}{2}M\omega^2r^2 \quad (11.69)$$

que corresponde a la fuerza recuperadora central

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -M\omega^2(x\mathbf{u}_x + y\mathbf{u}_y + z\mathbf{u}_z) = -M\omega^2\mathbf{r} \quad (11.70)$$

Debido a la separabilidad del sistema en tres subsistemas unidimensionales, una base de autoenergías está compuesta por las funciones normalizadas

$$\Phi_{n_x, n_y, n_z}(\mathbf{r}) = \Phi_{n_x}(x) \Phi_{n_y}(y) \Phi_{n_z}(z), \quad (11.71)$$

siendo Φ_n la n -ésima autofunción normalizada de un oscilador armónico unidimensional de pulsación ω y masa M . Por tanto, usando (11.12), (11.13) y que $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$,

$$\Phi_{n_x, n_y, n_z}(\mathbf{r}) = \frac{\mathfrak{h}_{n_x}(x/\alpha) \mathfrak{h}_{n_y}(y/\alpha) \mathfrak{h}_{n_z}(z/\alpha)}{\left(2^{n_x+n_y+n_z} n_x! n_y! n_z! \alpha^3 \pi^{3/2}\right)^{1/2}} \exp\left(-\frac{r^2}{2\alpha^2}\right), \quad (11.72)$$

con $\alpha = \sqrt{\hbar/(M\omega)}$. La autoenergía correspondiente será entonces

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega. \quad (11.73)$$

Como consecuencia, la energía E_N y la degeneración g_N del nivel N -ésimo del sistema es ($N = n_x + n_y + n_z$)

$$E_N = \left(N + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega ; \quad g_N = \frac{(N+1)(N+2)}{2} \quad \text{con } N = 0, 1, 2, \dots$$

(11.74)

ya que hay $g_N = (N+1)(N+2)/2$ maneras de sumar tres números naturales (incluido el cero) dando como resultado N . Por ejemplo, los números cuánticos $\{n_x, n_y, n_z\}$ correspondientes al nivel $N = 3$ (con $E_3 = 9\hbar\omega/2$ y $g_3 = 10$) son: $\{3, 0, 0\}, \{0, 3, 0\}, \{0, 0, 3\}, \{2, 1, 0\}, \{2, 0, 1\}, \{0, 2, 1\}, \{1, 2, 0\}, \{1, 0, 2\}, \{0, 1, 2\}, \{1, 1, 1\}$.

§ 3. Puesto que la fuerza de un oscilador isótropo es central, podemos también obtener el espectro de energías del sistema usando las técnicas que estudiamos en la **sección 8.5**. Como $\{H, L^2, L_z\}$ es un CCOC del sistema, existe una base de representación formada por autofunciones de estos tres operadores. Consideremos el nivel N -ésimo y sea

$$\Phi_{n_r, \ell, m}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{u}_{n_r, \ell}(r)}{r} \mathbf{Y}_{\ell, m}(\theta, \varphi), \quad \text{con} \begin{cases} n_r = 1, 2, \dots \\ \ell = 0, 1, 2, \dots \\ m = -\ell, \dots, 0, \dots, +\ell \end{cases} \quad (11.75)$$

una de estas autofunciones de $\{H, L^2, L_z\}$. Aquí, $Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$ es un armónico esférico y $u_{n_r,\ell}(r)$ satisface la ecuación de Schrödinger radial *reducida* en el intervalo $r \in [0, \infty)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2} M \omega^2 r^2 + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2Mr^2} \right] u_{n_r,\ell}(r) = E_{n_r,\ell} u_{n_r,\ell}(r) \quad (11.76)$$

(recuerde la **ecuación 8.64** del epígrafe §8.5.3). Cuando $r \rightarrow 0$, la autofunción $u_{n_r,\ell}(r)$ es proporcional a $r^{\ell+1}$ (compruébelo). A su vez, $\Phi_{n_r,\ell,m}(\mathbf{r})$ tiene que ser combinación lineal de las autofunciones $\Phi_{n_x,n_y,n_z}(\mathbf{r})$ con igual energía dadas por la ecuación (11.73). Ello implica que $u_{n_r,\ell}(r)$ es igual a un polinomio multiplicado por $\exp[-r^2/(2\alpha)^2]$. Esto nos permite escribir que

$$u_{n_r,\ell}(r) = r^{\ell+1} f\left(\frac{r}{\alpha}\right) \exp\left(-\frac{r^2}{2\alpha^2}\right) \quad (11.77)$$

donde $f(\rho)$ es un polinomio con término independiente no nulo. Si sustituimos (11.77) en la ecuación (11.76), operamos y simplificamos, se llega a que $f(\rho)$ satisface la ecuación diferencial

$$\frac{\rho}{2} \frac{d^2 f(\rho)}{d\rho^2} + (\ell+1-\rho^2) \frac{df(\rho)}{d\rho} - \left(\ell + \frac{3}{2} - \frac{E_{n_r,\ell}}{\hbar\omega} \right) \rho f(\rho) = 0 \quad (11.78)$$

La solución general de (11.78) es, salvo constante multiplicativa,

$$f(\rho) = F\left[c_{n_r,\ell}, \ell + \frac{3}{2}, \rho^2\right], \quad \text{con } c_{n_r,\ell} \equiv \frac{1}{2} \left(\ell + \frac{3}{2} - \frac{E_{n_r,\ell}}{\hbar\omega} \right)$$

y donde F es la llamada *función hipergeométrica*, definida como

$$F[a, b, x] \equiv 1 + \frac{a}{b}x + \frac{a(a+1)}{b(b+1)2!}x^2 + \frac{a(a+1)(a+2)}{b(b+1)(b+2)3!}x^3 + \dots \quad (11.79)$$

Como hemos anticipado, $f(\rho)$ ha de ser un polinomio, por lo que la serie $F[c_{n_r,\ell}, \ell + 3/2, \rho^2]$ debe truncarse en algún momento. Ello sólo es posible si $c_{n_r,\ell}$ es igual a un entero no positivo, esto es, si $c_{n_r,\ell} = 1 - n_r$ con $n_r = 1, 2, \dots$. Entonces, $f(\rho)$ es un polinomio de grado $2n_r - 2$ con todos los monomios de grado par. La igualdad $c_{n_r,\ell} = 1 - n_r$ se traduce directamente en que la autoenergía $E_{n_r,\ell}$ es

$$E_{n_r,\ell} = \left[2(n_r - 1) + \ell + \frac{3}{2} \right] \hbar\omega, \quad \text{con } \begin{cases} n_r = 1, 2, \dots \\ \ell = 0, 1, 2, \dots \end{cases} \quad (11.80)$$

Las autofunciones correspondientes están dadas por

$$\boxed{\Phi_{n_r,\ell,m}(\mathbf{r}) = \mathcal{C}_{n_r,\ell} \text{F} \left[1 - n_r, \ell + \frac{3}{2}, \frac{r^2}{\alpha^2} \right] r^\ell e^{-r^2/(2\alpha^2)} Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)} \quad (11.81)$$

con $\mathcal{C}_{n_r,\ell}$ una constante de normalización.

Observe que hay distintas combinaciones de n_r y ℓ que dan lugar a la misma energía, por lo que el oscilador armónico isótropo exhibe el fenómeno de *degeneración accidental*, que se presentó en §8.5.5.

§ 4. Introduzcamos ahora el número cuántico $N = 2(n_r - 1) + \ell$, que caracteriza el nivel energético, y que puede tomar los valores $N = 0, 1, 2, \dots$ Entonces, como ya sabíamos,

$$E_N = \left(N + \frac{3}{2} \right) \hbar\omega, \quad \text{con } N = 0, 1, 2, \dots$$

Una base del nivel N -ésimo estará formada por las autofunciones $\Phi_{n_r,\ell,m}(\mathbf{r})$ cuyos número cuánticos verifiquen que

$$\begin{aligned} \ell &= N, N-2, \dots, \ell_{\min} \\ m &= -\ell, \dots, 0, \dots, +\ell \quad \text{con } \ell_{\min} = \begin{cases} 0 & \text{si } N \text{ es par} \\ 1 & \text{si } N \text{ es impar} \end{cases} \\ n_r &= 1 + (N - \ell)/2 \end{aligned} \quad (11.82)$$

Como consecuencia,

$$g_N = \sum_{\substack{0 \leq \ell \leq N \\ \ell \text{ par o impar}}} (2\ell + 1) = \frac{(N+1)(N+2)}{2},$$

que es el resultado que ya obtuvimos en el epígrafe anterior.

Si simbolizamos el nivel N -ésimo mediante el número cuántico n_r y la letra correspondiente a ℓ (s, p, d, f, \dots), tenemos en definitiva que la estructura de los niveles energéticos del oscilador armónico tridimensional viene dada por la tabla 11.1. donde se ha indicado con g_N el número del conjunto de $2\ell + 1$ autofunciones $\Phi_{n_r,\ell,m}(\mathbf{r})$ correspondientes a una base del nivel N .

N	E_N	g_N	Nivel (n_r, ℓ)	Autoestados (n_x, n_y, n_z)
0	$3\hbar\omega/2$	1	$1s$	(0,0,0)
1	$5\hbar\omega/2$	3	$1p$	(1,0,0) (0,1,0) (0,0,1)
2	$7\hbar\omega/2$	6	$2s, 1d$	(1,1,0) (1,0,1) (0,1,1) (2,0,0) (0,2,0) (0,0,2)
3	$9\hbar\omega/2$	10	$2p, 1f$	(1,1,1) (1,2,0) (1,0,2) (0,1,2) (2,1,0) (2,0,1) (0,2,0) (3,0,0) (0,3,0) (0,0,3)
4	$11\hbar\omega/2$	15	$3s, 2d, 1g$	(2,1,1) (1,2,1) (1,1,2) (2,2,0) (2,0,2) (0,2,2) (1,3,0) (1,0,3) (0,1,3) (3,1,0) (3,0,1) (0,3,1) (4,0,0) (0,4,0) (0,0,4)
...

Tabla 11.1 .- Niveles energéticos del oscilador armónico tridimensional**EJEMPLO 11.h. Primer nivel excitado del oscilador isótropo**

Consideremos el primer nivel excitado ($N = 1$) de un oscilador armónico isótropo tridimensional de masa M y pulsación ω .

Si se usa la representación correspondiente al CCOC $\{\hat{H}_x, \hat{H}_y, \hat{H}_z\}$, la base ortonormal de tal nivel viene dada por

$$\mathcal{B} = \{\Phi_{1,0,0}(\mathbf{r}), \Phi_{0,1,0}(\mathbf{r}), \Phi_{0,0,1}(\mathbf{r})\}$$

Por otra parte, si usamos la representación asociada al CCOC $\{\hat{H}, \hat{L}^2, L_z\}$, la base ortonormal del nivel $N = 1$ es

$$\mathcal{B}_{\text{esf}} = \left\{ \Phi_{1p,m}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} u_{1p}(r) Y_{1,m}(\theta, \varphi), \quad \text{con } m = 1, 0, -1 \right\}.$$

Obtenga las funciones normalizadas $\Phi_{1p,m}(\mathbf{r})$ y expréselas como combinación lineal de las autofunciones de la base \mathcal{B} .

Datos:

$$Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad ; \quad Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} \quad ; \quad \int_0^\infty x^4 e^{-x^2} dx = \frac{3\sqrt{\pi}}{8}$$

Solución:

En general, la función $u_{n_r, \ell}(r)$ para un oscilador isótropo tridimensional es igual a $r^{\ell+1} \exp[-r^2/(2\alpha^2)]$ multiplicada por un polinomio de grado $2n_r - 2$. Como en este caso $\ell = n_r = 1$, la forma de dicha función es

$$u_{1p}(r) = \mathcal{A} r^2 e^{-r^2/(2\alpha^2)},$$

donde \mathcal{A} es una constante de normalización. Como $\int_0^{+\infty} |u_{1p}(r)|^2 dr = 1$ tenemos

$$1 = \mathcal{A}^2 \int_0^{+\infty} r^4 e^{-r^2/\alpha^2} dr = \mathcal{A}^2 \alpha^5 \int_0^{+\infty} \rho^4 e^{-\rho^2} d\rho = \frac{3\sqrt{\pi}\alpha^5}{8} \mathcal{A}^2.$$

Por tanto, si \mathcal{A} es real y positiva,

$$\mathcal{A} = \sqrt{\frac{8}{3\sqrt{\pi}\alpha^5}},$$

de manera que las autofunciones de \hat{H}, \hat{L}^2 y \hat{L}_z del nivel $N = 1$ son:

$$\Phi_{1p,m}(\mathbf{r}) = \mathcal{A} e^{-r^2/(2\alpha^2)} r Y_{1,m}(\theta, \varphi), \quad \text{con } m = 1, 0, -1.$$

Por otra parte, las autofunciones de \mathcal{B} son, como es inmediato comprobar a partir de (11.71) y de la forma general de las autofunciones de un oscilador unidimensional,

$$\Phi_{1,0,0}(\mathbf{r}) = \mathcal{B} e^{-r^2/(2\alpha^2)} x \quad ; \quad \Phi_{0,1,0}(\mathbf{r}) = \mathcal{B} e^{-r^2/(2\alpha^2)} y \quad ; \quad \Phi_{0,0,1}(\mathbf{r}) = \mathcal{B} e^{-r^2/(2\alpha^2)} z$$

donde \mathcal{B} es otra constante de normalización.

Teniendo en cuenta las expresiones de los armónicos esféricos y la relación entre las coordenadas cartesianas (x, y, z) y las esféricas (r, θ, φ) , las funciones $\Phi_{1p,m}(\mathbf{r})$ pueden reescribirse como:

$$\begin{aligned} \Phi_{1p,+1}(\mathbf{r}) &= -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \mathcal{A} e^{-r^2/(2\alpha^2)} \frac{r \sin \theta}{\sqrt{2}} e^{+i\varphi} = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \mathcal{A} e^{-r^2/(2\alpha^2)} \frac{x + iy}{\sqrt{2}} \\ \Phi_{1p,-1}(\mathbf{r}) &= +\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \mathcal{A} e^{-r^2/(2\alpha^2)} \frac{r \sin \theta}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi} = +\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \mathcal{A} e^{-r^2/(2\alpha^2)} \frac{x - iy}{\sqrt{2}} \\ \Phi_{1p,0}(\mathbf{r}) &= +\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \mathcal{A} e^{-r^2/(2\alpha^2)} r \cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \mathcal{A} e^{-r^2/(2\alpha^2)} z. \end{aligned}$$

De la última ecuación tenemos que

$$\Phi_{1p,0}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{\mathcal{A}}{\mathcal{B}} \Phi_{0,0,1}(\mathbf{r})$$

pero como todas las autofunciones están normalizadas,

$$\mathcal{B} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \mathcal{A}.$$

Así, llegamos directamente a que

$$\begin{aligned} \Phi_{1p,+1}(\mathbf{r}) &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \Phi_{1,0,0}(\mathbf{r}) - \frac{i}{\sqrt{2}} \Phi_{0,1,0}(\mathbf{r}) \\ \Phi_{1p,-1}(\mathbf{r}) &= +\frac{1}{\sqrt{2}} \Phi_{1,0,0}(\mathbf{r}) - \frac{i}{\sqrt{2}} \Phi_{0,1,0}(\mathbf{r}) \\ \Phi_{1p,0}(\mathbf{r}) &= \Phi_{0,0,1}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

que es la relación que se solicitaba.

PROBLEMAS PROPUESTOS

PROBLEMA 11.1. *Oscilador armónico truncado*

Una partícula de masa M está sometida a la acción de una fuerza que deriva de la siguiente energía potencial

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } x < 0 \\ \frac{1}{2}M\omega^2x^2 & \text{si } x > 0 \end{cases}$$

Demuestre que las energías permitidas de este sistema son

$$E_n = \left(2n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega \quad \text{con } n = 0, 1, 2, \dots$$

¿Cuáles serán las autofunciones correspondientes?

