



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA  
UNIDAD CUAJIMALPA

Departamento de Matemáticas Aplicadas y Sistemas

*Licenciatura en Matemáticas Aplicadas*

**Proyecto Terminal:**  
Fotosíntesis Cuántica

Alumno:  
**Ángel Cáceres Licona**  
Matrícula: 2133067715  
angelcaceres@outlook.com

**Asesor: Juan Manuel Romero Sanpedro**

**Ciudad de México, diciembre de 2018**

# Índice

0.1	Introducción . . . . .	4
<b>1</b>	<b>Ondas</b>	<b>5</b>
1.1	Movimiento armónico simple . . . . .	5
1.2	Superposición de dos vibraciones de la misma frecuencia . . . .	11
1.3	Superposición de dos vibraciones de diferente frecuencia . . . .	15
1.4	El oscilador con dos masas . . . . .	15
1.5	Modos Normales . . . . .	18
1.6	Oscilador con tres masas . . . . .	19
1.7	Oscilador con $N$ masas . . . . .	20
1.8	$N \rightarrow \infty$ la ecuación de onda . . . . .	23
1.9	El principio de Hamilton . . . . .	25
1.10	La energía del sistema Lagrangiano . . . . .	27
<b>2</b>	<b>El modelo de Ising</b>	<b>31</b>
2.1	El modelo de Ising unidimensional . . . . .	31
2.1.1	Un ejemplo de aplicación: Teoría de juegos. . . . .	34
2.1.2	El caso de $N$ jugadores y 2 estrategias . . . . .	34
2.1.3	Analogías con los sistemas termodinámicos . . . . .	35
2.1.4	Una aplicación a la ciencia poliítica . . . . .	37
2.2	El modelo de Ising bidimensional . . . . .	38
2.3	Aproximación del campo promedio para un enrejado en $d$ di- mensiones . . . . .	41
2.4	Simulación por computadora. . . . .	45
<b>3</b>	<b>El oscilador armónico cuántico unidimensional</b>	<b>49</b>
3.1	Operadores lineales . . . . .	49
3.2	Operadores Hermíticos . . . . .	51
3.3	Oscilador armónico . . . . .	52
3.4	El principio de incertidumbre de Heisenberg . . . . .	56

3.5	Solución a la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico unidimensional . . . . .	58
<b>4</b>	<b>Ondas electromagnéticas</b>	<b>61</b>
4.1	Ecuaciones de Maxwell y ondas electromagnéticas . . . . .	62
4.2	Ondas planas . . . . .	64
4.3	Polarización . . . . .	65
4.4	Interacción materia con luz . . . . .	67
4.5	Fotosíntesis . . . . .	67
<b>5</b>	<b>Principios cuánticos de la luz</b>	<b>68</b>
<b>6</b>	<b>Entrelazamiento cuántico</b>	<b>69</b>
<b>7</b>	<b>Fotosíntesis cuántica</b>	<b>70</b>
<b>8</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>71</b>

## 0.1 Introducción

La biofísica ha sido una herramienta que nos ayude a explicar fenómenos biológicos. Desde el renacimiento, Leonardo Da Vinci estudió la anatomía humana para aplicar este conocimiento a la construcción de autómatas [2]. Más tarde, en 1760, Daniel Bernoulli presentó un trabajo en el que usó un modelo matemático a para estudiar los beneficios de la vacunación y cómo se transmiten enfermedades infecciosas dentro de una población [4]. A partir de 1780, buscando explicar propiedades de la electricidad, el físico italiano Luigi Galvani hizo experimentos con ranas muertas, en concreto hacía pasar una corriente por su médula espinal mostrando contracciones musculares que hacían saltar al animal igual que cuando estaba vivo [3]. La investigación de Henri Becquerel, Pierre y Marie Curie dio origen a la radioterapia para destruir tumores y a los rayos X que se usan con fines de exploración médica. En resumen, el proceso histórico ha sido largo.

Gracias a estos antecedentes históricos, en la actualidad, la mecánica cuántica aparece como una herramienta para abordar algunos problemas relacionados con sistemas biológicos. Vale la pena hacer notar que Erwin Schrödinger, uno de los fundadores de la mecánica cuántica, en su obra *What is life* de 1944, fue uno de los primeros en abordar temas biológicos desde el punto de vista de la mecánica cuántica [7]. En efecto, en una época en la que el ADN aún no era aceptado como el portador de la información hereditaria, Schrödinger plantea la existencia de una molécula genética con propiedades que pueden ser explicadas por la mecánica cuántica [7]. En definitiva sus aportaciones son fundamentales para llegar al concepto de biofísica actual.

Actualmente hay evidencia de que algunos organismos vivos podrían aprovechar algunas de las características únicas de la mecánica cuántica para poder ganar alguna ventaja biológica. En el caso de la fotosíntesis, los efectos cuánticos habían sido medidos en escalas nanométricas, rodeados de un vacío casi perfecto, a temperaturas del orden de 77 K, es decir  $-200^{\circ}\text{C}$  [11]. Dado que los seres vivos, el objeto de estudio de la Biología, vivimos en condiciones distintas a las del experimento mencionado, es importante poder medir los efectos cuánticos a temperatura ambiente, algo conseguido en 2010 por Collini, Wong, Wilk, Curmi, Brumer y Scholes [12]. Un mejor entendimiento del papel de los efectos cuánticos en sistemas biológicos podría ayudarnos a conseguir la meta del cómputo cuántico, tener mejores dispositivos de almacenamiento o mejores celdas solares orgánicas. Por esta razón son tan importantes estos avances.