PROBLEMA 11.2. *Desigualdad de Heisenberg en el oscilador armónico*

Simbolicemos por $(\Delta x)_n$ y $(\Delta p_x)_n$ a la incertidumbre de la posición y del momento lineal, respectivamente, en el n -ésimo estado estacionario de un oscilador armónico. Demuestre que

$$(\Delta x)_n(\Delta p_x)_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar.$$

Comente el resultado para $n = 0$ en términos del cumplimiento de la desigualdad de Heisenberg $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$.

Ayuda: La solución es inmediata si usa el teorema del virial.

PROBLEMA 11.3. *Evolución temporal en un oscilador armónico III*

En el instante $t = 0$, la función de onda normalizada de un oscilador armónico de masa M y frecuencia natural ω es

$$\Psi(x, 0) = \sqrt{\frac{1}{4}}\Phi_0(x) - i\sqrt{\frac{3}{4}}\Phi_2(x),$$

donde $\Phi_n(x)$ es la n -ésima autofunción normalizada de la energía.

- a) Al medir la energía de la partícula, ¿qué valores pueden obtenerse y con qué probabilidad? Evalúe el valor esperado y la incertidumbre de la energía para el estado cuántico $|\Psi\rangle$.
- b) Demuestre que, a pesar de que $\Psi(x, t)$ es la función de onda de un estado no estacionario, los valores medios de x y p_x son cero para cualquier instante de tiempo.

- c) Obtenga la evolución temporal de los valores medios de las energías cinética y potencial.
- d) Halle, para cualquier instante de tiempo, la densidad de corriente de probabilidad $J_x(x, t)$.

PROBLEMA 11.4. Valores medios en un oscilador armónico

Una partícula de masa M sometida a la acción de una fuerza armónica de frecuencia ω se encuentra en un estado genérico $\Psi(x, t)$. Si A es un observable de la partícula, demuestre que su valor medio evoluciona en el tiempo de acuerdo con la ley general

$$\langle A \rangle_t = A_0 + B_0 f(t),$$

donde A_0 y B_0 son constantes y $f(t)$ una función temporal con periodo $T = 2\pi/\omega$. ¿Es la función $f(t)$ necesariamente armónica?

PROBLEMA 11.5. Energía de un estado coherente

Consideremos el estado coherente $\Psi_z(x)$ de un oscilador armónico de masa M y pulsación ω . Obtenga la actuación del operador \hat{H} sobre dicha función de onda. Como consecuencia, demuestre que el valor medio de la energía y la incertidumbre en tal estado son

$$\langle H \rangle = \left(|z|^2 + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad \text{y} \quad \Delta H = |z| \hbar \omega.$$

Sugerencia: Utilice la expresión de $\Psi_z(x)$ como combinación lineal de autofunciones de la energía.

PROBLEMA 11.6. (!) La aproximación armónica

Una partícula de masa M se mueve en la región $x \in (0, \infty)$ bajo la acción de una fuerza que deriva de la energía potencial (llamada de *Lenard-Jones*)

$$V(x) = V_0 \left[\left(\frac{x_0}{x} \right)^{12} - 2 \left(\frac{x_0}{x} \right)^6 \right] \quad \text{si } x > 0 \quad (11.83)$$

donde V_0 y x_0 son constantes positivas con dimensiones de energía y longitud, respectivamente.

- a) Represente $V(x)$ y compruebe que alcanza su mínimo absoluto en $x = x_0$ tomando el valor $V(x_0) = -V_0$.
- b) Describa la estructura del espectro de energías de la partícula.
- c) Si hacemos un desarrollo en serie de Taylor hasta segundo orden de la energía potencial $V(x)$ en torno a x_0 tenemos que

$$V(x) = -V_0 + \frac{1}{2} K (x - x_0)^2 \quad \text{si } x \sim x_0$$

donde $K = V''(x_0)$. Como consecuencia, la evolución cuántica de la partícula puede aproximarse por la de un oscilador armónico de frecuencia $\omega = \sqrt{K/M}$ centrado en $x = x_0$ (siempre y cuando su función de onda esté muy concentrada en torno a $x = x_0$). Bajo esta *aproximación armónica*, ¿cuáles son las energías de los estados estacionarios de la partícula? ¿Y las autofunciones correspondientes?

- d) Analice críticamente bajo qué condiciones es válida la aproximación armónica que hemos descrito en el apartado anterior. En particular, demuestre que los estados estacionarios de más baja energía se podrán estudiar bajo esta aproximación si $\hbar\omega \ll V_0$.

PROBLEMA 11.7. Evolución temporal en un oscilador tridimensional

Una partícula de masa M se mueve en tres dimensiones bajo la acción de un potencial de oscilador armónico isótropo de frecuencia ω . En el instante $t = 0$ su función de onda es

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{3}} (\Phi_{1,0,0}(\mathbf{r}) + \Phi_{1,1,+1}(\mathbf{r}) + \Phi_{1,1,-1}(\mathbf{r})),$$

donde $\Phi_{n_r, \ell, m}(\mathbf{r})$ es la autofunción simultánea de \hat{H} , de \hat{L}^2 y de \hat{L}_z con autovalores $E_{n_r, \ell}$, $\ell(\ell+1)\hbar^2$ y $m\hbar$, respectivamente.

- a) Al medir la energía ¿qué valores pueden obtenerse y con qué probabilidad?
- b) Obtenga los valores medios de L_z y L^2 . Calcule también sus incertidumbres.
- c) Indique cuál es la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ en cualquier instante de tiempo
- d) Demuestre que, a pesar de que el estado cuántico no es estacionario, el valor medio de la coordenada radial r es constante en el tiempo. ¿Sucede lo mismo para los valores medios de las componentes x, y, z de la posición?

PROBLEMA 11.8. Condición de degeneración en un oscilador 2D

Una partícula de masa M se mueve en dos dimensiones con energía potencial

$$V(x, y) = \frac{1}{2} M (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2)$$

Obtenga la condición necesaria y suficiente que han de cumplir las frecuencias ω_x , y ω_y para que existen niveles energéticos degenerados en el sistema.

PROBLEMA 11.9. (!) El oscilador armónico isótropo bidimensional

Consideremos una partícula de masa M que se mueve en dos dimensiones bajo la acción de una fuerza que deriva de la energía potencial

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} M \omega^2 r^2 = \frac{1}{2} M \omega^2 (x^2 + y^2),$$

que corresponde a un *oscilador armónico isótropo en dos dimensiones*.

- a) Demuestre que las energías de los niveles energéticos del sistema son

$$E_N = (N + 1) \hbar\omega \quad \text{con } N = 0, 1, 2, 3, \dots$$

y que la degeneración del nivel N -ésimo es

$$g_N = N + 1.$$

Obtenga las autofunciones de la energía $\Phi_{n_x, n_y}(\mathbf{r})$ correspondientes al nivel N -ésimo en términos de las autofunciones del oscilador unidimensional.

- b) En este sistema físico, la componente z del momento angular

$$L_z = xp_y - yp_x$$

es una constante del movimiento. Ello implica que es posible encontrar estados estacionarios con energía E_N en los que L_z esté bien definido. Obtenga los posibles valores de L_z para los tres primeros niveles energéticos del sistema.

- c) Generalice los resultados del apartado anterior para el nivel N -ésimo. En concreto, demuestre que los valores que puede tomar L_z en dicho nivel son

$$\begin{array}{ll} 0, \pm 2\hbar, \dots, \pm N\hbar & \text{si } N \text{ es par} \\ \pm \hbar, \pm 3\hbar, \dots, \pm N\hbar & \text{si } N \text{ es impar} \end{array}$$

de lo que se concluye que $\{\hat{H}, \hat{L}_z\}$ es un CCOC de este sistema físico.

Ayuda: Exprese las autofunciones de la energía en coordenadas polares y recuerde que la actuación del operador \hat{L}_z en dichas coordenadas es

$$\hat{L}_z \Psi(\mathbf{r}) = -i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial \varphi}.$$

PROBLEMA 11.10. (*) Operadores \hat{a} y \hat{a}^\dagger en un oscilador isótropo

El formalismo de operadores de creación y destrucción puede extenderse a un oscilador armónico en varias dimensiones. Basta para ello definir los operadores para cada una de las oscilaciones en una dirección espacial. En particular, en un oscilador armónico isótropo bidimensional de frecuencia ω y masa M , podemos definir

$$\begin{aligned} \hat{a}_x^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\alpha} \hat{x} - i \frac{\alpha}{\hbar} \hat{p}_x \right) & ; \quad \hat{a}_y^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\alpha} \hat{y} - i \frac{\alpha}{\hbar} \hat{p}_y \right) \\ \hat{a}_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\alpha} \hat{x} + i \frac{\alpha}{\hbar} \hat{p}_x \right) & ; \quad \hat{a}_y &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\alpha} \hat{y} + i \frac{\alpha}{\hbar} \hat{p}_y \right), \end{aligned}$$

con $\alpha = \sqrt{\hbar/(M\omega)}$. Simbolicemos por $|\Phi_{n_x, n_y}\rangle$ a un autoestado normalizado de \hat{H}_x y de \hat{H}_y con energía $E_{n_x, n_y} = (n_x + n_y + 1) \hbar\omega$.

- a) Exprese el operador \hat{L}_z correspondiente a la componente z del momento angular en términos de los operadores $\{\hat{a}_x^\dagger, \hat{a}_y^\dagger, \hat{a}_x, \hat{a}_y\}$.
- b) Obtenga el resultado de la actuación de \hat{L}_z sobre el estado $|\Phi_{n_x, n_y}\rangle$. Pruebe que $\hat{L}_z|\Phi_{n_x, n_y}\rangle$ también es un autoestado de \hat{H} perteneciente al nivel energético $N = n_x + n_y$.
- c) Demuestre así que: i) $|\Phi_{0,0}\rangle$ es autoestado de \hat{L}_z con autovalor nulo; ii) los autoestados $\{|\Phi_{1,0}\rangle, |\Phi_{0,1}\rangle\}$ se pueden escribir como combinación lineal de dos autoestados simultáneos de \hat{H} y \hat{L}_z . Compruebe que obtenemos los mismos resultados que en el apartado b) del problema anterior.

APÉNDICES

APÉNDICE A

ANÁLISIS VECTORIAL

En este apéndice presentaremos una serie de definiciones y resultados del análisis vectorial de utilización habitual en física cuántica. La gran mayoría de los contenidos de este apéndice han de ser conocidos de asignaturas de primer y segundo curso de grado. Debido a que este apéndice está concebido como referencia omitiremos cualquier demostración, limitándonos a un mero enunciado de los resultados más relevantes y útiles para nosotros.

A.1. VECTORES. OPERACIONES CON VECTORES

- Consideremos el espacio euclídeo \mathbb{R}^3 en el que definimos tres vectores $\mathbf{u}_x, \mathbf{u}_y, \mathbf{u}_z$ de longitud unidad, orientados en direcciones perpendiculares entre sí y que forman un triedro dextrógiro (un tornillo que se enrosca a derechas avanzaría en la dirección de \mathbf{u}_z si lo hacemos girar de \mathbf{u}_x a \mathbf{u}_y por el camino más corto).
- En el conjunto de vectores de posición dados por

$$\mathbf{a} = a_x \mathbf{u}_x + a_y \mathbf{u}_y + a_z \mathbf{u}_z \quad \text{con } a_{x,y,z} \in \mathbb{R} \quad (\text{A.1})$$

definimos las siguientes operaciones:

a) Suma de vectores:

$$\mathbf{a} + \mathbf{b} = (a_x + b_x) \mathbf{u}_x + (a_y + b_y) \mathbf{u}_y + (a_z + b_z) \mathbf{u}_z \quad (\text{A.2})$$

b) Producto por un escalar λ :

$$\lambda \mathbf{a} = \lambda a_x \mathbf{u}_x + \lambda a_y \mathbf{u}_y + \lambda a_z \mathbf{u}_z \quad (\text{A.3})$$

c) Producto vectorial o interno:

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = (a_y b_z - a_z b_y) \mathbf{u}_x + (a_z b_x - a_x b_z) \mathbf{u}_y + (a_x b_y - a_y b_x) \mathbf{u}_z \quad (\text{A.4})$$

d) Producto escalar o externo:

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z \quad (\text{A.5})$$

A su vez, definimos el módulo de un vector como

$$|\mathbf{a}| = \sqrt{\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}} = \sqrt{|a_x|^2 + |a_y|^2 + |a_z|^2}, \quad (\text{A.6})$$

diciéndose que un vector es **unitario** si es de módulo unidad.

- Todas estas operaciones satisfacen las siguientes relaciones básicas:

$$\mathbf{a} + \mathbf{b} = \mathbf{b} + \mathbf{a} \quad (\mathbf{a} + \mathbf{b}) + \mathbf{c} = (\mathbf{a} + \mathbf{b}) + \mathbf{c}$$

$$\lambda(\mu\mathbf{a}) = (\lambda\mu)\mathbf{a} \quad (\mathbf{a} + \mathbf{b}) \cdot \mathbf{c} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{c} + \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}$$

$$(\lambda + \mu)\mathbf{a} = \lambda\mathbf{a} + \mu\mathbf{a} \quad \lambda(\mathbf{a} + \mathbf{b}) = \lambda\mathbf{a} + \lambda\mathbf{b}$$

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = -\mathbf{b} \times \mathbf{a} \quad (\mathbf{a} + \mathbf{b}) \times \mathbf{c} = \mathbf{a} \times \mathbf{c} + \mathbf{b} \times \mathbf{c}$$

$$(\lambda\mathbf{a}) \times \mathbf{b} = \lambda(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \quad (\lambda\mathbf{a}) \cdot \mathbf{b} = \lambda(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \quad (\text{A.8})$$

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} \quad \mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = -(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})\mathbf{c} + (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})\mathbf{b}$$

$$|\lambda\mathbf{a}| = |\lambda||\mathbf{a}| \quad \mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b} \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{a}) = \mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b})$$

$$|\mathbf{a}| = 0 \iff \mathbf{a} = 0 \quad (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{d}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{d}) - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{d})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{c})$$

- Finalmente, dada una dirección del espacio determinada por el vector unitario \mathbf{u} , todo vector \mathbf{G} puede escribirse de manera única como la suma de dos vectores \mathbf{G}_{\parallel} y \mathbf{G}_{\perp} que son paralelo y perpendicular a \mathbf{u} , respectivamente:

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}_{\parallel} + \mathbf{G}_{\perp} \quad \text{con} \quad \begin{cases} \mathbf{G}_{\parallel} = \{\mathbf{u} \cdot \mathbf{G}\}\mathbf{u} \\ \mathbf{G}_{\perp} = \{\mathbf{u} \times \mathbf{G}\} \times \mathbf{u} \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

tal y como puede apreciar en la **FIG. A-1**. Al vector \mathbf{G}_{\parallel} se le denomina proyección del vector \mathbf{G} sobre la dirección \mathbf{u} , mientras que \mathbf{G}_{\perp} sería la proyección de \mathbf{G} sobre el plano perpendicular o normal a \mathbf{u} .

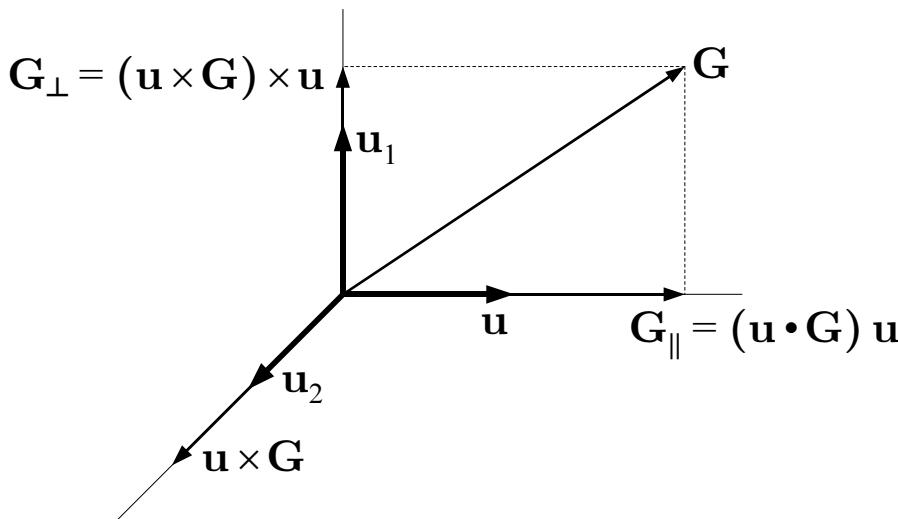


Figura A-1. Ilustración de la igualdad (A.9)

- La interpretación geométrica de los productos escalar y vectorial es:

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = |\mathbf{a}| |\mathbf{b}| \cos \theta \\ |\mathbf{a} \times \mathbf{b}| = |\mathbf{a}| |\mathbf{b}| \sin \theta \end{array} \right\} \quad \text{con } \theta \equiv (\widehat{\mathbf{a}, \mathbf{b}}) \in [0, \pi] \quad (A.7)$$

$|\mathbf{a} \times \mathbf{b}|$ = área del paralelogramo de lados \mathbf{a} y \mathbf{b}

$|\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})|$ = volumen del paralelepípedo de lados $\{\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}\}$

A.2. COORDENADAS ORTOGONALES

- Un conjunto de tres vectores reales unitarios $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3\}$, cuyos valores pueden depender localmente del punto $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$, determinan un sistema de coordenadas ortogonales si son perpendiculares entre sí. Los vectores se ordenan de manera que su orientación relativa sea dextrógira, esto es, para que

$$\mathbf{u}_1 \times \mathbf{u}_2 = \mathbf{u}_3 , \quad \mathbf{u}_2 \times \mathbf{u}_3 = \mathbf{u}_1 , \quad \mathbf{u}_3 \times \mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2$$

Los sistemas de coordenadas ortogonales más comunes se exponen a continuación.

Coordenadas rectangulares o cartesianas

- Los **vectores unitarios** que definen el sistema de coordenadas son:

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_x ; \quad \mathbf{u}_2 = \mathbf{u}_y ; \quad \mathbf{u}_3 = \mathbf{u}_z \quad (\text{A.10})$$

de donde todo vector de posición \mathbf{r} puede entonces escribirse como

$$\mathbf{r} = x\mathbf{u}_x + y\mathbf{u}_y + z\mathbf{u}_z \quad (\text{A.11})$$

siendo $\{x, y, z\}$ las coordenadas cartesianas del punto.

- En este sistema de coordenadas, los **elementos de volumen y longitud** (orientada) diferenciales son

$$\begin{aligned} d^3\mathbf{r} &= dx dy dz \\ d\mathbf{r} &= \mathbf{u}_x dx + \mathbf{u}_y dy + \mathbf{u}_z dz \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

de donde el **elemento de distancia** diferencial es

$$d\ell \equiv |d\mathbf{r}| = \sqrt{(dx)^2 + (dy)^2 + (dz)^2} \quad (\text{A.13})$$

Coordenadas esféricas

- Los **vectores unitarios** correspondientes (véase la **Fig. A.2**) son:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_1 &= \mathbf{u}_r \equiv (\sin \theta \cos \varphi)\mathbf{u}_x + (\sin \theta \sin \varphi)\mathbf{u}_y + (\cos \theta)\mathbf{u}_z \\ \mathbf{u}_2 &= \mathbf{u}_\theta \equiv (\cos \theta \cos \varphi)\mathbf{u}_x + (\cos \theta \sin \varphi)\mathbf{u}_y - (\sin \theta)\mathbf{u}_z \\ \mathbf{u}_3 &= \mathbf{u}_\varphi \equiv -(\sin \varphi)\mathbf{u}_x + (\cos \varphi)\mathbf{u}_y \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

siendo $\theta \in [0, \pi]$ el ángulo que forma el vector \mathbf{u}_z con el vector de posición \mathbf{r} (ángulo polar) y $\varphi \in [0, 2\pi]$ el que forma el vector \mathbf{u}_x con la proyección de \mathbf{r} sobre el plano XY (ángulo azimutal). Como consecuencia:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_x &= (\sin \theta \cos \varphi)\mathbf{u}_r + (\cos \theta \cos \varphi)\mathbf{u}_\theta - (\sin \varphi)\mathbf{u}_\varphi \\ \mathbf{u}_y &= (\sin \theta \sin \varphi)\mathbf{u}_r + (\cos \theta \sin \varphi)\mathbf{u}_\theta + (\cos \varphi)\mathbf{u}_\varphi \\ \mathbf{u}_z &= (\cos \theta)\mathbf{u}_r - (\sin \theta)\mathbf{u}_\theta \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Por tanto, todo vector de posición puede escribirse como

$$\mathbf{r} = (r \sin \theta \cos \varphi)\mathbf{u}_x + (r \sin \theta \sin \varphi)\mathbf{u}_y + (r \cos \theta)\mathbf{u}_z = r\mathbf{u}_r \quad (\text{A.16})$$

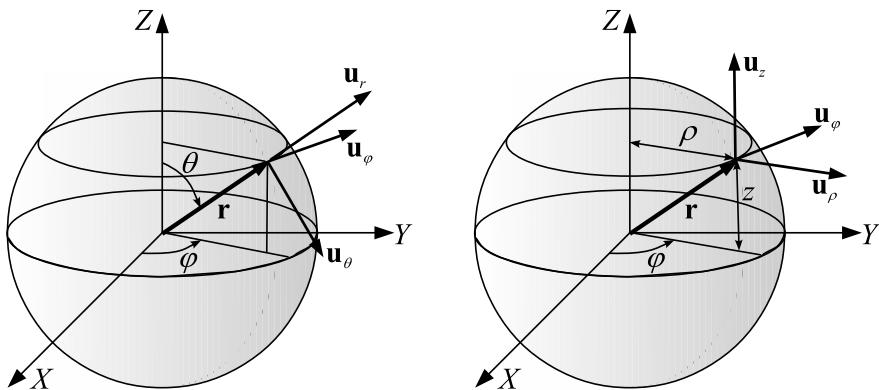


Figura A-2. Esquema de las coordenadas esféricas y cilíndricas

donde $\{r, \theta, \varphi\}$ son las coordenadas esféricas del punto \mathbf{r} , relacionadas con las coordenadas cartesianas mediante las igualdades:

$$\begin{aligned} r &= (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2} = |\mathbf{r}| & x &= r \sin \theta \cos \varphi \\ \theta &= \arccos \frac{z}{(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}} & y &= r \sin \theta \sin \varphi \\ \varphi &= \arctan \frac{x}{y} = \arccos \frac{x}{(x^2 + y^2)^{1/2}} & z &= r \cos \theta \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

(fíjese que \mathbf{r} es perpendicular a \mathbf{u}_θ y a \mathbf{u}_φ).

- Los **elementos de volumen** y longitud diferenciales son:

$$\begin{aligned} d^3\mathbf{r} &= (r^2 \sin \theta) dr d\theta d\varphi \\ d\mathbf{r} &= \mathbf{u}_r dr + \mathbf{u}_\theta r d\theta + \mathbf{u}_\varphi r \sin \theta d\varphi \\ d\ell &= |d\mathbf{r}| = \sqrt{(dr)^2 + r^2(d\theta)^2 + r^2 \sin^2 \theta(d\varphi)^2} \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Como consecuencia, el **elemento de área** sobre una superficie esférica de radio r centrada en el origen es:

$$d^2\mathbf{r} = (r^2 \sin \theta) d\theta d\varphi = \frac{1}{dr} d^3\mathbf{r} \quad (\text{A.19})$$

Coordenadas cilíndricas

- Los **vectores unitarios** que definen este sistema de coordenadas son (véase la Fig. A-2)

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_1 &= \mathbf{u}_\rho \equiv (\cos \varphi) \mathbf{u}_x + (\sin \varphi) \mathbf{u}_y \\ \mathbf{u}_2 &= \mathbf{u}_\varphi \equiv -(\sin \varphi) \mathbf{u}_x + (\cos \varphi) \mathbf{u}_y \\ \mathbf{u}_3 &= \mathbf{u}_z\end{aligned}\quad (\text{A.20})$$

por lo que

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_x &= (\cos \varphi) \mathbf{u}_\rho - (\sin \varphi) \mathbf{u}_\varphi \\ \mathbf{u}_y &= (\sin \varphi) \mathbf{u}_\rho + (\cos \varphi) \mathbf{u}_\varphi \\ \mathbf{u}_z &= \mathbf{u}_z\end{aligned}\quad (\text{A.21})$$

Todo vector de posición \mathbf{r} puede escribirse como

$$\mathbf{r} = (\rho \cos \varphi) \mathbf{u}_x + (\rho \sin \varphi) \mathbf{u}_y + z \mathbf{u}_z = \rho \mathbf{u}_\rho + z \mathbf{u}_z \quad (\text{A.22})$$

donde $\{\rho, \varphi, z\}$ son las coordenadas cilíndricas del punto \mathbf{r} , relacionadas con las cartesianas mediante

$$\begin{aligned}\rho &= (x^2 + y^2)^{1/2} & x &= \rho \cos \varphi \\ \varphi &= \arctan \frac{x}{y} = \arccos \frac{x}{(x^2 + y^2)^{1/2}} & y &= \rho \sin \varphi \\ z &= z & z &= z\end{aligned}\quad (\text{A.23})$$

(observe que \mathbf{r} es perpendicular a \mathbf{u}_φ).

Nota: La restricción de las coordenadas cilíndricas al plano XY proporciona las coordenadas circulares planas.

- Los **elementos de volumen** y **longitud** diferenciales son:

$$\begin{aligned}d^3 \mathbf{r} &= \rho \, d\rho \, d\varphi \, dz \\ d\mathbf{r} &= \mathbf{u}_\rho d\rho + \mathbf{u}_\varphi \rho d\varphi + \mathbf{u}_z dz \\ d\ell &= |d\mathbf{r}| = \sqrt{(d\rho)^2 + \rho^2(d\varphi)^2 + (dz)^2}\end{aligned}\quad (\text{A.24})$$

y el **elemento de área** sobre una superficie cilíndrica de radio ρ cuyo eje coincide con el eje OZ es

$$d^2 \mathbf{r} = \rho \, d\varphi \, dz = \frac{1}{d\rho} d^3 \mathbf{r} \quad (\text{A.25})$$

Los sistemas de coordenadas esféricas y cilíndricas se representan en la **FIG A-2**

Coordenadas curvilíneas generalizadas

- En el caso más general, todo punto \mathbf{r} queda determinado por tres coordenadas $\{u_1, u_2, u_3\}$. Para cada \mathbf{r} podemos hallar una terna de **vectores unitarios**

$$\mathbf{u}_i = \frac{1}{h_i} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u_i} \quad \text{con } h_i = \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u_i} \right| \quad (i = 1, 2, 3) \quad (\text{A.26})$$

Si $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3\}$ son ortogonales y forman un triedro dextrógiro tendremos que $\{u_1, u_2, u_3\}$ constituyen un sistema de coordenadas curvilíneas ortogonales. Observe que:

$$h_1 = 1 ; h_2 = 1 ; h_3 = 1 \quad \text{coordenadas rectangulares} \quad (\text{A.27})$$

$$h_1 = 1 ; h_2 = r ; h_3 = r \sin \theta \quad \text{coordenadas esféricas} \quad (\text{A.28})$$

$$h_1 = 1 ; h_2 = \rho ; h_3 = 1 \quad \text{coordenadas cilíndricas} \quad (\text{A.29})$$

- Los **elementos de volumen** y **longitud** diferenciales son:

$$\begin{aligned} d^3\mathbf{r} &= h_1 h_2 h_3 \, du_1 \, du_2 \, du_3 \\ d\mathbf{r} &= \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u_1} du_1 + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u_2} du_2 + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u_3} du_3 \\ d\ell &= |d\mathbf{r}| = \sqrt{h_1^2(du_1)^2 + h_2^2(du_2)^2 + h_3^2(du_3)^2} \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

Por la aplicación de la regla de la cadena,

$$\begin{pmatrix} \partial / \partial u_1 \\ \partial / \partial u_2 \\ \partial / \partial u_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial x / \partial u_1 & \partial y / \partial u_1 & \partial z / \partial u_1 \\ \partial x / \partial u_2 & \partial y / \partial u_2 & \partial z / \partial u_2 \\ \partial x / \partial u_3 & \partial y / \partial u_3 & \partial z / \partial u_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial / \partial x \\ \partial / \partial y \\ \partial / \partial z \end{pmatrix}. \quad (\text{A.31})$$

El determinante de la matriz que aparece en (A.31) es igual a $h_1 h_2 h_3$, denominándose **jacobiano** de la transformación de coordenadas que pasa de $\{x, y, z\}$ a $\{u_1, u_2, u_3\}$.

A.3. CAMPOS ESCALARES Y VECTORIALES

- Definimos un **campo escalar** como toda aplicación que hace corresponder a cada punto del espacio \mathbf{r} un escalar complejo $\Psi(\mathbf{r})$. La dependencia de un campo en la posición \mathbf{r} se expresa explícitamente en términos de las coordenadas de \mathbf{r} en

cualquier sistema de coordenadas ortogonales; por ejemplo: $\Psi(\mathbf{r}) \equiv \Psi(x, y, z) \equiv \Psi(r, \theta, \varphi) \equiv \Psi(\rho, \varphi, z)$.

Una **superficie de nivel** o equiescalar (o línea de nivel si nos restringimos a una superficie prefijada) es el lugar del espacio en el que el campo $\Psi(\mathbf{r})$ toma un mismo valor Ψ_0 . Si éste fuese complejo habrá superficies de nivel diferenciadas para sus partes real e imaginaria.

- Análogamente, un **campo vectorial** es toda aplicación que a cada punto \mathbf{r} le hace corresponder un vector $\mathbf{G}(\mathbf{r})$ de componentes complejas. A efectos de representación, el origen del vector $\mathbf{G}(\mathbf{r})$ se sitúa siempre en el punto \mathbf{r} donde se evalúa el campo. El módulo de un campo vectorial es el campo escalar real y positivo dado por

$$|\mathbf{G}(\mathbf{r})| = (\mathbf{G}^*(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}))^{1/2}. \quad (\text{A.32})$$

Una **línea de campo** es una curva tal que en cada punto de la misma el campo $\mathbf{G}(\mathbf{r})$ es tangente y, de similar manera a como sucedía para campos escalares, si $\mathbf{G}(\mathbf{r})$ es complejo habrá que distinguir entre las líneas de campo correspondientes a las partes real e imaginaria.

Para un campo vectorial, sus componentes deben corresponder a los tres vectores ortonormales que definen un sistema de coordenadas, bien entendido que sus orientaciones pueden depender del punto \mathbf{r} sobre el que se evalúa el campo:

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}) = G_1(\mathbf{r})\mathbf{u}_1 + G_2(\mathbf{r})\mathbf{u}_2 + G_3(\mathbf{r})\mathbf{u}_3 \quad \text{con} \quad G_i(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}) \quad (\text{A.33})$$

y cada campo escalar $G_i(\mathbf{r})$ se expresará explícitamente en términos de las coordenadas de \mathbf{r} en el sistema de coordenadas escogido.

- Dada una curva γ orientada, definimos la **integral de línea o circulación** de un campo vectorial $\mathbf{G}(\mathbf{r})$ como la integral

$$\mathcal{C}_{\mathbf{G}} \equiv \int_{\gamma} \mathbf{G}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r}. \quad (\text{A.34})$$

A su vez, para cada superficie Σ orientada el **flujo** del campo vectorial $\mathbf{G}(\mathbf{r})$ es

$$\Phi_{\mathbf{G}} \equiv \int_{\Sigma} (\mathbf{G}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{r})) d^2\mathbf{r} \equiv \int_{\Sigma} \mathbf{G}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{S}, \quad (\text{A.35})$$

donde $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ es un vector de módulo unidad perpendicular a la superficie y orientado hacia aquel lado de la misma que convencionalmente se ha tomado como “positivo” y $d\mathbf{S} \equiv \mathbf{n}(\mathbf{r})d^2\mathbf{r}$. En una superficie cerrada, el lado “positivo” es siempre el exterior.

Si γ es la curva cerrada que limita una superficie abierta Σ , la orientación de los vectores de superficie $d\mathbf{S}$ se obtiene aplicando la regla del tornillo a partir del sentido positivo de circulación de la curva γ .