# Capítulo 1

## Ondas

En este capítulo se resolverá la ecuación diferencial para un oscilador simple, luego para dos osciladores con la misma fase y distinta fase. Se resolverá la ecuación del oscilador con dos masas, tres masas,  $n$  masas y se demostrará que, cuando el número de masas  $n \rightarrow \infty$  lo que se obtiene es una ecuación de onda. También se mostrará la solución a la ecuación de onda.

### 1.1 Movimiento armónico simple

En esta sección se describe el movimiento armónico simple como un movimiento periódico y vibratorio sin fricción. La segunda ley de Newton para un oscilador de masa  $m$  y constante  $k$  es

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -kx(t), \quad (1.1)$$

esto implica

$$\frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -\frac{k}{m}x(t).$$

Esta ecuación se debe resolver con las condiciones iniciales

$$x(0) = x_0, \quad (1.2)$$

$$\dot{x}(0) = v_0. \quad (1.3)$$

Como soluciones a (1.1) proponemos funciones que al derivarlas dos veces nos de la misma función.

La primer solución propuesta, su primer y segunda derivada son:

$$\begin{aligned}x_1(t) &= A \sin(bt), \\ \dot{x}_1(t) &= Ab \cos(bt), \\ \ddot{x}_1(t) &= -Ab^2 \sin(bt).\end{aligned}\tag{1.4}$$

Ahora buscamos el valor de  $b$  que satisface (1.1) :

$$\begin{aligned}-Ab^2 \sin(bt) &= -\frac{k}{m}A \sin(bt), \\ b^2 &= \frac{k}{m}, \\ b &= \sqrt{\frac{k}{m}},\end{aligned}$$

esto implica

$$x_1(t) = A \sin\left(\frac{k}{m}t\right).$$

La segunda función propuesta, su primer y segunda derivada son:

$$\begin{aligned}x_2(t) &= B \cos(ft), \\ \dot{x}_2(t) &= -Bf \sin(ft), \\ \ddot{x}_2(t) &= -Bf^2 \cos(ft).\end{aligned}\tag{1.5}$$

Buscamos el valor de  $f$  que satisface (1.1):

$$\begin{aligned}-Bf^2 \cos(ft) &= -\frac{k}{m}B \cos(ft), \\ f^2 &= \frac{k}{m}, \\ f &= \sqrt{\frac{k}{m}},\end{aligned}$$

esto implica

$$x_2(t) = B \sin\left(\frac{k}{m}t\right).$$

Tenemos (1.4) y (1.5) que satisfacen (1.1), ahora sólo falta buscar la solución más general. La solución más general está dada por la combinación lineal de

las soluciones (1.4) y (1.5).

Entonces, la solución  $x(t)$  es:

$$x(t) = A \sin \left( \sqrt{\frac{k}{m}} t \right) + B \cos \left( \sqrt{\frac{k}{m}} t \right). \quad (1.6)$$

Obtenemos su primer y segunda derivada.

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= A \sqrt{\frac{k}{m}} \cos \left( \sqrt{\frac{k}{m}} t \right) - B \sqrt{\frac{k}{m}} \sin \left( \sqrt{\frac{k}{m}} t \right), \\ &= \sqrt{\frac{k}{m}} \left( A \cos \left( \sqrt{\frac{k}{m}} t \right) - B \sin \left( \sqrt{\frac{k}{m}} t \right) \right), \\ \ddot{x}(t) &= \sqrt{\frac{k}{m}} \left( -A \sqrt{\frac{k}{m}} \sin \left( \sqrt{\frac{k}{m}} t \right) - B \sqrt{\frac{k}{m}} \cos \left( \sqrt{\frac{k}{m}} t \right) \right), \\ &= -\sqrt{\frac{k}{m}} \sqrt{\frac{k}{m}} \left( A \sin \left( \sqrt{\frac{k}{m}} t \right) + B \cos \left( \sqrt{\frac{k}{m}} t \right) \right), \\ &= -\frac{k}{m} \left( A \sin \left( \sqrt{\frac{k}{m}} t \right) + B \cos \left( \sqrt{\frac{k}{m}} t \right) \right). \end{aligned}$$

Y verificamos que efectivamente obtuvimos lo que buscábamos

$$\frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -\frac{k}{m} x(t).$$

Ahora, revisamos las condiciones iniciales (1.2) y (1.3).