Para una región Ω , una superficie Σ o una curva γ las integrales directas de un campo (sea escalar o vectorial) sobre estos lugares del espacio son

$$\int_{\Omega} \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} ; \quad \int_{\Sigma} \Psi(\mathbf{r}) d^2\mathbf{r} ; \quad \int_{\gamma} \Psi(\mathbf{r}) |d\mathbf{r}| \quad (\text{A.36})$$

con análogas expresiones para un campo vectorial.

- El **gradiente** de un campo escalar $\Psi(\mathbf{r})$ es el campo vectorial dado por

$$\nabla\Psi(\mathbf{r}) \equiv \text{grad } \Psi(\mathbf{r}) \equiv \frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial x}\mathbf{u}_x + \frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial y}\mathbf{u}_y + \frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial z}\mathbf{u}_z \quad (\text{A.37})$$

que resulta ser perpendicular a las superficies de nivel del campo $\Psi(\mathbf{r})$. En un sistema de coordenadas curvilíneas ortogonales,

$$\nabla\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{h_1} \frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial u_1}\mathbf{u}_1 + \frac{1}{h_2} \frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial u_2}\mathbf{u}_2 + \frac{1}{h_3} \frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial u_3}\mathbf{u}_3 \quad (\text{A.38})$$

y el gradiente en coordenadas esféricas y cilíndricas es, respectivamente,

$$\nabla\Psi(\mathbf{r}) = \frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial r}\mathbf{u}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial\theta}\mathbf{u}_{\theta} + \frac{1}{r\sin\theta} \frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial\varphi}\mathbf{u}_{\varphi} \quad (\text{A.39})$$

$$\nabla\Psi(\mathbf{r}) = \frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial\rho}\mathbf{u}_{\rho} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial\varphi}\mathbf{u}_{\varphi} + \frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial z}\mathbf{u}_z. \quad (\text{A.40})$$

- A su vez, el **laplaciano** de $\Psi(\mathbf{r})$ es el campo escalar dado por

$$\nabla^2\Psi(\mathbf{r}) = \frac{\partial^2\Psi(\mathbf{r})}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi(\mathbf{r})}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi(\mathbf{r})}{\partial z^2}, \quad (\text{A.41})$$

cuya expresión en un sistema de coordenadas curvilíneas es

$$\nabla^2\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{h_1h_2h_3} \sum_{i=1}^3 \left\{ \frac{\partial}{\partial u_i} \left[\frac{h_1h_2h_3}{h_i^2} \frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial u_i} \right] \right\} \quad (\text{A.42})$$

[tenga en cuenta que $\{h_1, h_2, h_3\}$ dependen de $\{u_1, u_2, u_3\}$]. De esta forma,

$$\begin{aligned} \nabla^2\Psi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial r} \right] + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left[\sin\theta \frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial\theta} \right] + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2\Psi(\mathbf{r})}{\partial\varphi^2} \right) \\ \nabla^2\Psi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial\rho} \left[\rho \frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial\rho} \right] + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2\Psi(\mathbf{r})}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2\Psi(\mathbf{r})}{\partial z^2}. \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

- La *divergencia* de un campo vectorial $\mathbf{G}(\mathbf{r})$ es el campo escalar

$$\nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}) \equiv \operatorname{div} \mathbf{G}(\mathbf{r}) \equiv \frac{\partial G_x(\mathbf{r})}{\partial x} + \frac{\partial G_y(\mathbf{r})}{\partial y} + \frac{\partial G_z(\mathbf{r})}{\partial z} \quad (\text{A.44})$$

que en un sistema de coordenadas curvilíneas ortogonales será

$$\nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}) = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial u_i} \left(\frac{h_1 h_2 h_3}{h_i} G_i(\mathbf{r}) \right). \quad (\text{A.45})$$

Por tanto, la divergencia en coordenadas esféricas y cilíndricas es, respectivamente,

$$\nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial (r^2 G_r(\mathbf{r}))}{\partial r} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial (\sin \theta G_\theta(\mathbf{r}))}{\partial \theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial G_\varphi(\mathbf{r})}{\partial \varphi} \quad (\text{A.46})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\rho} \frac{\partial (\rho G_\rho(\mathbf{r}))}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial G_\varphi(\mathbf{r})}{\partial \varphi} + \frac{\partial G_z(\mathbf{r})}{\partial z} \quad (\text{A.47})$$

El *rotacional* de $\mathbf{G}(\mathbf{r})$ es el campo vectorial que en coordenadas cartesianas viene dado por

$$\nabla \times \mathbf{G}(\mathbf{r}) \equiv \operatorname{rot} \mathbf{G}(\mathbf{r}) = \begin{vmatrix} \mathbf{u}_x & \mathbf{u}_y & \mathbf{u}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ G_x(\mathbf{r}) & G_y(\mathbf{r}) & G_z(\mathbf{r}) \end{vmatrix}. \quad (\text{A.48})$$

En un sistema de coordenadas curvilíneas ortogonales

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{G}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \begin{vmatrix} h_1 \mathbf{u}_1 & h_2 \mathbf{u}_2 & h_3 \mathbf{u}_3 \\ \frac{\partial}{\partial u_1} & \frac{\partial}{\partial u_2} & \frac{\partial}{\partial u_3} \\ h_1 G_1(\mathbf{r}) & h_2 G_2(\mathbf{r}) & h_3 G_3(\mathbf{r}) \end{vmatrix} = \\ &= \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \epsilon_{i,j,k} h_i \mathbf{u}_i \frac{\partial (h_k G_k(\mathbf{r}))}{\partial u_j} \end{aligned} \quad (\text{A.49})$$

donde

$$\epsilon_{i,j,k} = \begin{cases} +1 & \text{si } \{i, j, k\} = \{1, 2, 3\}, \{2, 3, 1\}, \{3, 1, 2\} \\ -1 & \text{si } \{i, j, k\} = \{1, 3, 2\}, \{2, 1, 3\}, \{3, 2, 1\} \\ 0 & \text{en el resto de los casos} \end{cases} \quad (\text{A.50})$$

es el llamado *tensor de Levi-Civit  *. As  , el rotacional de un campo en coordenadas esf  ricas y cil  ndricas es

$$\nabla \times \mathbf{G}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \begin{vmatrix} \mathbf{u}_r & r\mathbf{u}_\theta & r \sin \theta \mathbf{u}_\varphi \\ \frac{\partial}{\partial r} & \frac{\partial}{\partial \theta} & \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ G_r(\mathbf{r}) & rG_\theta(\mathbf{r}) & r \sin \theta G_\varphi(\mathbf{r}) \end{vmatrix} \quad (\text{A.51})$$

$$\nabla \times \mathbf{G}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\rho} \begin{vmatrix} \mathbf{u}_\rho & \rho \mathbf{u}_\varphi & \mathbf{u}_z \\ \frac{\partial}{\partial \rho} & \frac{\partial}{\partial \varphi} & \frac{\partial}{\partial z} \\ G_\rho(\mathbf{r}) & \rho G_\varphi(\mathbf{r}) & G_z(\mathbf{r}) \end{vmatrix} \quad (\text{A.52})$$

Finalmente, el *laplaciano* de un campo vectorial es:

$$\nabla^2 \mathbf{G}(\mathbf{r}) = (\nabla^2 G_x(\mathbf{r})) \mathbf{u}_x + (\nabla^2 G_y(\mathbf{r})) \mathbf{u}_y + (\nabla^2 G_z(\mathbf{r})) \mathbf{u}_z \quad (\text{A.53})$$

- Son de uso frecuente las siguientes igualdades:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{F}) &= \mathbf{0} & \nabla \cdot (\Psi \mathbf{F}) &= (\nabla \Psi) \cdot \mathbf{F} + \Psi (\nabla \cdot \mathbf{F}) \\ \nabla \times (\nabla \Psi) &= \mathbf{0} & \nabla \times (\nabla \times \mathbf{F}) &= \nabla (\nabla \cdot \mathbf{F}) - \nabla^2 \mathbf{F} \\ \nabla^2 \Psi &= \nabla \cdot (\nabla \Psi) & \nabla \cdot (\mathbf{F} \times \mathbf{G}) &= \mathbf{G} \cdot (\nabla \times \mathbf{F}) - \mathbf{F} \cdot (\nabla \times \mathbf{G}) \\ \nabla (\Psi \Upsilon) &= \Psi \nabla \Upsilon + \Upsilon \nabla \Psi & \nabla \times (\Psi \mathbf{F}) &= (\nabla \Psi) \times \mathbf{F} + \Psi (\nabla \times \mathbf{F}) \end{aligned} \quad (\text{A.54})$$

donde hemos excluido por simplicidad la dependencia en \mathbf{r} de los campos escalares Ψ, Υ y de los vectoriales \mathbf{F}, \mathbf{G} . Asimismo, definiendo el campo vectorial

$$\{\mathbf{G}(\mathbf{r}) \cdot \nabla\} \mathbf{F}(r) = G_x(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{r})}{\partial x} + G_y(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{r})}{\partial y} + G_z(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{r})}{\partial z} \quad (\text{A.55})$$

tenemos las dos siguientes relaciones:

$$\begin{aligned} \nabla(\mathbf{F} \cdot \mathbf{G}) &= (\mathbf{F} \cdot \nabla) \mathbf{G} + (\mathbf{G} \cdot \nabla) \mathbf{F} + \mathbf{F} \times (\nabla \times \mathbf{G}) + \mathbf{G} \times (\nabla \times \mathbf{F}) \\ \nabla \times (\mathbf{F} \times \mathbf{G}) &= (\mathbf{G} \cdot \nabla) \mathbf{F} - (\mathbf{F} \cdot \nabla) \mathbf{G} + (\nabla \cdot \mathbf{G}) \mathbf{F} - (\nabla \cdot \mathbf{F}) \mathbf{G} \end{aligned} \quad (\text{A.56})$$

- En general, si Ω es una región de \mathbb{R}^3 limitada por la curva cerrada Σ se cumplen las llamadas *identidades de Green*:

$$\int_{\Omega} \left(\Upsilon(\mathbf{r}) \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) + \nabla \Upsilon(\mathbf{r}) \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}) \right) d^3 \mathbf{r} = \oint_{\Sigma} \Upsilon(\mathbf{r}) \nabla \Psi(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{S} \quad (\text{A.57})$$

$$\int_{\Omega} \{ \Upsilon(\mathbf{r}) \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) - \Psi(\mathbf{r}) \nabla^2 \Upsilon(\mathbf{r}) \} d^3 \mathbf{r} = \oint_{\Sigma} \{ \Upsilon(\mathbf{r}) \nabla \Psi(\mathbf{r}) - \Psi(\mathbf{r}) \nabla \Upsilon(\mathbf{r}) \} \cdot d\mathbf{S}$$

Como consecuencia, si los campos escalares $\Psi(\mathbf{r})$ y $\Upsilon(\mathbf{r})$ se anulan cuando $r \rightarrow \infty$,

$$\int_{\mathbb{R}^3} \Upsilon(\mathbf{r}) \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} = - \int_{\mathbb{R}^3} \nabla \Upsilon(\mathbf{r}) \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi(\mathbf{r}) \nabla^2 \Upsilon(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}. \quad (\text{A.58})$$

- Igualmente, se cumple el llamado *teorema de Gauss o de la divergencia*.¹

$$\int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r})) d^3 \mathbf{r} = \oint_{\Sigma} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{S} \quad (\text{A.59})$$

que implica:

$$\int_{\Omega} (\nabla \times \mathbf{F}(\mathbf{r})) d^3 \mathbf{r} = - \oint_{\Sigma} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \times d\mathbf{S}$$

$$\int_{\Omega} (\nabla \Psi(\mathbf{r})) d^3 \mathbf{r} = \oint_{\Sigma} \Psi(\mathbf{r}) d\mathbf{S} \quad (\text{A.60})$$

- Consideremos ahora una superficie abierta Σ limitada por la curva cerrada γ . El *teorema de Stokes* señala que:²

$$\int_{\Sigma} (\nabla \times \mathbf{F}(\mathbf{r})) \cdot d\mathbf{S} = \oint_{\gamma} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \quad (\text{A.61})$$

¹ Es innecesario glosar la importancia de la obra de **Carl Friedrich Gauss** (1777–1855), uno de los más grandes matemáticos de la historia. Sólo mencionar la gran cantidad de resultados y teoremas que llevan el nombre de Gauss quien, muchas veces, no publicaba inmediatamente sus descubrimientos. El teorema de la divergencia se conoce también como teorema de Gauss-Ostrogradsky ya que fue Mikhail Ostrogradsky quien hizo pública la primera demostración rigurosa del mismo.

² Sir **George Gabriel Stokes** (1819–1903) fue uno de los más destacados físicos matemáticos del siglo XIX. Ocupó la prestigiosa Cátedra Lucasiana de matemática aplicada de la universidad de Cambridge y fue presidente de la Royal Society. Su generosidad intelectual era proverbial y la influencia que ejerció en el desarrollo de la matemática aplicada y la física teórica en la segunda mitad del siglo XIX fue mucho mayor de lo que daría a entender su producción científica, de por sí inmensa en calidad y cantidad.

o en una versión alternativa

$$\int_{\Sigma} \left(\nabla \Psi(\mathbf{r}) \right) \times d\mathbf{S} = - \oint_{\gamma} \Psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (\text{A.62})$$

- Como se acaba de ver, las diferentes transformaciones de campos vectoriales y escalares (gradiente, divergencia, rotacional, laplaciano) se han expresado como diferentes actuaciones del llamado *operador nabla*, definido como el operador vectorial

$$\nabla \equiv \mathbf{u}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{u}_y \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{u}_z \frac{\partial}{\partial z}. \quad (\text{A.63})$$

Supongamos un campo Ψ (escalar o vectorial) y calculemos su representación en el espacio recíproco mediante la transformación

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{k}) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\Psi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} d^3\mathbf{r} \quad \Leftrightarrow \quad \Psi(\mathbf{r}) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\tilde{\Psi}(\mathbf{k}) e^{+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} d^3\mathbf{k} \quad (\text{A.64})$$

la actuación del operador nabla en el espacio recíproco es

$$\nabla \equiv +i\mathbf{k}, \quad (\text{A.65})$$

mientras que en la representación recíproca usamos como variable el momento lineal $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, entonces

$$\nabla \equiv +\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}. \quad (\text{A.66})$$

A su vez, definimos el *operador lambda* como

$$\Lambda \equiv \mathbf{r} \times \nabla. \quad (\text{A.67})$$

En coordenadas esféricas se tiene que

$$\begin{aligned} \nabla \Psi(\mathbf{r}) &= \mathbf{u}_r \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial r} - \frac{1}{r} \mathbf{u}_r \times \Lambda \Psi(\mathbf{r}) \\ \nabla^2 &= \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial \Psi(\mathbf{r})}{\partial r} \right] + \Lambda \cdot \Lambda \Psi(\mathbf{r}) \right). \end{aligned} \quad (\text{A.68a})$$

Un ejemplo célebre es el del teorema que acabamos de enunciar y que Stokes *jamás* publicó. Ello fue así porque no lo consideró correcto ya que la idea se la había comunicado de manera privada Lord Kelvin (William Thomson) en 1850. Tras probar rigurosamente el teorema, Stokes propuso su demostración en 1854 como problema para los estudiantes de ciencias de la Universidad de Cambridge que quisiesen optar al premio extraordinario fin de carrera (el llamado Smith's Prize) dándoles así la oportunidad de “lucirse”. Los ganadores ex aequo del premio fueron Edward Routh y un tal James Clerk Maxwell y, como conclusión, el teorema de Stokes se debería llamar de Kelvin-Stokes-Maxwell-Routh. Si le gustan los retos, puede descargar el famoso examen (sin las soluciones) de la URL http://www.clerkmaxwellfoundation.org/SmithsPrizeExam_Stokes.pdf

Por consiguiente, comparando con (A.43)

$$\begin{aligned}\mathbf{\Lambda}\Psi(\mathbf{r}) &= \frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial\theta}\mathbf{u}_\varphi - \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial\varphi}\mathbf{u}_\theta \\ \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{\Lambda}\Psi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial\Psi(\mathbf{r})}{\partial\theta}\right] + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi(\mathbf{r})}{\partial\varphi^2},\end{aligned}\quad (\text{A.68b})$$

quedando claro así que el operador $\mathbf{\Lambda}$ es puramente *angular*.

APÉNDICE B

ESPACIOS DE FUNCIONES: COMPLEMENTOS

En este apéndice expondremos algunos conceptos matemáticos sobre espacios de Hilbert de funciones que, siendo prescindibles en una asignatura introductoria de mecánica cuántica, son importantes si se desea seguir en un futuro un curso más avanzado. Puesto que nuestro interés es presentar únicamente algunas ideas, en algunos momentos seremos conscientemente poco rigurosos.

B.1. LA INTEGRAL DE LEBESGUE

- Para que la teoría sea matemáticamente consistente, las integrales en un espacio de Hilbert de funciones deben efectuarse en el sentido de Lebesgue y no en el más familiar de Riemann. Si nos limitamos momentáneamente a funciones de una única variable real, la integral de Riemann de una función $g(x)$ acotada y continua a trozos es igual al área de la región subtendida por la gráfica de $g(x)$ entre los límites de integración, en cuyo caso coincide con la de Lebesgue. Sin embargo esta última puede evaluarse para un conjunto más amplio de funciones.

La integral de Lebesgue parte del concepto matemático de **medida o longitud generalizada**, que formaliza nuestra idea intuitiva de “longitud”. Dado un intervalo $[a, b] \subset \mathbb{R}$ su longitud es $b - a$, que también es la de los intervalos (a, b) , $(a, b]$ y $[b, a)$. Por otra parte, la longitud de cualquier subconjunto de \mathbb{R} numerable (ordenable) con un número finito o infinito de elementos es igual a cero, diciéndose que esos subconjuntos son de *medida nula*. Ejemplos de tales subconjuntos son \mathbb{N} , \mathbb{Z} , \mathbb{Q} y cualquier sucesión de números reales. Finalmente, dados dos subconjuntos disjuntos Λ_1 y Λ_2 , la longitud de su unión es la suma de sus longitudes. Todo subconjunto de \mathbb{R} concebible de manera intuitiva (puntos aislados, intervalos y uniones e intersecciones de los mismos) tiene una medida bien definida, diciéndose que es *medible Lebesgue*, pero usando herramientas matemáticas adecuadas es posible hallar la medida de subconjuntos “no triviales” de \mathbb{R} , por ejemplo fractales.

- Una función real de variable real, $g(x)$, es *integrable Lebesgue* entre a y b si para cualquier subintervalo cerrado de $[a, b]$ su anti-imagen (el conjunto de valores

de la variable para las que la función toma un valor en dicho intervalo) es **medible Lebesgue**. La condición de integrabilidad es tan general que prácticamente todas las funciones con interés físico cotidiano la cumplen.

La integral Lebesgue de $g(x)$ se construye de manera intuitiva como sigue:

- i) Se divide la recta real en intervalos de longitud dy , $\Lambda_n = [y_n - dy, y_n]$, donde $y_n = ndy$ con $n \in \mathbb{Z}$.
- ii) Para cada intervalo Λ_n se halla la medida ℓ_n del subconjunto $g^{-1}(\Lambda_n) \cap [a, b]$, siendo $g^{-1}(\Lambda_n)$ la anti-imagen de Λ_n .
- iii) Se toma el límite $dy \rightarrow 0$ y definimos la integral como la suma de todas las medidas anteriores,

$$\int_a^b g(x) dx \equiv \lim_{dy \rightarrow 0^+} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} y_n \ell_n. \quad (\text{B.1})$$

Fíjese que mientras que la integral de Riemann resulta de la división en intervalos cada vez más pequeños del *dominio* de la función, la de Lebesgue se realiza mediante una división de su *recorrido* (los valores que toma $g(x)$).

La integral de Lebesgue se construye de manera conceptualmente idéntica para funciones de \mathbb{R}^N : sólo hay que cambiar la medida de Lebesgue “longitud” por “área” (si $N = 2$) o por “volumen” (si $N = 3$). En este último caso los subconjuntos de \mathbb{R}^3 de medida nula más evidentes son las uniones de colecciones numerables de puntos, curvas o superficies.

Si $g(x)$ fuese compleja la integral se haría por separado para sus partes reales e imaginarias.

B.2. CONVERGENCIA EN ESPACIOS DE FUNCIONES

- Dos funciones $g(\mathbf{r})$ y $h(\mathbf{r})$ son *iguales casi doquiera* (o *casi por doquier*) (c.d.) si sólo difieren para un subconjunto de valores de la variable con medida nula. Por ejemplo,

$$g(x) = e^{-x} ; \quad h(x) = \begin{cases} e^{-x} & \text{si } x \notin \mathbb{Q} \\ x & \text{si } x \in \mathbb{Q} \end{cases}$$

son funciones iguales c.d. ya que el conjunto \mathbb{Q} es de medida nula. Es evidente que toda integral de Lebesgue de dos funciones iguales c.d. da el mismo resultado.

- En física cuántica dos funciones *son* iguales si lo son “casi doquiera”. Por tanto, el conjunto $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ está formado en realidad por *clases* de funciones, iguales c.d. entre sí, para las que la integral de Lebesgue

$$\int_{\mathbb{R}^N} |\Psi(\mathbf{r})|^2 d^N \mathbf{r} \equiv \|\Psi\|^2$$

es finita. Esta matización es esencial ya que, por ejemplo, la relación fundamental

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r}) \Leftrightarrow \|\Psi - \Phi\| = 0 \quad (\text{B.2})$$

es cierta únicamente si la igualdad entre funciones es “c.d.” y la norma se calcula mediante una integral de Lebesgue.

A su vez, si $\psi(\lambda)$ y $\phi(\lambda)$ son coordenadas dependientes de un índice *continuo* λ en una base de representación de las funciones $\Psi(\mathbf{r})$ y $\Phi(\mathbf{r})$, diferencias entre $\psi(\lambda)$ y $\phi(\lambda)$ en un subconjunto de medida nula son irrelevantes puesto que las integrales sobre λ también son de Lebesgue.

- Consideremos una sucesión de funciones de norma finita $\{\Psi_n(\mathbf{r})\}$, con $n = 1, 2, 3, \dots$. Como la igualdad entre funciones es “casi doquiera”, en física cuántica es irrelevante la convergencia puntual

$$\{\Psi_n(\mathbf{r})\} \text{ converge (puntualmente)} \Leftrightarrow \begin{cases} \text{existe una función } \Psi(\mathbf{r}) \text{ tal que se cumple} \\ \text{que } \lim_{n \rightarrow \infty} \Psi_n(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r}) \text{ para todo } \mathbf{r} \in \mathbb{R}^N \end{cases}$$

Esta convergencia puntual debe ser sustituida por otra definición de convergencia menos exigente construida a partir de la caracterización de la igualdad entre dos funciones (B.2) basada en la norma :

$$\{\Psi_n(\mathbf{r})\} \text{ converge} \Leftrightarrow \begin{cases} \text{existe } \Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N) \text{ tal que} \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \|\Psi - \Psi_n\| = 0. \end{cases} \quad (\text{B.3})$$

Entonces $\Psi(\mathbf{r})$ es el límite de la sucesión. El criterio (B.3), muchas veces llamado *fuerte*, es el que se da por supuesto al tratar sucesiones de funciones normalizables. Debido a que $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ es un conjunto topológicamente cerrado, toda sucesión convergente es una *sucesión de Cauchy* y viceversa. En efecto, si $\{\Psi_n(\mathbf{r})\}$ converge (fuertemente) se cumple que además

$$\{\Psi_n(\mathbf{r})\} \text{ es de Cauchy} \Leftrightarrow \begin{cases} \text{Para todo } \epsilon > 0 \text{ existe un } s \in \mathbb{N} \text{ tal que} \\ \|\Psi_n - \Psi_m\| < \epsilon \text{ si } n > s \text{ y } m > s \end{cases}$$

por lo que, intuitivamente, es de Cauchy toda sucesión cuyos elementos tienden a estabilizarse.

- En física cuántica la información de interés se obtiene de productos escalares, lo que sugiere definir otro criterio de convergencia llamado *débil*.

Especificamente,

$$\{\Psi_n(\mathbf{r})\} \text{ converge (débilmente)} \Leftrightarrow \begin{cases} \text{la sucesión } \phi_n = \langle \Psi_n | \Phi \rangle \\ \text{converge para toda } \Phi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N). \end{cases}$$

Este criterio, tal y como su propio nombre indica, es menos restrictivo que el fuerte: hay sucesiones $\{\Psi_n(x)\}$ que no son convergentes fuertemente pero que sí lo son en el sentido débil.

Esta convergencia débil se puede relajar un poco más si imponemos que las funciones $\Phi(\mathbf{r})$ sean de Schwartz:

$$\{\Psi_n(\mathbf{r})\} \text{ converge (débilmente en } \mathcal{S}(\mathbb{R}^N)) \Leftrightarrow \begin{cases} \text{la sucesión } \phi_n = \langle \Psi_n | \Phi \rangle \\ \text{converge para toda } \Phi(\mathbf{r}) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^N) \end{cases}$$

y tenemos entonces la denominada *convergencia en el sentido de las distribuciones*.

B.3. FORMAS LINEALES Y DISTRIBUCIONES TEMPERADAS

- Las bases de representación con funciones no normalizables, introducidas por Dirac, resultan como mínimo “poco elegantes” pero muy útiles y sobre todo físicamente transparentes. La formulación de Dirac fue rápidamente contestada desde el mundo de la matemática pura por John von Neumann, quien desarrolló un formalismo en la práctica equivalente pero que en ningún momento acudía a “entes” de norma infinita como son nuestras funciones $\theta_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ o $\delta_{\mathbf{a}}(\mathbf{r})$. En cualquier caso, las matemáticas de Dirac son completamente rigurosas si se interpretan a partir de la **teoría de distribuciones** de Laurent Schwartz y de la de **espacios de Hilbert equipados** de Israël Gel'fand. Vamos a ver muy someramente cómo.
- Consideraremos el espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$. Un *funcional* es toda aplicación \mathcal{A} que hace corresponder a cada función $\Phi(\mathbf{r})$ dentro de un subconjunto de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$,

denominado *dominio* $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ del funcional, un escalar complejo $\mathcal{A}[\Phi]$. Al igual que ocurría con los operadores, un funcional queda completamente caracterizado por su regla de actuación y su dominio. Ejemplos de funcionales ya conocidos por nosotros son la norma de una función y los valores medios de un operador (evaluados a partir de la función de onda).

Si la regla de la actuación del funcional \mathcal{A} es lineal,

$$\mathcal{A}[\alpha\Psi + \beta\Phi] = \alpha\mathcal{A}[\Psi] + \beta\mathcal{A}[\Phi] \text{ para todo } \begin{cases} \{\Phi(\mathbf{r}), \Psi(\mathbf{r})\} \subset \mathcal{D}(\mathcal{A}) \\ \{\alpha, \beta\} \subset \mathbb{C} \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

diremos que \mathcal{A} es una *forma lineal*. Su dominio ha de ser necesariamente un subespacio de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$.

Dirac introdujo con su perspicacia habitual la siguiente notación para la actuación de formas lineales en cualquier espacio de Hilbert. Si \mathcal{A} es una forma lineal en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$, el escalar complejo resultado de su actuación sobre una función $\Psi(\mathbf{r})$ no lo simbolizamos como $\mathcal{A}[\Psi]$, sino como $\langle \mathcal{A} | \Psi \rangle$. Así, mientras que los elementos del espacio de Hilbert se representan mediante *kets* $|\Psi\rangle$, las formas lineales se simbolizan mediante *bras* $\langle \mathcal{A}|$. Entonces la condición de linealidad de $\langle \mathcal{A}|$ se escribe como

$$\langle \mathcal{A} | |\alpha\Psi + \beta\Phi\rangle = \alpha\langle \mathcal{A} | |\Psi\rangle + \beta\langle \mathcal{A} | |\Phi\rangle,$$

donde $|\alpha\Psi + \beta\Phi\rangle$ simboliza el ket igual a $\alpha|\Psi\rangle + \beta|\Phi\rangle$.

Adoptando a partir de ahora la notación de Dirac, dadas dos formas lineales $\langle \mathcal{A}|$ y $\langle \mathcal{B}|$ podemos definir su suma como la forma lineal $\langle \mathcal{A} + \mathcal{B}|$ tal que

$$\langle \mathcal{A} + \mathcal{B} | |\Psi\rangle = \langle \mathcal{A} | |\Psi\rangle + \langle \mathcal{B} | |\Psi\rangle \text{ para todo } \Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) \cap \mathcal{D}(\mathcal{B})$$

mientras que si λ es un escalar complejo, la forma lineal $\langle \lambda\mathcal{A}|$ será

$$\langle \lambda\mathcal{A} | |\Psi\rangle = \lambda^* \langle \mathcal{A} | |\Psi\rangle \text{ para todo } \Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$$

(¡atención al complejo conjugado!). Entonces, si \mathcal{W} es un subespacio de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ y denominamos *espacio dual* \mathcal{W}^* al conjunto de todas las formas lineales cuyo dominio contiene a \mathcal{W} , entonces \mathcal{W}^* resulta ser un espacio lineal complejo bajo la suma de formas lineales y el producto por un escalar complejo.

- A las formas lineales pertenecientes al espacio dual de $\mathcal{S}(\mathbb{R}^N)$ (recuerde, las funciones de Schwartz) se las llama *distribuciones temperadas*, siendo la

transformada de Fourier $\mathcal{F}_\mathbf{q}$ y la delta de Dirac $\delta_\mathbf{a}$ dos ejemplos característicos. Fijadas una posición \mathbf{a} y un momento \mathbf{q} , definimos las formas lineales $\delta_\mathbf{a}$ y $\mathcal{F}_\mathbf{q}$

$$\begin{aligned}\langle \delta_\mathbf{a} || \Phi \rangle &= \Phi(\mathbf{a}) \\ \langle \mathcal{F}_\mathbf{q} || \Phi \rangle &= \tilde{\Phi}(\mathbf{q}) = \int_{\mathbb{R}^N} \frac{e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{N/2}} \Phi(\mathbf{r}) d^N \mathbf{r} \quad \forall \Phi(\mathbf{r}) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^N)\end{aligned}\quad (\text{B.5})$$

Vemos así que la delta de Dirac tiene sentido matemático pleno si se la interpreta como una distribución. Naturalmente el dominio de una distribución temperada puede ser más amplio que $\mathcal{S}(\mathbb{R}^N)$: por ejemplo, la delta de Dirac está bien definida para cualquier función que sea continua en $\mathbf{r} = \mathbf{a}$, y que la transformada de Fourier da un resultado finito aplicada a muchas funciones que no son suaves de decrecimiento rápido.

- En el espacio podemos definir una forma una forma lineal asociada al producto escalar. En efecto, toda función $\Psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ tiene asociada de manera natural una forma lineal $\langle \Psi |$, llamada *conjugada*, cuyo dominio es todo $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ y cuya regla de actuación es un producto escalar:

$$\langle \Psi || \Phi \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi^*(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) d^N \mathbf{r} = \langle \Psi | \Phi \rangle \quad \forall \Phi(\mathbf{r}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N). \quad (\text{B.6})$$

Como se ve, podemos dejar de usar la doble barra $||$ para funciones Ψ de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$. Recíprocamente, puede probarse que toda forma lineal cuyo dominio es $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ es conjugada de una y sólo una función de cuadrado integrable. Por tanto *la actuación de formas lineales cuyo dominio es todo $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ es completamente equivalente al producto escalar*. Además, tal y como hemos definido la suma y el producto por un escalar de formas lineales, la forma lineal conjugada de la función de cuadrado integrable $\lambda\Psi(\mathbf{r}) + \mu\Phi(\mathbf{r})$ es la forma lineal $\langle \lambda\Psi + \mu\Phi |$.