Evaluamos (1.6) en  $t = 0$  para revisar la condición inicial (1.2) y obtenemos que

$$x(0) = B = x_0.$$

Luego evaluamos (1.7) en  $t = 0$  para revisar la condición inicial (1.3) y obtenemos que

$$\begin{aligned} \dot{x}(0) &= \sqrt{\frac{k}{m}} A = v_0, \\ A &= \frac{v_0}{\sqrt{\frac{k}{m}}}. \end{aligned}$$

De ahí concluimos que la solución a la ecuación diferencial con condiciones iniciales es

$$x(t) = \frac{v_0}{\sqrt{\frac{k}{m}}} \sin\left(\frac{k}{m}t\right) + x_0 \cos\left(\frac{k}{m}t\right).$$

Esta misma ecuación se puede escribir como

$$x(t) = E \cos(at + \phi).$$

Se comprueba de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} E \cos(at + \phi) &= \frac{v_0}{\sqrt{\frac{k}{m}}} \sin\left(\frac{k}{m}t\right) + x_0 \cos\left(\frac{k}{m}t\right), \\ E(\cos(at) \cos(\phi) - \sin(at) \sin(\phi)) &= \frac{v_0}{\sqrt{\frac{k}{m}}} \sin\left(\frac{k}{m}t\right) + x_0 \cos\left(\frac{k}{m}t\right). \end{aligned}$$

Tomamos la parte que tiene seno:

$$-E \sin(at) \sin(\phi) = \frac{v_0}{\sqrt{\frac{k}{m}}} \sin\left(\frac{k}{m}t\right).$$

Y la que tiene coseno:

$$E \cos(at) \cos(\phi) = x_0 \cos\left(\frac{k}{m}t\right).$$

Se sigue de inmediato que

$$a = \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

Entonces:

$$\begin{aligned} -E \sin\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right) \sin(\phi) &= \frac{v_0}{\sqrt{\frac{k}{m}}} \sin\left(\frac{k}{m}t\right), \\ E \cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right) \cos(\phi) &= x_0 \cos\left(\frac{k}{m}t\right). \end{aligned}$$

Esto implica que

$$\begin{aligned} E \sin(\phi) &= -\frac{v_0}{\sqrt{\frac{k}{m}}}, \\ E \cos(\phi) &= x_0. \end{aligned}$$



Elevamos al cuadrado y sumamos los términos:

$$\begin{aligned} x_0^2 + \left( \frac{v_0}{\sqrt{\frac{k}{m}}} \right)^2 &= (E \cos(\phi))^2 + (E \sin(\phi))^2, \\ x_0^2 + \frac{v_0^2}{\frac{k}{m}} &= E^2, \\ E &= \sqrt{x_0^2 + \frac{v_0^2 m}{k}}. \end{aligned}$$

Para obtener el valor de  $\phi$  usamos la siguiente identidad trigonométrica

$$\begin{aligned} \frac{E \sin(\phi)}{E \cos(\phi)} &= \frac{\frac{-v_0}{\sqrt{\frac{k}{m}}}}{x_0}, \\ \tan(\phi) &= \frac{-v_0}{x_0 \sqrt{\frac{k}{m}}}. \end{aligned}$$

De ahí obtenemos los valores para los cuales se cumple la identidad

$$x(t) = \sqrt{x_0^2 + \frac{v_0^2 m}{k}} \cos \left( \sqrt{\frac{k}{m}} t + \phi \right) \quad (1.7)$$

La gráfica de la función (1.7) para diferentes valores de  $x_0, k, m, \phi$  y  $v_0$  puede ver en la figura (1.1).

Sus principales características son las siguientes:

1. Está confinada entre  $x = \pm A$ . Esta cantidad se conoce con la amplitud de el movimiento.
2. El movimiento tiene un periodo  $T$  igual a el tiempo transcurrido entre dos puntos equivalentes de la onda.
3.  $\phi$  es la fase de la onda.
4.  $\omega$  es la frecuencia de la onda.

Éstas partes se muestran en la figura (1.2).