Esta correspondencia se pierde si restringimos el dominio de las formas lineales. Como acabamos de ver, la delta de Dirac y la transformada de Fourier no son distribuciones conjugadas ya no de una función de Schwartz sino ni siquiera de una función de cuadrado integrable. Así, si $\langle \Lambda |$ es una distribución temperada no perteneciente al espacio dual de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$, definimos la **función generalizada** $\Lambda(\mathbf{r})$ a partir de los valores de sus productos escalares:

$$\langle \Lambda | \rightarrow \Lambda(\mathbf{r}) \text{ tal que } \int_{\mathbb{R}^N} \Lambda^*(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) d^N \mathbf{r} = \langle \Lambda | \Phi \rangle \in \mathbb{C} \quad \forall \Phi(\mathbf{r}) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^N) \quad (\text{B.7})$$

La distinción entre $\langle \Lambda | \Phi \rangle$ y $\langle \Lambda | \Phi \rangle$ es ya superflua si extendemos el producto escalar a funciones generalizadas; podemos eliminar la doble barra $||$ y

sobreentender que $\langle \Lambda | \Phi \rangle$ es la actuación de la forma lineal $\Lambda(\mathbf{r})$ sobre la función $\Phi(\mathbf{r})$.

La definición (B.7) nos permite calcular las “coordenadas” de $\Lambda(\mathbf{r})$ en cualquier base ortonormal de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ formada por funciones de Schwartz. Por ejemplo, si $\{\Phi_1(\mathbf{r}), \Phi_2(\mathbf{r}), \dots\}$ es una base ortonormal de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ con estas características, podemos escribir la función generalizada como

$$\Lambda(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \Phi_n | \Lambda \rangle \Phi_n(\mathbf{r}) \quad \text{con} \quad \langle \Phi_n | \Lambda \rangle = \langle \Lambda | \Phi_n \rangle^* \in \mathbb{C}. \quad (\text{B.8})$$

Ahora bien, esta igualdad *no es estricta*, ya que la serie del segundo miembro no converge de acuerdo con el criterio de convergencia fuerte (B.3) basado en la norma. Sin embargo, cuando $\Lambda(\mathbf{r})$ aparece dentro de un producto escalar la serie correspondiente sí converge puesto que tenemos una sucesión de números complejos que tiende a un escalar que por hipótesis es finito

$$\langle \Phi | \Lambda \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \Phi_n | \Lambda \rangle \langle \Phi | \Phi_n \rangle = \langle \Lambda | \Phi \rangle^* \in \mathbb{C} \quad \text{para todo } \Phi(\mathbf{r}) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^N).$$

A expresiones directas como la (B.8), en las que aparecen funciones no normalizables y que rigurosamente sólo tienen sentido cuando aparecen dentro de un producto escalar, se las llama ***igualdades en sentido de distribuciones***. La construcción de la delta de Dirac que vimos en el **capítulo 1** es así un límite en sentido de distribuciones de una sucesión de funciones normalizables cuya norma va aumentando indefinidamente aunque su integral sobre todo \mathbb{R} es igual a la unidad.

Otro ejemplo importante es: en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ las dos siguientes ecuaciones no tienen solución (excepto la trivial $\Psi(x) = \Phi(x) = 0$)

$$(x - a)\Psi(x) = 0 \quad ; \quad \left(-i \frac{d}{dx} - k \right) \Phi(x) = 0 \quad ; \quad \text{con } a \text{ y } k \in \mathbb{R}.$$

Sin embargo, en sentido de distribuciones sí tienen solución, en concreto:

$$\Psi(x) = \mathcal{A}\delta_a(x) \quad ; \quad \Phi(x) = \mathcal{B}\exp(ixk),$$

donde \mathcal{A}, \mathcal{B} son constantes multiplicativas complejas arbitrarias.

B.4. EQUIPAMIENTO DE ESPACIOS DE HILBERT

- Naturalmente las funciones generalizadas no son normalizables, pero lo interesante del procedimiento de la sección anterior es que hemos “ampliado” o “equipado” el espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ con nuevas funciones que van a tener un importante significado físico. Por ejemplo, y como ya habrá adivinado, la función generalizada que corresponde a la transformada de Fourier $\langle \mathcal{F}_q |$ es la función de De Broglie $\theta_q(\mathbf{r})$:

$$\langle \mathcal{F}_q | \rightarrow \theta_q(\mathbf{r}) \text{ tal que } \int_{\mathbb{R}^N} \theta_q^*(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \tilde{\Phi}(\mathbf{q}) \quad \forall \Phi(\mathbf{r}) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^N).$$

En espacios de Hilbert de funciones este procedimiento formal se realiza de manera casi intuitiva ya que, con la excepción de algunas distribuciones “exóticas” como la delta de Dirac, las funciones generalizadas son iguales a funciones *estándar* definidas sobre todo \mathbb{R}^N pero que no son de cuadrado integrable. Ahora bien, si trabajamos en representaciones abstractas de los estados cuánticos no queda más remedio que establecer claramente cuáles son las nuevas “incorporaciones”. El esquema general es así el siguiente: se parte de un espacio de Hilbert de los estados \mathcal{E} , se escoge un subespacio topológicamente denso \mathcal{S} cuyos kets representan estados con especial significado físico y se equipa el espacio de Hilbert original \mathcal{E} con aquellos kets generalizados cuyos conjugados son los bras de \mathcal{S}^* que no pertenecen a \mathcal{E}^* . La terna de espacios lineales $\{\mathcal{S}, \mathcal{E}, \mathcal{S}^*\}$, llamada *triplete de Gel'fand*, define entonces un **equipamiento del espacio de Hilbert \mathcal{E}** .

- Para que esta ampliación de las funciones de onda sea realmente práctica necesitamos también definir la regla de actuación de los operadores lineales de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ sobre funciones generalizadas. De nuevo, en espacios de funciones no es preciso romperse demasiado la cabeza ya que la actuación de muchos operadores lineales en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ se extiende de manera natural a funciones que no son de cuadrado integrable. Sin embargo tal extensión debe ser rigurosamente construida lo que tendrá la ventaja adicional de ampliar el dominio del operador.

Sea \hat{A} un operador lineal tal que el dominio de su adjunto \hat{A}^\dagger contiene a las funciones de Schwartz. Entonces, tal y como hicimos con las funciones generalizadas, definimos la actuación *en sentido de distribuciones* del operador \hat{A} sobre una función generalizada $\Lambda(\mathbf{r})$ a partir de los productos escalares:

$$\int_{\mathbb{R}^N} \Phi^*(\mathbf{r}) (\hat{A}\Lambda(\mathbf{r})) d^N\mathbf{r} = \int_{\mathbb{R}^N} (\hat{A}^\dagger \Phi(\mathbf{r}))^* \Lambda(\mathbf{r}) d^N\mathbf{r} \quad \forall \Phi(\mathbf{r}) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^N). \quad (\text{B.9})$$

Si la función $\Lambda(\mathbf{r})$ es de cuadrado integrable y pertenece al dominio de \hat{A} lo anterior no aporta nada. Pero, si $\Lambda(\mathbf{r})$ es una función generalizada, o una normalizable

pero no perteneciente al dominio original de \hat{A} , esta expresión permite evaluar indirectamente $\hat{A}\Lambda(\mathbf{r})$. En efecto, si $\{\Phi_1(\mathbf{r}), \Phi_2(\mathbf{r}), \dots\}$ es una base ortonormal de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^N)$ formada por funciones de Schwartz y que pertenecen al dominio de \hat{A}^\dagger tendríamos la siguiente igualdad en sentido de distribuciones

$$\hat{A}\Lambda(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \hat{A}^\dagger \Phi_n | \Lambda \rangle \Phi_n(\mathbf{r}) \quad \text{con} \quad \langle \hat{A}^\dagger \Phi_n | \Lambda \rangle = \langle \Lambda | \hat{A}^\dagger \Phi_n \rangle^*.$$

B.5. DERIVADA EN SENTIDO DE DISTRIBUCIONES

- La idea expuesta en el punto anterior nos va a permitir generalizar el concepto de derivada. Por simplicidad, nos vamos a restringir al espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ ya que los resultados más relevantes se pueden extender a cualquier espacio de funciones.

Sea $\Lambda(x)$ una función, bien de cuadrado integrable o bien generalizada. Su *derivada en sentido de distribuciones* se define como:

$$\int_{\mathbb{R}} \Phi(x) \frac{d\Lambda(x)}{dx} dx = (\text{por partes}) = - \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{d\Phi(x)}{dx} \right) \Lambda(x) dx \quad \forall \Phi(x) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}) \quad (\text{B.10})$$

y dependiendo de cómo sea $\Lambda(x)$ podremos extraer de la anterior igualdad una regla de actuación explícita o las coordenadas en, por ejemplo, la base de Hermite.

Por ejemplo, si $\Lambda(x) = \delta_a(x)$,

$$\int_{\mathbb{R}} \Phi(x) \frac{d\delta_a(x)}{dx} dx = - \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{d\Phi(x)}{dx} \right) \delta_a(x) dx = - \left. \frac{d\Phi(x)}{dx} \right|_{x=a}$$

y la derivada en sentido de distribuciones de $\delta_a(x)$ es la función generalizada $\delta'_a(x)$ tal que

$$\int_{\mathbb{R}} \delta'_a(x) \Phi(x) dx = -\Phi'(a).$$

Menos extraña es la derivada de la *función escalón o de Heavyside*,

$$\Theta_a(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \geq a \\ 0 & \text{si } x \leq a, \end{cases} \quad (\text{B.11})$$

cuya derivada usual es igual a cero menos en el punto de discontinuidad en $x = a$ donde no está definida. Sin embargo, en sentido de distribuciones, si $\Psi(x)$ es una

función de Schwartz cualquiera

$$\int_{\mathbb{R}} \Psi(x) \frac{d\Theta_a(x)}{dx} dx = - \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{d\Psi(x)}{dx} \right) \Theta_a(x) dx = - \int_a^{+\infty} \frac{d\Psi(x)}{dx} dx = \Psi(a)$$

(no olvide que las funciones de Schwartz y cualesquiera otras de cuadrado integrable se anulan en los infinitos). Por tanto,

$$\int_{\mathbb{R}} \Psi(x) \frac{d\Theta_a(x)}{dx} dx = \Psi(a) \Rightarrow \frac{d\Theta_a(x)}{dx} = \delta_a(x)$$

y la derivada en sentido de distribuciones de la función escalón es la delta de Dirac.

A partir de este resultado se tiene que si $\Lambda(x)$ es una función continua excepto en $x = a$, entonces podemos escribir

$$\frac{d\Lambda(x)}{dx} = \Lambda'(x) + \Delta_a \delta_a(x) \quad \text{con} \quad \Delta_a \equiv \lim_{\delta \rightarrow 0^+} (\Lambda(a + \delta) - \Lambda(a - \delta)) \quad (\text{B.12})$$

donde $\Lambda'(x)$ representa la derivada “usual” de $\Lambda(x)$ pero sin tener en cuenta la discontinuidad y Δ_a es el “salto” de la función $\Lambda(x)$ en $x = a$. Para demostrar (B.12) definamos la función accesoria

$$\vartheta(x) = \Lambda(x) - \Delta_a \Theta_a(x).$$

Esta función es continua, por lo que su derivada usual $\vartheta'(x)$ y su derivada en distribuciones coinciden. Como además $\vartheta'(x) = \Lambda'(x)$ (derivada usual), derivando en sentido de distribuciones la última igualdad se tiene inmediatamente (B.12).

BIBLIOGRAFÍA

• ELECTROMAGNETISMO Y ÓPTICA

[Jackson] John D. Jackson; *Classical Electrodynamics (3rd Edition)*; John Wiley & Sons 1999. (Una edición anterior ha sido traducida al español en Editorial Alhambra).

[Reitz] John R. Reitz, Frederick J. Milford, Robert W. Christy; *Foundations of Electromagnetic Theory (4th Edition)*; Addison-Wesley 1993. (hay traducción al español en Addison-Wesley Iberoamericana).

[Cabrera] José M. Cabrera, Fernando J. López, Fernando Agulló, *Óptica electromagnética (2^a edición)*; Addison-Wesley Iberoamericana / UAM 1998.

[Hecht] Eugene Hecht, *Optics (4th Edition)*, Addison-Wesley 2001. (hay traducción al español en Addison-Wesley Iberoamericana).

La obra de Jackson es la referencia obligada en electromagnetismo clásico, enciclopédica y con gran rigor y profundidad. Como texto, está orientado a estudiantes de posgrado. El libro de Reitz *et al* no llega al mismo nivel por lo que sus contenidos son más adecuados para estudiantes de grado.

El texto de óptica de Hecht presenta una exposición moderna de esta disciplina. Lo mismo puede decirse de la obra de Cabrera *et al* que, además, es un excelente acompañamiento a un curso de física cuántica.

• FÍSICA CUÁNTICA:

[Wichmann] Eyvind H. Wichmann; *Física Cuántica; Berkeley Physics Course* Reverté 2008.

[Feynman] Richard P. Feynman, Robert B. Leighton, Mathew Sands; *The Feynman Lectures on Physics, The New Millennium Edition (Vol III: Quantum Mechanics)*; Basic Books 2011. (hay traducción al español de la edición *normal* en Addison-Wesley Iberoamericana).

[Sánchez-Guillén] Joaquín Sanchez Guillén y Mijail A. Braun, *Física cuántica*, Alianza Universidad 1993

[Eisberg] Robert Eisberg and Robert Resnick, *Quantum Physics of Atoms*,

Molecules, Solids, Nuclei, and Particles (2nd Edition); John Wiley & Sons, 1985. (versión española de la primera edición en Limusa-Wiley).

[Complutense] Carlos Sánchez del Río (coord.), *Física Cuántica (4º edición, corregida)*; Pirámide, 2002.

[French] A. P. French, Edwin F. Taylor, *Introducción a la Física Cuántica (MIT Physics Course)*; Reverté 1982.

[Levi] A. F. J. Levi, *Applied Quantum Mechanics (2nd Edition)*; Cambridge University Press 2006.

Los textos de Wichmann y Feynmann *et al* describen con detalle los aspectos fenomenológicos de la física cuántica, aunque su nivel debe situarse entre las asignaturas de *Fundamentos de Física III* y *Física Cuántica I y II*. En particular, la nueva y muy cuidada edición del legendario *Curso Feynman de Física* es de adquisición obligada por cualquier físico. Siempre podrá discutirse si la ordenación de temas es la más adecuada para el estudio autónomo, pero una vez que se tienen bien asentados los fundamentos su lectura es ineludible.

Los cuatro siguientes textos cubren el temario de la asignatura *Física Cuántica I*. **[Sánchez-Guillén]** es conciso y claro. **[Eisberg]** es una aproximación a la física cuántica bastante didáctica que evita los aspectos matemáticos más técnicos, haciendo más hincapié en los conceptos físicos. Su traducción al español, editada por Limusa, no es del todo satisfactoria por lo que recomendamos su consulta en el idioma original. **[French]** hace una exposición especialmente lúcida de la teoría cuántica con un nivel similar al que nosotros hemos adoptado. Finalmente **[Complutense]** es un trabajo colectivo escrito por varios profesores de la Universidad Complutense de Madrid. Su estudio puede resultar difícil debido a la multitud de enfoques que aparecen, pero como texto de consulta es excelente.

Por último, el texto de Levi tiene la peculiaridad de estar dirigido *específicamente* a ingenieros, no a físicos. Eso hace que su estudio sea enriquecedor al exponer los principios de la teoría cuántica de una manera muy pragmática y orientada a sus aplicaciones.

• FORMALISMO MATEMÁTICO DE LA FÍSICA CUÁNTICA:

[Guillespie] Daniel T. Guillespie, *A Quantum Mechanics Primer*; John Willey & Sons, 1970. (versión en español en Editorial Reverté).

[Dirac] P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*; Oxford University Press 1958. (versión española en Ariel, 1968).

[von Neumann] John von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton University Press 1996. (versión española *Fundamentos*

matemáticos de la Mecánica Cuántica publicada por el CSIC, 1991).

[Messiah] Albert Messiah, *Quantum Mechanics*; Dover 1999. (versión española en Editorial Tecnos, 1975).

[Galindo] Alberto Galindo y Pedro Pascual, *Mecánica Cuántica*; Eudema 1989.

Como su nombre indica, [Guillespie] es una introducción breve y sencilla al formalismo matemático. [Dirac] es una obra clásica con una claridad expositiva excepcional, cuya primera edición se remonta al año 1930. Es en este libro donde se presentó por primera vez de manera comprehensiva la teoría cuántica en la forma en la que la entendemos hoy en día. [von Neumann] es otra referencia clásica publicada originalmente en 1932. Von Neumann construye una base axiomática matemáticamente impecable y a partir de ella va desarrollando toda la teoría de manera secuencial. [Messiah] es otra cita obligada, donde puede encontrarse una exposición bastante inteligible de las matemáticas de la física cuántica. Finalmente, el excelente y muy completo [Galindo] es riguroso y conciso, lo que hace a veces muy arduo su estudio si no se tienen unos conocimientos matemáticos y físicos previos muy bien asentados. Una vez superadas las dificultades, su lectura es estimulante.

• MECÁNICA CUÁNTICA:

[Alonso] Marcelo Alonso, Henry Valk; *Mecánica Cuántica: Fundamentos y Aplicaciones*; Ediciones Universidad de Salamanca 2008.

[Peña] Luis de la Peña; *Introducción a la Mecánica Cuántica (3^a Edición)*; Ediciones Científicas Universitarias (Méjico) 2006.

[Yndurain] Francisco José Yndurain, *Mecánica Cuántica*, Alianza Universidad 1988.

[Cohen] Claude Cohen-Tannoudjii, Bernard Diu, Franck Laloë; *Quantum Mechanics (Volume One)*; John Wiley & Sons 1977.

[Gottfried] Kurt Gottfried and Tung-Mow Yan, *Quantum Mechanics: Fundamentals (2nd Edition)*; Springer 2003.

[Landau] Lev D. Landau and Evgeny M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, Pergamon 1977. (versión española en la Editorial Reverté).

[Le Bellac] Michel Le Bellac, *Quantum Physics*; Cambridge Univ. Press 2006.

Aunque su nivel es más adecuado a un curso de Mecánica Cuántica de cuarto curso de grado, queremos mencionar algunos textos que pueden complementar lo visto en la presente obra. Empezando con la bibliografía en castellano, [Alonso] es la traducción a nuestro idioma de un texto editado originalmente en 1973 por Addison Wesley en el

que podrá reconocer al primer autor de uno de los más famosos y mejores manuales de física general. No es entonces de extrañar que el texto que nos ocupa sea claro, preciso y “robusto” en el mejor sentido de la palabra. Únicamente se echa en falta un mayor número de ejemplos resueltos, pero esta es una crítica menor habida cuenta de que estamos hablando de un libro de nivel medio-alto. El desarrollo que hace [Peña] es también notable, aunque el lenguaje matemático es claramente más avanzado al que aquí hemos adoptado. [Yndurain] es bastante conciso pero claro.

[Cohen] es una de las mejores y más didácticas obras de física cuántica–mecánica cuántica existentes. En ella se exponen los aspectos más importantes de la teoría cuántica sin llegar al nivel de abstracción matemática de otros textos más formales. Las presentaciones que se hacen en las referencias clásicas [Gottfried] y [Landau] son claras y razonablemente concisas. [Le Bellac] es una aproximación más contemporánea a la mecánica cuántica y que contempla aspectos que apenas se tratan en obras más antiguas.

Naturalmente, los principios de la mecánica cuántica se presentan también en [Galindo], [Messiah] y [Dirac], donde pueden encontrarse interesantes discusiones aunque, como mencionamos en su presentación, con un nivel matemático más avanzado.

• MÉTODOS MATEMÁTICOS:

[Schwartz] Laurent Schwartz; *Mathematics for the Physical Sciences*, Dover 2008. (versión española en Selecciones Científicas).

[Churchill] James W. Brown, Ruel V. Churchill; *Complex Variables and Applications (8th Edition)*; McGraw-Hill 2008 (versión española en McGraw-Hill, 2010).

[Marsden] Jerrold E. Marsden, Anthony Tromba; *Vector calculus (5th Edition)*; W. H. Freeman 2003. (versión española en Addison-Wesley).

[Kolmogorov] Andrei N. Kolmogorov, Sergei V. Fomin; *Elements of the Theory of Functions and Functional Analysis*; Dover 1999. (versión española similar en la Editorial MIR de Moscú, 1978).

[Abellanas] Lorenzo Abellanas y Alberto Galindo, *Espacios de Hilbert*, Eudema 1988.

Las tres primeras referencias son obras clásicas que abordan la teoría de Fourier, los fundamentos de la teoría de funciones de variable compleja y el análisis vectorial, respectivamente. Están traducidas a nuestro idioma.

Por otra parte, la literatura sobre espacios de Hilbert es amplísima. Sin ánimo de ser exhaustivos sugerimos únicamente un par de referencias, por si desea profundizar en esta importantísima herramienta matemática. Son el texto clásico de Kolmogorov–Fomin

(en su reedición por la editorial Dover) y la muy pedagógica obra en castellano de Abellanas–Galindo

- **FÓRMULAS Y TABLAS MATEMÁTICAS:**

[Spiegel] Murray R. Spiegel, John Liu, Lorenzo Abellanas; *Fórmulas y tablas de matemática aplicada (2^a Edición)*, McGraw-Hill (Serie Schaum) 2000.

No es el compendio más completo, pero resulta más que suficiente para cualquier estudiante de grado en ciencias e ingeniería. En particular, presenta de manera compacta las propiedades más importantes de las *funciones especiales* (de Bessel, de Hermite, hipergeométricas, de Legendre, armónicos esféricos, etc.) así como resúmenes de las herramientas matemáticas más importantes (cálculo integro-diferencial, transformadas de Fourier, teoría de grupos, etc.)

- **ASPECTOS HISTÓRICOS:**

[del Río] Carlos Sánchez del Río, *Los Principios de la Física en su Evolución Histórica*, Instituto de España, 2004.

[Peacock] Kent A. Peacock, *The Quantum Revolution: A Historical Perspective*; Greenwood, 2008.

[Gamow] George Gamow, *Biografía de la Física*; Alianza Editorial, 2001.

El lector interesado puede consultar libros sobre historia del física y así contextualizar adecuadamente los descubrimientos capitales que se realizaron en el primer tercio del siglo pasado. El libro de Sánchez del Río es notable al conjugar el análisis histórico con la discusión detallada de la física de los fenómenos. La segunda referencia mezcla de manera original tanto la historia como las consecuencias epistemológicas de la teoría cuántica desde el punto de vista de un especialista en Filosofía de la Ciencia. El libro de Gamow es muy interesante, ameno e informativo.¹

- **PROBLEMAS CONCEPTUALES EN MECÁNICA CUÁNTICA:**

[d'Espagnat] Bernard d'Espagnat, *Conceptual Foundations of Quantum Mechanics (2nd Edition)*, Perseus 1999.

[Peres] Asher Peres, *Quantum Theory: Concepts and Methods*. Kluwer 2002.

¹ George Gamow, al que nunca se le concedió el premio Nobel, realizó su ampliación postdoctoral de estudios con Niels Bohr, presenciando desde una posición privilegiada el nacimiento y desarrollo de la revolución cuántica de los años 20 del siglo pasado.

FÍSICA CUÁNTICA I.

La profundización en las muchas sutilezas epistemológicas de la mecánica cuántica debe hacerse únicamente en cursos más especializados de grado y de posgrado. Aún así, y por completitud, mencionamos estas dos excelentes obras. La primera es un texto clásico de la disciplina, sucesivamente reeditado, mientras que la segunda es más contemporánea.

ÍNDICE DE SÍMBOLOS

• • • • • USO GENÉRICO DE SÍMBOLOS

a, b, \dots	Escalares (reales o complejos)
a^*	Complejo conjugado de a
$ a $	Módulo de a
$\arg(a)$	Argumento de a
$\Re(a)$	Parte real de a
$\Im(a)$	Parte imaginaria de a
$\mathbf{a}, \mathbf{b}, \dots$	Vectores (reales o complejos)
\mathbf{a}^*	Vector complejo conjugado de \mathbf{a}
$ \mathbf{a} , a$	Módulo del vector \mathbf{a} [si \mathbf{a} es complejo, $ \mathbf{a} = (\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{a})^{1/2}$]
a_n	Componente n -ésima del vector \mathbf{a}
	Elemento n -ésimo de la sucesión $\{a_n\}$
A, B, \dots	Escalar
	Magnitud física escalar
\hat{A}, \hat{B}, \dots	Operador
\hat{A}	Operador representativo de una magnitud A
\hat{A}^\dagger	Operador adjunto de \hat{A}
$\mathbb{A}, \mathbb{B}, \dots$	Matrices
\mathbb{A}	Representación matricial del operador \hat{A}
\mathbb{A}^t	Matriz traspuesta de \mathbb{A}
\mathbb{A}^\dagger	Matriz traspuesta y conjugada (adjunta) de \mathbb{A}
$\mathbb{A}_{i,j}$	Elemento de la matriz \mathbb{A}
$\mathbf{A}, \mathbf{B}, \dots$	Vector. Magnitud física vectorial
α, β, \dots	Escalares (reales o complejos)
$\{A, B, \dots\}$	Conjunto formado por A, B, \dots
$ \Psi\rangle, \Phi\rangle, \dots$	Vectores (kets) de un espacio de Hilbert
Ψ, Φ, \dots	Función de onda
$\ \Psi\ $	Norma de $ \Psi\rangle$
$\langle \Psi , \langle \Phi $	Covectores (bras) de un espacio de Hilbert
\mathcal{W}	Subespacio lineal
\mathcal{W}^\perp	Complemento ortogonal de \mathcal{W}

• • • • • RELACIONES MATEMÁTICAS

$<; >$	Menor que; mayor que
$\leq; \geq$	Menor o igual que; mayor o igual que
$\ll; \gg$	Mucho menor que; mucho mayor que

$\lesssim; \gtrsim$	Aproximadamente menor que; aproximadamente mayor que
$=$	Igual
\neq	Distinto
\equiv	Equivalente
$\stackrel{\text{Igual por definición}}$	
\simeq	Aproximadamente igual
\sim	Del mismo orden de magnitud
$\in; \notin$	Perteneciente a; no perteneciente a
$\subset; \not\subset$	Incluido en; excluido de

• • • • OPERACIONES

$+$	Suma
$-$	Resta
\times	Multiplicación
\cdot	Producto vectorial de vectores euclídeos
\cdot	Multiplicación
$/$	Producto escalar de vectores euclídeos
\cup	División
\cap	Unión
$*$	Intersección
\otimes	Producto de convolución de dos funciones
\oplus	Producto tensorial de vectores de un espacio de Hilbert
$\langle A \rangle$	Suma directa de subespacios lineales
$\langle \Psi \Phi \rangle$	Valor medio de la magnitud A
$\hat{\Psi}$	Producto escalar de los vectores $ \Psi\rangle$ y $ \Phi\rangle$ de un espacio de Hilbert
	Representación recíproca (o en momentos) de Ψ

• • • • SÍMBOLOS LATINOS

a	Longitud, distancia
a_0	Aceleración (módulo, componente)
a_E	Radio de Bohr
\mathbf{a}	Elemento de matriz de transmisión
\hat{a}	Vector de posición
\hat{a}^\dagger	Operador de destrucción en un oscilador armónico
$\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}, \dots$	Operador de creación en un oscilador armónico
\mathbf{A}	Coefficientes en una función de onda, constante de normalización, etc.
\mathbf{A}	Potencial vector complejo de un campo electromagnético
$\text{Ai}(u)$	Potencial vector físico (real) de un campo electromagnético
\AA	Función de Airy
	Amstrong (unidad de longitud)
b	Longitud, distancia
\mathbf{b}	Vector de posición
\mathcal{B}	Coefficiente en una función de onda, constante de normalización
\mathcal{B}	Base de representación

ÍNDICE DE SÍMBOLOS

B(r)	Campo magnético (complejo)
B(r)	Campo magnético (real)
Bi(u)	Función de Airy
<i>c</i>	Velocidad de la luz
c_n	Coordenada n -ésima de la función $\Psi(\mathbf{r})$
\mathcal{C}	Coeficiente en una función de onda, constante de normalización
\mathbb{C}	Cuerpo de los números complejos
\mathbb{C}_2^∞	Espacio de Hilbert de sucesiones complejas de cuadrado sumable
d	Longitud, distancia
$\mathcal{D}(\hat{A})$	Dominio del operador \hat{A}
\hat{D}	Operador derivada
dim	Dimensión algebraica
e	Carga del electrón en valor absoluto
E	Energía
E(r)	Campo eléctrico (complejo)
E(r)	Campo eléctrico (real)
\mathcal{E}	Espacio de Hilbert de los estados
f_n	Coordenada enésima de la función $\Phi(\mathbf{r})$
F	Fuerza
\hat{F}_i	Operador de la componente i de una fuerza ($i = x, y, z$)
\mathcal{F}	Símbolo de transformada de Fourier
F[a,b,x]	Función hipergeométrica
g	Degeneración de un nivel energético
G_N	Constante de gravitación universal
h	Constante de Planck
\hbar	Constante de Planck racionalizada
$\mathfrak{h}_n(u)$	n -ésimo polinomio de Hermite
\mathcal{H}	Espacio de Hilbert (genérico)
H	Energía mecánica de un sistema
\hat{H}	Operador hamiltoniano
i	Índice de degeneración (genérico)
i	Unidad imaginaria ($\sqrt{-1}$)
$\hat{\mathrm{I}}$	Operador identidad
\mathbb{I}	Matriz unidad
j	Índice de degeneración (genérico)
J(r)	Densidad de corriente de probabilidad (vectorial)
J(r)	Densidad de corriente de probabilidad (componente)
$\mathcal{J}_c(\mathbf{r})$	Densidad de carga (fuente de un campo EM)

$J_n(u)$	Función de Bessel de orden n
k	Número de onda
K	Energía cinética
\hat{K}	Operador de energía cinética
K_e	Constante elástica de un muelle
\mathbf{k}	Vector de onda
ℓ	Número cuántico angular
\mathbf{L}	Momento angular o cinético
L_i	Componente i -ésima del momento angular
\hat{L}_i	Operador de la componente i -ésima del momento angular
L^2	Módulo al cuadrado del momento angular
\hat{L}^2	Operador módulo al cuadrado del momento angular
$\mathcal{L}^2(\mathbb{U})$	Espacio de Hilbert de funciones de onda de cuadrado integrable definidas en la región \mathbb{U}
$\mathcal{L}_{\text{rad}}^2$	Espacio de Hilbert de funciones de onda radiales
$\mathcal{L}_{\text{ang}}^2$	Espacio de Hilbert de funciones de onda angulares
\mathbf{M}	Momento de una fuerza
M	Masa
m	Número cuántico magnético (asociado a \hat{L}_z)
m_e	Masa del electrón
m_p	Masa del protón
m_n	Masa del neutrón
\mathcal{M}	Dispositivo genérico de medida
n	Número cuántico (genérico)
	Densidad de partículas
	Número cuántico (asociado a la energía)
N_A	Número de Avogadro
N	Número de estados estacionarios ligados de un potencial
\mathbb{N}	Conjunto de los números naturales
n_r	Número cuántico radial
$ nul\rangle$	Ket nulo de un espacio de Hilbert de los estados
\hat{n}	Operador número en el oscilador armónico cuántico
\mathbf{p}, \mathbf{P}	Momento lineal
p_i, P_i	Componente i -ésima del momento lineal
\hat{p}_i	Operador de la componente i -ésima del momento lineal
$\hat{\mathcal{P}}$	Proyector ortogonal
\Pr	Probabilidad de ocurrencia
$P_{\ell,m}(u)$	Función especial de Legendre
\mathcal{P}	Presión

q	Carga
\mathbb{Q}	Número de onda
\mathbb{Q}	Conjunto de los números racionales
\mathbf{q}	Momento lineal
	Vector de onda
r	Coordenada radial
\mathbf{r}	Vector de posición
R	Radio
\mathbb{R}	Conjunto de los números reales
\mathbb{R}^+	Conjunto de los números reales positivos
\mathcal{R}	Coeficiente de reflexión
\mathbf{r}_E	Coeficiente de matriz de transmisión
$R(r)$	Función radial
$\mathcal{R}(\hat{A})$	Recorrido de un operador
s	Espín
\mathcal{S}	Superficie
\mathcal{S}_1	Superficie esférica de radio unidad
t	Tiempo
T	Periodo de oscilación
\mathcal{T}	Coeficiente de transmisión
\mathbb{T}	Matriz de transmisión
u	Variable adimensional
\mathbf{u}	Vector unitario
\hat{U}	Operador de evolución temporal
$u(r)$	Función radial reducida
\mathbf{v}	Velocidad
v	Velocidad (módulo o componente)
\mathcal{V}	Volumen
$V(\mathbf{r})$	Energía potencial
\hat{V}	Operador de energía potencial
w	Potencia
\mathcal{W}	Subespacio de Hilbert
x	Componente de la posición
	Variable (genérica)
\hat{x}	Operador asociado a x

y	Componente de la posición
\hat{y}	Operador asociado a y
$Y_{\ell,m}$	Armónico esférico
z	Componente de la posición
\hat{z}	Operador asociado a z
\mathbb{Z}	Conjunto de los números enteros