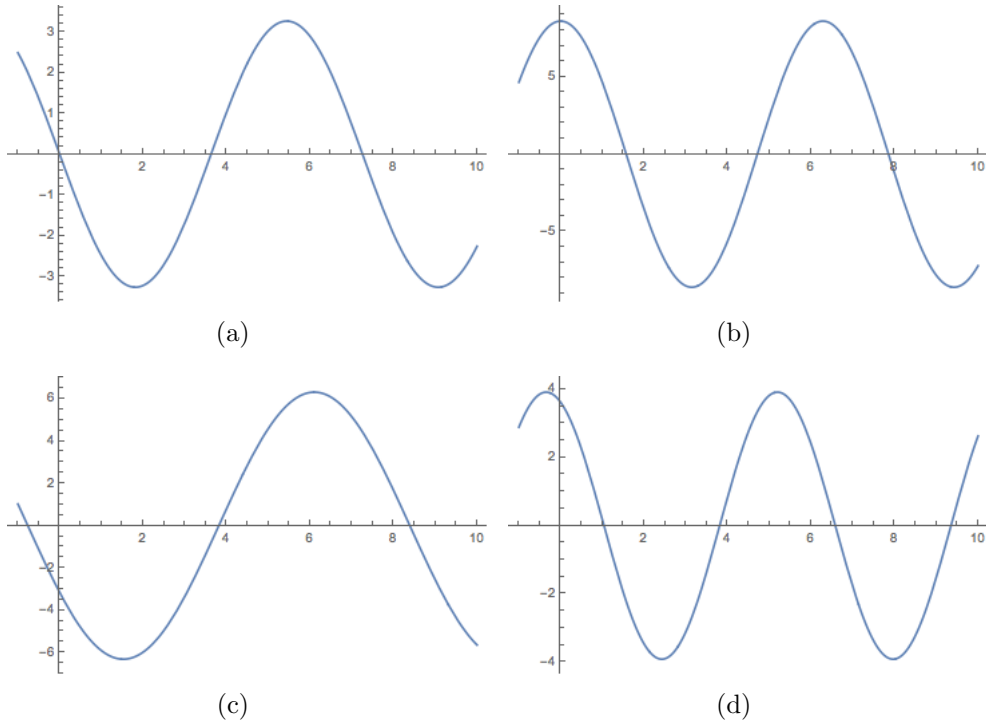


Figura 1.1: En la figura (a) se muestra la gráfica de la función para  $\phi = \frac{\pi}{2}$ ,  $v_0 = 5$ ,  $m = 4$ ,  $k = 3$  y  $x_0 = 2$ . En la figura (b) se muestra la gráfica de la función para  $\phi = 0$ ,  $v_0 = 10$ ,  $m = 41$ ,  $k = 1$  y  $x_0 = 8$ . En la figura (c) se muestra la gráfica de la función para  $\phi = \frac{2\pi}{3}$ ,  $v_0 = 7$ ,  $m = 3$ ,  $k = \sqrt{2}$  y  $x_0 = 5$ . En la figura (d) se muestra la gráfica de la función para  $\phi = \frac{\pi}{8}$ ,  $v_0 = 3$ ,  $m = 1$ ,  $k = \frac{9}{7}$  y  $x_0 = \sqrt{13}$ .

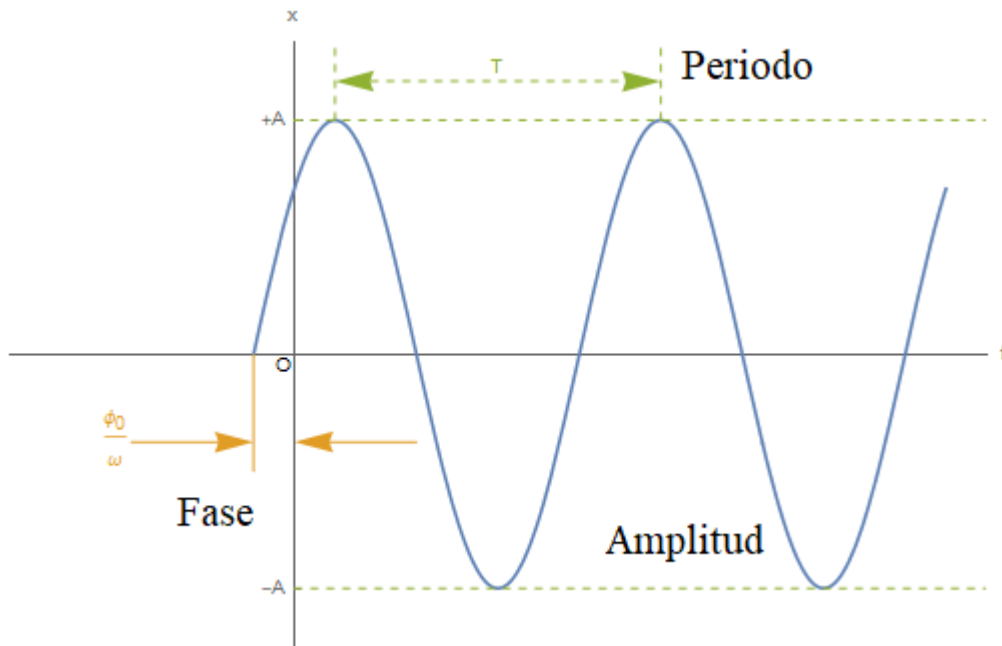


Figura 1.2: En la gráfica se muestran las partes de la onda.

## 1.2 Superposición de dos vibraciones de la misma frecuencia

Si tenemos dos vibraciones con la misma frecuencia

$$\begin{aligned}x_1(t) &= A_1 \cos(\omega t + \phi_1), \\x_2(t) &= A_2 \cos(\omega t + \phi_2).\end{aligned}$$

Los sumamos y obtenemos

$$x(t) = A_1 \cos(\omega t + \phi_1) + A_2 \cos(\omega t + \phi_2).$$

Podemos suponer que la suma se puede expresar como una sola vibración. Entonces tenemos

$$x(t) = A_1 \cos(\omega t + \phi_1) + A_2 \cos(\omega t + \phi_2) = A \cos(\omega t + \phi).$$

Hay que encontrar los valores de  $A$ ,  $\omega$  y  $\phi$  para los que se cumple la ecuación. Usaremos la identidad trigonométrica

$$\cos(a + b) = \cos(a) \cos(b) - \sin(a) \sin(b). \quad (1.8)$$

Y obtenemos lo siguiente

$$\begin{aligned} A_1 \cos(\omega t) \cos(\phi_1) - A_1 \sin(\omega t) \sin(\phi_1) + A_2 \cos(\omega t) \cos(\phi_2) \\ - A_2 \sin(\omega t) \sin(\phi_2) &= A \cos(\omega t) \cos(\phi) - A \sin(\omega t) \sin(\phi). \end{aligned}$$

Factorizamos  $\cos(\omega t)$  y  $\sin(\omega t)$  y obtenemos:

$$\begin{aligned} \cos(\omega t) (A_1 \cos(\phi_1) + A_2 \cos(\phi_2)) + \sin(\omega t) (A_1 \sin(\phi_1) + A_2 \sin(\phi_2)) \\ = A \cos(\omega t) \cos(\phi) - A \sin(\omega t) \sin(\phi). \end{aligned}$$