• • • •

SÍMBOLOS GRIEGOS

α	Constante de estructura fina
δ	Longitud natural de un oscilador armónico
$\psi(\mathbf{r})$	Función de onda
$\Psi(\mathbf{r})$	Función de onda (generalmente normalizable y no estacionaria)
$\delta(\mathbf{r})$	Función delta de Dirac
$\delta_{i,j}$	Delta de Kronecker
δ	Elemento infinitesimal
ΔA	Incertidumbre de la magnitud A
ε	Energía del espectro continuo
ϵ_0	Energía adimensionalizada
$\phi(\mathbf{r})$	Permitividad eléctrica del vacío
$\Phi(\mathbf{r})$	Función de onda
γ	Función de onda (generalmente autofunción de la energía)
Γ	Fotón
η	Subíndice para indicar una integral de línea a lo largo de la curva γ
φ	Anchura de resonancia
κ	Número de onda
λ	Ángulo azimutal (coordenadas esféricas y polares)
λ_e	Variable adimensional
$\Lambda(\mathbf{r})$	Longitud de onda
ν	Índice continuo
π	Longitud de onda Compton del electrón
$\hat{\pi}$	Función de onda (generalmente no normalizable)
$\hat{\Pi}$	Frecuencia
ρ	Operador paridad
$\rho(\mathbf{r})$	Variable radial (coordenadas cilíndricas)
ρ_A	Variable radial adimensionalizada
σ	Densidad de probabilidad (posiciones)
σ_p	Densidad de probabilidad (correspondiente a una magnitud A)
σ_c	Espectro de un operador (de una magnitud)
Σ	Espectro puntual
	Espectro continuo
	Sumatorio

ÍNDICE DE SÍMBOLOS

τ	Subíndice para indicar una integral de superficie
	Tiempo
	Vida media
$\Upsilon(\mathbf{r})$	Función de onda (no normalizable)
ω	Frecuencia natural o pulsación
Ω	Ángulo sólido
θ	Coordenada polar (coordenadas esféricas)
$\theta_p(\mathbf{r})$	Función de onda De Broglie
$\Theta(\mathbf{r})$	Función de onda
$\Theta(u)$	Función de Heavyside
$\vartheta(\mathbf{r})$	Función de onda

CONSTANTES FÍSICAS

Constante de estructura fina	$\alpha = 1/137,036$
Radio de Bohr	$a_0 = 5,191771 \times 10^{-10} \text{ m}$
Velocidad de la luz	$c = 2,997925 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$
Carga del electrón en valor absoluto	$e = 1,602189 \times 10^{-19} \text{ C}$
Constante de gravitación universal	$G_N = 6,672 \times 10^{-11} \text{ m}^3\text{kg}^{-1}\text{s}^{-2}$
Constante de Planck reducida	$\hbar = 1,054589 \times 10^{-34} \text{ J s}$
Constante de Boltzmann	$k_B = 1,380662 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
Longitud de onda Compton del electrón	$\lambda_e = 2,42630 \times 10^{-12} \text{ m}$
Masa del electrón	$m_e = 9,109534 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Masa del protón	$m_p = 1826,152 m_e$

ÍNDICE ALFABÉTICO

- análisis de Fourier, 13, 79
análisis dimensional, 62
anchura en frecuencias, 16
aproximación armónica, 399
armónico (componente), 15
armónico esférico, 264
autoenergía, 193
autoestado, 155
autofunción, 155, 193
autovalor, 155
axiomas de Kolmogorov, 167
- barrera de potencial
asimétrica, 342
rectangular, 336
tipo delta, 359
triangular, 345
- base de representación
en momentos, 125
en posiciones, 125
general, 125
ortonormal, 121
propia, 164
- Bohr (unidad), 58
Bohr, Niels, 99
- bra, 137, 423
- campo electromagnético, 5
campo escalar
definición, 412
gradiente, 413
laplaciano, 413
- campo vectorial
circulación, 412
definición, 412
divergencia, 414
flujo, 412
laplaciano, 415
rotacional, 414
- catástrofe del ultravioleta, 43
cavidad radiante, 39
CCOC, 237
coherencia
en electromagnetismo, 25
en física cuántica, 248
- compatibilidad, 232
complementariedad, 99
complemento ortogonal, 127
condición de contorno, 39
conjunto cerrado, 116
conmutador, 132, 211
constante de Boltzmann, 41
constante de estructura fina, 62
constante de normalización, 82
constante de Planck, 32
constante del movimiento, 212
coordenadas
de un estado, 136
de una función de onda, 120
- coordenadas ortogonales
cartesianas, 408
cilíndricas, 410
curvilíneas generalizadas, 411
esféricas, 408
- corchete de Poisson, 215
corriente de probabilidad, 189
corriente tunel, 347
covector, véase bra
- cuantización
de la energía, 195
definición general, 157
del momento angular, 158
- cuasi-autoestado, 159
- degeneración, 156, 165
degeneración accidental, 282, 394
delta de Dirac, 14, 118

- delta de Kronecker, 121
- densidad de probabilidad
 - para el momento lineal, 80
 - para la posición, 81
 - para una magnitud, 166
- densidad de probabilidad radial, 259
- derivada en distribuciones, 427
- descomposiciónpectral, 251
- desigualdad de Schwarz, 82
- desigualdad triangular, 104
- desigualdades de Heisenberg, 98
- diferencias finitas, 188
- difracción (en EM)
 - caso general, 20
 - por dos rendijas, 23
 - por una rendija, 22
- difracción de Fraunhofer, 91
- difracción de partículas
 - caso general, 88
 - por dos rendijas, 67
 - por una rendija ancha, 90
 - por una rendija estrecha, 88
- Dirac, P.A.M., 136
- dispersión cuadrática media, 16, 84
- distribución temperada, 423
- dualidad onda-corpúsculo, 99
- ecuación de autovalores, 155, 193
- ecuación de continuidad
 - en electromagnetismo, 5
 - en física cuántica, 189
- ecuación de Heisenberg, 218
- ecuación de Helmholtz, 9
- ecuación de Liouville, 215
- ecuación de Schrödinger
 - en una dimensión, 294
 - independiente del tiempo, 193, 294
 - para una partícula puntual, 182
 - radial reducida, 280, 393
 - representación en momentos, 184
 - solución general, 200
- ecuación diferencial
 - de Hermite, 366
- ecuación diferencial asociada de Legendre, 265
- ecuaciones de Hamilton, 215
- ecuaciones de Maxwell, 5
- efecto Compton, 49
- efecto fotoeléctrico, 31
- efecto Ramsauer, 339
- efecto túnel, 341
- elemento de matriz, 133
- energía de Fermi, 347
- energía del punto cero, 105
- entrelazado, 139
- entrelazamiento, 253
- espacio de Hilbert
 - criterios de convergencia, 422
 - de las funciones de onda, 116
 - de los estados, 136
 - equipamiento, 426
 - separable, 121
- espacio de las fases, 111
- esparcimiento de radiación, 21
- esparcimiento de Thomson, 48
- espectro
 - continuo, 160
 - de una magnitud, 163
 - puntual, 155
- estadística de Maxwell-Boltzmann, 41
- estado coherente, 386
- estado cuántico, 68
- estado cuasiestacionario, 196
- estado estacionario
 - de colisión, 198, 324
 - definición general, 192
 - ligado, 198, 299
- estado propio, *véase* autoestado
- fórmula de Gamow, 345
- forma lineal, *véase* bra
- fotón
 - densidad (en un pulso EM), 36
 - energía, 32
 - espín, 39
 - estado dinámico, 36
 - frecuencia, 73
 - longitud de onda, 73
 - momento angular intrínseco, 39
 - momento lineal, 32

- frecuencia media, 16
 fuente del campo EM, 5
 fuerza central, 392
 fuerza de Lorentz, 5
 fullereno, 104
 función cuasimonocromática, 16
 función de Bessel, 284
 función de cuadrado integrable, 81
 función de Heavyside, 427
 función de onda
 De Broglie, 76, 118
 de una partícula, 69, 75
 ensanchamiento, 178
 gaussiana, 100, 178
 lorentziana, 84
 norma, 81
 propagación libre, 175
 representación algebraica, 122
 representación en energías, 200
 representación en momentos, 79
 representación en posiciones, 80
 función de partición, 41
 función de trabajo, 33, 347
 función especial de Legendre, 266
 función hipergeométrica, 393
 función radial reducida, 280
 funcional, 423
 funciones de Airy, 197
 funciones de Hermite, 123, 367
 funciones de Schwartz, 117
- Gauss, Carl Friedrich, 416
- Hartree (unidad), 59
 Heisenberg, Werner, 218
- identidades de Green, 416
 igualdad c.d., 420
 imagen
 de Heisenberg, 218
 incertidumbre, 84, 93
 integral de Lebesgue, 419
 interferómetro de Young, 23, 66
 interferencia
 de un haz de partículas, 88
- en electromagnetismo, 20
 interpretación de Copenhague, 99
 interpretación probabilística
 de la función de onda, 80
 del estado dinámico de un fotón, 36
 general, 166
 para la energía, 202
 postulado, 245
 isomorfismo, 136
- jacobiano de una transformación, 411
- ket, 136, 423
- ley de Stefan, 46
 ley del desplazamiento de Wien, 46
 longitud de onda Compton, 49
 longitud de onda De Broglie, 74
- medida
 en física cuántica, 227
 ideal, 228
 medida ideal, 71
 mezcla incoherente
 de ondas de materia, 90
 en electromagnetismo, 27
 modulación de ondas planas, 13
 momento angular
 autofunciones, 263
 multiplicidad, véase degeneración
- número cuántico, 126, 165, 200, 237
 angular, 281
 magnético, 281
 nivel de energía
 excitado, 199
 fundamental, 199
 nodo, 300
 notación de Dirac, 137
- onda cilíndrica, 23, 88
 onda de materia, 69, 74
 onda electromagnética, 6
 onda esférica, 21
 onda secundaria, 22
 operaciones con vectores, 405

- operador
 - adjunto, 131
 - autoadjunto, 131
 - creación, 377
 - de evolución temporal, 187
 - definición general, 128
 - destrucción, 377
 - dominio, 128
 - energía cinética, 151, 170
 - energía potencial, 150
 - hamiltoniano, 151, 182
 - lineal, 129
 - momento angular, 153
 - momento lineal, 148
 - número, 378
 - posición, 148
 - proyector ortogonal, 130, 229
 - regla de actuación, 128
 - representación matricial, 133
 - simétrico, 130
 - unitario, 130
- operador de escalera, 269
- operador vectorial lambda, 417
- operador vectorial nabla, 417
- ortogonalidad
 - de funciones de onda, 113
- oscilador armónico
 - anisótropo, 391
 - autoenergías, 367
 - en varias dimensiones, 390
 - estados estacionarios, 367
 - hamiltoniano, 364
 - isótropo, 391, 399
 - longitud natural, 364
- paquete de ondas, 176
- permeabilidad magnética, 5
- permitividad eléctrica, 5
- postulado de Bohr, 158
- postulado de reducción, 231, 246
- postulados de la mecánica cuántica, 244
- potencial constante a trozos, 301
- potencial de Lenard-Jones, 398
- potencial electromagnético vector, 8
- potencial escalón
 - de altura finita, 332
 - infinito, 221
- pozo cuántico, 208
- pozo de potencial
 - asimétrico, 320
 - cuadrado finito, 305, 359
 - cuadrado infinito, 208, 313
 - semi-infinito, 315
 - tipo delta, 313
- preparación, 65, 229
- principio de correspondencia, 245
- principio de Huygens-Fresnel, 21
- principio de incertidumbre, 72, 98, 242
- principio de indistinguibilidad, 245
- principio de superposición
 - en electromagnetismo, 6
 - en física cuántica, 79, 244
- probabilidad de ocurrencia, 166
- problema de la cavidad radiante, 42
- problema de la medida, 232, 247
- producto de convolución, 28
- producto escalar, 112
- producto tensorial, 139
- proyección ortogonal, 127
- proyector espectral, 230
- punto cuántico, 208
- punto cuántico esférico, 283
- quanta de luz, 32
- radiómetro de Crookes, 60
- radiación electromagnética
 - densidad de energía, 7, 18, 19
 - densidad de momento lineal, 7
 - densidad espectral de energía, 42
 - ecuación de estado, 61
 - ecuación de onda, 8
 - estacionaria, 41
 - intensidad, 12
 - libre, 6, 8
 - longitud de onda, 10
 - modo normal, 18
 - monocromática, 9
 - plana, 10
 - polarización, 39

- presión, 55
- pulso, 13
- red de difracción, 102
- reflexión en una dimensión, 326, 330
- reglas de conmutación
 - canónicas, 149, 242
 - del momento angular, 236, 257
- reglas de correspondencia, 152
- relación de cierre, 126
- relación de dispersión
 - en electromagnetismo, 10
 - para ondas de materia, 77
- relación de incertidumbre
 - energía-tiempo, 243
 - generalizada, 240
 - posición-momento, 98
- representación compleja, 9
- representación recíproca, 14
- resonancia, 354
- Schrödinger, Erwin, 217
- simetría de inversión espacial, 219
- sistema separable, 207
- STM, 347
- Stokes, George, 416
- subbanda de energías, 210
- subconjunto denso, 117
- subespacio propio, 156, 170, 230
- sucesión de Cauchy, 421
- superposición coherente
 - de ondas de materia, 89
 - en electromagnetismo, 27
- término de degeneración, 102
- tensor de Levi-Civita, 415
- teorema de compatibilidad, 234
- teorema de convolución, 28
- teorema de equipartición, 41
- teorema de Gauss, 416
- teorema de la proyección ortogonal, 127
- teorema de Parseval, 14, 79
- teorema de Riesz-Fischer, 121
- teorema de Stokes, 416
- teorema de Sturm, 300
- teorema del virial
- en general, 372
- para un oscilador armónico, 371
- teorema espectral, 164
- teoremas de Ehrenfest, 192, 211, 373
- tiempo propio de evolución
 - de un estado, 244
 - de una magnitud, 242
- transformada de Fourier, 13
- transmisión en una dimensión, 330
- transmisión resonante, 356
- unidades atómicas, 57
- valor esperado, *véase* valor medio
- valor medio, 83, 166
- valor permitido, 163
- valor propio, *véase* autovalor
- variables ocultas, 100
- vector de estado, *véase* ket
- vector de onda, 10
- vector de posición, 405
- vector de Poynting, 7
- velero solar, 56
- velocidad de fase, 74, 177
- velocidad de grupo, 176
- velocidad de la luz, 5
- Young, Thomas, 23
- zona clásicamente prohibida, 222, 300



Juan del Rosal, 14
28040 MADRID
Tel. Dirección Editorial: 913 987 521