Agrupamos los términos que tienen  $\cos(\omega t)$  y los que tienen  $\sin(\omega t)$ . Los términos  $\cos(\omega t)$  y  $\sin(\omega t)$  se eliminan. Obtenemos:

$$\begin{aligned} A_1 \cos(\phi_1) + A_2 \cos(\phi_2) &= A \cos(\phi), \\ A_1 \sin(\phi_1) + A_2 \sin(\phi_2) &= A \sin(\phi). \end{aligned}$$

Elevamos ambos lados de las ecuaciones al cuadrado:

$$\begin{aligned} (A_1 \cos(\phi_1) + A_2 \cos(\phi_2))^2 &= (A \cos(\phi))^2, \\ (A_1 \sin(\phi_1) + A_2 \sin(\phi_2))^2 &= (A \sin(\phi))^2. \end{aligned}$$

Obtenemos lo siguiente:

$$\begin{aligned} A_1^2 \cos^2(\phi_1) + 2A_1 \cos(\phi_1)A_2 \cos(\phi_2) + A_2^2 \cos^2(\phi_2) &= A^2 \cos^2(\phi), \\ A_1^2 \sin^2(\phi_1) + 2A_1 \sin(\phi_1)A_2 \sin(\phi_2) + A_2^2 \sin^2(\phi_2) &= A^2 \sin^2(\phi). \end{aligned}$$

Sumamos ambos términos y obtenemos

$$\begin{aligned} A_1^2 \cos^2(\phi_1) + 2A_1 \cos(\phi_1)A_2 \cos(\phi_2) + A_2^2 \cos^2(\phi_2) + A_1^2 \sin^2(\phi_1) \\ + 2A_1 \sin(\phi_1)A_2 \sin(\phi_2) + A_2^2 \sin^2(\phi_2) = A^2 \cos^2(\phi) + A^2 \sin^2(\phi). \end{aligned}$$

Factorizamos términos y obtenemos lo siguiente

$$\begin{aligned} A_1^2(\cos^2(\phi_1) + \sin^2(\phi_1)) + A_2^2(\cos^2(\phi_2) + \sin^2(\phi_2)) + 2A_1A_2(\cos(\phi_1)\cos(\phi_2) \\ \sin(\phi_1)\sin(\phi_2)) = A^2(\sin^2(\phi) + \cos^2(\phi)). \end{aligned}$$

Simplificamos y obtenemos lo siguiente

$$A_1^2 + A_2^2 + 2A_1A_2 \cos(\phi_1 - \phi_2) = A^2.$$

Ahora, para

$$\phi_1 = \phi_2$$

tenemos lo siguiente:

$$A_1^2 + A_2^2 + 2A_1A_2 \cos(0) = A^2, \quad (1.9)$$

$$A_1^2 + A_2^2 + 2A_1A_2 = A^2, \quad (1.10)$$

$$(A_1 + A_2)^2 = A^2, \quad (1.11)$$

$$A_1 + A_2 = A. \quad (1.12)$$

De las ecuaciones (1.9) - (1.12) podemos concluir que cuando las vibraciones tienen la misma fase amplitud de la vibración resultante es la suma de la amplitud de las vibraciones originales. Ahora, cuando

$$\phi_1 - \phi_2 = \pi$$

tenemos

$$A_1^2 + A_2^2 + 2A_1A_2 \cos(\pi) = A^2, \quad (1.13)$$

$$A_1^2 + A_2^2 - 2A_1A_2 = A^2, \quad (1.14)$$

$$(A_1 - A_2)^2 = A^2, \quad (1.15)$$

$$|A_1 - A_2| = A. \quad (1.16)$$

Para el ángulo de la fase de la vibración resultante tenemos lo siguiente:

$$\tan(\phi) = \frac{A \sin(\phi)}{A \cos(\phi)} = \frac{A_1 \sin(\phi_1) + A_2 \sin(\phi_2)}{A_1 \cos(\phi_1) + A_2 \cos(\phi_2)}$$

En la figura animación se puede apreciar el comportamiento descrito. De las ecuaciones (1.13)-(1.16) concluimos que, cuando la diferencia de las fases es  $\pi$  entonces la amplitud de la vibración resultante es igual a la resta de las amplitudes originales. En particular, si además las amplitudes son iguales la amplitud resultante es igual a cero.

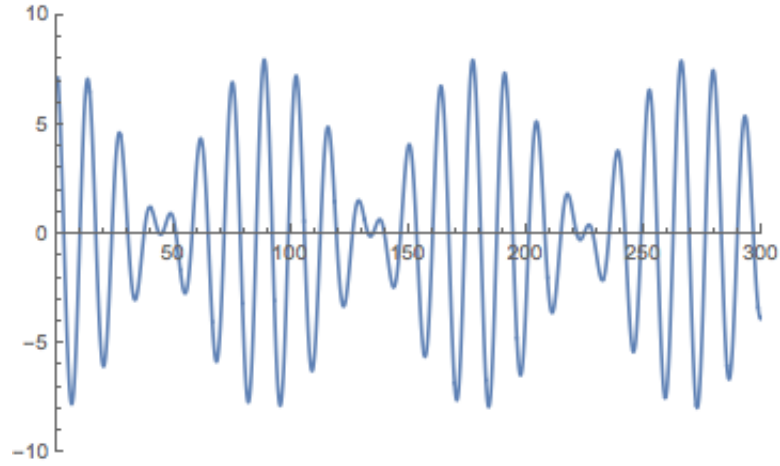


Figura 1.3: Superposición de dos oscilaciones con diferente frecuencia.

### 1.3 Superposición de dos vibraciones de diferente frecuencia

Dadas dos vibraciones con diferente frecuencia, la misma fase y amplitud

$$\begin{aligned}x_1(t) &= A \cos(\omega_1 t), \\x_2(t) &= A \cos(\omega_2 t),\end{aligned}$$

Al sumar estas funciones encontramos

$$x(t) = A (\cos(\omega_1 t) + \cos(\omega_2 t)). \quad (1.17)$$

Tomando en cuenta la identidad

$$\cos(a) \cos(b) = \frac{1}{2} (\cos(a + b) + \cos(a - b)), \quad (1.18)$$

entonces (1.17) se transforma en

$$x(t) = 2A \cos\left(\frac{\omega_1 + \omega_2}{2}t\right) \cos\left(\frac{\omega_1 - \omega_2}{2}t\right)$$

En la gráfica (1.3) se aprecia el comportamiento de la Superposición de dos vibraciones con diferente frecuencia.

### 1.4 El oscilador con dos masas

Veamos ahora que sucede cuando hay dos masas sujetas entre tres resortes como se muestra en la figura (1.4). Sean  $x_1$  y  $x_2$  los desplazamientos de las



Figura 1.4: Dos masas sujetas por tres resortes.

masas desde sus respectivas posiciones de equilibrio (cuando los resortes no están estirados),  $k$  la constante de los resortes de los extremos y  $\kappa$  la constante del resorte de enmedio. El resorte de enmedio está estirado (o comprimido) por  $x_2 - x_1$ . Entonces, las ecuaciones  $F = ma$  para las dos masas son:

$$m\ddot{x}_1 = -kx_1 - \kappa(x_1 - x_2), \quad (1.19)$$

$$m\ddot{x}_2 = -kx_2 - \kappa(x_2 - x_1). \quad (1.20)$$

Suponemos las soluciones de la forma

$$x_1(t) = A_1 e^{i\omega t}, \quad (1.21)$$

$$x_2(t) = A_2 e^{i\omega t}. \quad (1.22)$$

Es conveniente escribirlas de la siguiente forma

$$\begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} e^{i\omega t}$$

Sustituimos las soluciones en las ecuaciones (1.19-1.20), cancelamos el término  $e^{i\omega t}$  y obtenemos lo siguiente:

$$-m\omega^2 A_1 = -kA_1 - \kappa(A_1 - A_2), \quad (1.23)$$

$$-m\omega^2 A_2 = -kA_2 - \kappa(A_1 - A_2). \quad (1.24)$$

En forma matricial tenemos

$$\begin{pmatrix} -m\omega^2 + k + \kappa & -\kappa \\ -\kappa & -m\omega^2 + k + \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.25)$$

Una solución trivial viene de multiplicar el sistema por la inversa de la matriz que contiene los términos  $\omega$ ,  $\kappa$  y  $k$  lo cual conduce a

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$



Una solución no trivial donde hay movimiento es cuando la inversa de la matriz no existe. Tomamos

$$A^{-1} = \frac{(\text{adj}(A))^t}{\text{Det}(A)}. \quad (1.26)$$

Es decir, la matriz inversa no existe cuando el determinante de la matriz es igual a cero. Hacemos el determinante igual a cero

$$\begin{vmatrix} -m\omega^2 + k + \kappa & -\kappa \\ -\kappa & -m\omega^2 + k + \kappa \end{vmatrix} = 0,$$

nos da la siguiente ecuación.

$$(-m\omega^2 + k + \kappa)^2 - \kappa^2 = 0. \quad (1.27)$$

De ahí obtenemos

$$-m\omega^2 + k + \kappa = \pm\kappa. \quad (1.28)$$

Entonces tenemos las siguientes soluciones

$$\omega^2 = \frac{k}{m}, \quad (1.29)$$

$$\omega^2 = \frac{k + 2\kappa}{m}. \quad (1.30)$$

O sea

$$\omega = \pm\sqrt{\frac{k}{m}}, \quad (1.31)$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k + 2\kappa}{m}} \quad (1.32)$$

En el caso en que  $\omega^2 = \frac{k}{m}$  sustituimos en la ecuación 1.25 y obtenemos lo siguiente

$$\kappa \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Ambos renglones nos dan el mismo resultado, entonces  $A_1 = A_2$ , o lo que es lo mismo  $(A_1, A_2)$  es proporcional al vector  $(1, 1)$ .

Para el caso en que  $\omega^2 = \frac{k+2\kappa}{m}$  tenemos lo siguiente

$$\kappa \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

De ambos renglones obtenemos  $A_1 = -A_2$ . Entonces  $(A_1, A_2)$  es proporcional al vector  $(1, -1)$ . Tomando  $\omega_1 \equiv \sqrt{\frac{k}{m}}$  y  $\omega_2 \equiv \sqrt{\frac{k+2\kappa}{m}}$  escribimos la solución general como la suma de las cuatro soluciones encontradas. La solución está dada por:

$$\begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{pmatrix} = C_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i\omega_1 t} + C_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-i\omega_2 t} + C_3 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} e^{i\omega_1 t} + C_4 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} e^{-i\omega_2 t}.$$

Sólo la parte real tiene una interpretación física, entonces  $C_1 = C_2 \equiv \frac{A_1}{2} e^{i\omega_1}$  y  $C_3 = C_4 \equiv \frac{A_2}{2} e^{i\omega_2}$ . Entonces obtenemos:

$$\begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cos(\omega_1 t + \phi_1) + A_2 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \cos(\omega_2 t + \phi_2).$$

Es decir

$$\begin{aligned} x_1(t) &= A_1 \cos(\omega_1 t + \phi_1) + A_2 \cos(\omega_2 t + \phi_2), \\ x_2(t) &= A_1 \cos(\omega_1 t + \phi_1) - A_2 \cos(\omega_2 t + \phi_2). \end{aligned} \quad (1.33)$$

## 1.5 Modos Normales

Ahora, si  $A_2 = 0$  en la ecuación (1.33) tenemos que

$$x_1(t) = x_2(t) = A_1 \cos(\omega_1 t + \phi_1). \quad (1.34)$$

Entonces ambas masas se mueven exactamente de la misma manera. Ambas a la izquierda, ambas a la derecha, etc. Esto es consistente con el hecho de que  $\omega_1 = \sqrt{\frac{k}{m}}$ , independiente de  $\kappa$ . Este movimiento, en el que las dos masas se mueven con la misma frecuencia es llamado modo normal. Para especificar un modo normal hace falta especificar su frecuencia y también sus amplitudes relativas. En este caso, el modo tiene frecuencia  $\omega_1 = \frac{k}{m}$  y las amplitudes son iguales.

El otro caso, cuando  $A_1 = 0$  en la ecuación (1.33) nos da

$$x_1(t) = -x_2(t) = A_2 \cos(\omega_2 t + \phi_2). \quad (1.35)$$

En este caso las masas se mueven en dirección opuesta. La frecuencia ahora es  $\omega_1 = \sqrt{\frac{k+2\kappa}{m}}$ . En este caso la frecuencia  $\omega_1$  es menor que  $\omega_2$  ya que en este caso el resorte de enmedio está estirado o comprimido participa en la fuerza restauradora.

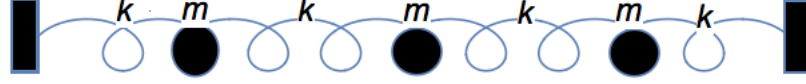


Figura 1.5: Tres masas sujetas con resortes.

## 1.6 Oscilador con tres masas

En este caso  $x_1$ ,  $x_2$  y  $x_3$  son los desplazamientos de las tres masas y asumimos que la constante  $k$  es igual para todos los resortes. Entonces tenemos las ecuaciones:

$$m\ddot{x}_1 = -kx_1 - k(x_1 - x_2), \quad (1.36)$$

$$m\ddot{x}_2 = -k(x_2 - x_1) - k(x_2 - x_3), \quad (1.37)$$

$$m\ddot{x}_3 = -k(x_3 - x_2) - kx_3. \quad (1.38)$$

Estamos buscando una solución de la forma:

$$\begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ x_3(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix} e^{i\omega t}.$$

Sustituimos en las ecuaciones (1.36-1.38) y obtenemos lo siguiente:

$$\begin{pmatrix} -\omega^2 + 2\omega_0^2 & -\omega^2 & 0 \\ -\omega_0^2 & -\omega^2 + 2\omega_0^2 & -\omega_0^2 \\ 0 & -\omega_0^2 & -\omega^2 + 2\omega_0^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1.39)$$

donde  $\omega_0^2 = \frac{k}{m}$ . Como en el caso donde tenemos dos masas, una solución no trivial existe cuando el determinante de la matriz es cero. Haciendo el determinante igual a cero obtenemos:

$$(-\omega^2 + 2\omega_0^2)((-\omega^2 + 2\omega_0^2)^2 - \omega_0^4) + \omega_0^2(-\omega_0^2(-\omega^2 + 2\omega_0^2)) = 0, \quad (1.40)$$

$$\implies (-\omega^2 + 2\omega_0^2)(\omega^4 - 4\omega_0^2\omega^2 + 2\omega_0^4) = 0, \quad (1.41)$$

la cual es una ecuación cuadrática para  $\omega$ . Usando la fórmula cuadrática obtenemos:

$$\omega^2 = 2\omega_0^2 \quad y \quad \omega^2 = (2 \pm \sqrt{2})\omega_0^2.$$

Sustituyendo en la ecuación (1.39) obtenemos los tres modos normales:

$$\omega = \pm\sqrt{2}\omega_0 \implies \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad (1.42)$$

$$\omega = \pm\sqrt{2+\sqrt{2}}\omega_0 \implies \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix}, \quad (1.43)$$

$$\omega = \pm\sqrt{2-\sqrt{2}}\omega_0 \implies \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (1.44)$$

Tomando de nuevo la parte real obtenemos lo siguiente

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \cos(\sqrt{2}\omega_0 t + \phi_1) + A_2 \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix} \cos(\sqrt{2+\sqrt{2}}\omega_0 t + \phi_2) \\ + A_3 \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \cos(\sqrt{2-\sqrt{2}}\omega_0 t + \phi_3).$$

## 1.7 Oscilador con $N$ masas

Ahora consideremos el caso con  $n$  masas entre dos muros unidas con resortes. Las masas son todas iguales a  $m$  y las constantes de resorte son iguales a  $k$  y los desplazamientos de sus masas iguales a  $x_1, x_2, \dots, x_n$ . La fuerza en la  $n$ -ésima masa es:

$$F_n = -k(x_n - x_{n-1}) - k(x_n - x_{n+1}) = kx_{n-1} - 2kx_n + kx_{n+1}. \quad (1.45)$$

Entonces lo que obtenemos es una colección de ecuaciones parecidas a esta

$$m\ddot{x}_n = kx_{n-1} - 2kx_n + kx_{n+1}. \quad (1.46)$$

Juntamos todas en la ecuación matricial y obtenemos:

$$m \frac{d^2}{dt^2} \begin{pmatrix} \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \\ x_{n+1} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vdots & & & & \\ \cdots & k & -2k & k & \\ & & k & -2k & k \\ & & & k & -2k & k & \cdots \\ & & & & \vdots & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \\ x_{n+1} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (1.47)$$

Buscamos soluciones de la forma

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \\ x_{n+1} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vdots \\ A_{n-1} \\ A_n \\ A_{n+1} \\ \vdots \end{pmatrix} e^{i\omega t}, \quad (1.48)$$

solo que en lugar de usar el método del determinante como lo hicimos para los casos en que  $n = 2$  y  $n = 3$  masas analizaremos las ecuaciones individualmente. Consideremos la  $n$ -ésima ecuación. Tomamos  $x_n(t) = A_n e^{i\omega t}$ , derivamos y sustituimos en la ecuación (1.46) y obtenemos:

$$-\omega^2 A_n = \omega_0^2 (A_{n-1} - 2A_n + A_{n+1}), \quad (1.49)$$

$$\Rightarrow \frac{A_{n-1} + A_{n+1}}{A_n} = \frac{2\omega_0^2 - \omega^2}{\omega_0^2}. \quad (1.50)$$

Donde  $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$ . La ecuación se debe cumplir para todos los valores de  $n$  desde 1 hasta  $N$ , entonces tenemos  $N$  ecuaciones de esta forma. Para algún modo con una frecuencia  $\omega$  la cantidad  $\frac{2\omega_0^2 - \omega^2}{\omega_0^2}$  es una constante independiente de  $n$ . Entonces la relación  $\frac{A_{n-1} + A_{n+1}}{A_n}$  en el lado izquierdo de (1.50) también es una constante independiente de  $n$ . Entonces, para 3  $A$ 's adyacentes conocidas entonces el valor del cociente se puede determinar fácilmente. De igual forma, para 3  $A$ 's adyacentes y  $\omega$  conocidas entonces se puede determinar el valor de  $\frac{2\omega_0^2 - \omega^2}{\omega_0^2}$ . El problema es encontrar la forma que tienen que tomar las  $A$ 's para que el cociente  $\frac{A_{n-1} + A_{n+1}}{A_n}$  sea independiente de  $n$ .

**Proposición 1.7.1.** *Si  $\omega < 2\omega_0$  entonces cualquier conjunto de  $A_n$ 's que satisfacen el sistema de  $N$  ecuaciones (1.50) puede ser escrito como:*

$$A_n = B \cos(n\theta) + C \sin(n\theta). \quad (1.51)$$

Para ciertos valores de  $B$ ,  $C$  y  $\theta$ .

*Proof.* Comenzamos por definir

$$\cos(\theta) \equiv \frac{A_{n-1} + A_{n+1}}{2A_n}. \quad (1.52)$$

Si nos fijamos en algún modo normal con frecuencia  $\omega$ , entonces por la ecuación (1.50) una definición equivalente de  $\theta$  es

$$2 \cos(\theta) \equiv \frac{2\omega_0^2 - \omega^2}{\omega_0^2}. \quad (1.53)$$

Estas definiciones sólo están definidas si producen un valor de  $\cos(\theta)$  que satisfice  $|\cos(\theta)| \leq 1$ . Esta condición es equivalente a que  $\omega$  debe satisfacer  $-2\omega_0 < \omega < 2\omega_0$ . De la ecuación (1.50) podemos ver que si conocemos dos de las  $A$ 's podemos determinar un valor de  $\omega$ . Supongamos que conocemos  $A_0$  y  $A_1$ . El resto de las  $A$ 's puede ser determinado como sigue. Se define  $B$  como:

$$A_0 \equiv B \cos(1 \cdot \theta) + C \sin(0 \cdot \theta) \implies A_0 \equiv B. \quad (1.54)$$

Una vez que  $B$  ha sido definido se define  $C$  como

$$A_1 \equiv B \cos(1 \cdot \theta) + C \sin(1 \cdot \theta) \implies A_1 \equiv B \cos(\theta) + C \sin(\theta). \quad (1.55)$$

Para cualquier  $A_0$  y  $A_1$  estas ecuaciones determinan de manera única  $B$  y  $C$ ,  $\theta$  ya estaba definida por  $\omega$ . Por construcción, estas definiciones se cumplen para  $n = 0$  y  $n = 1$ . Se demostrará por inducción que se cumple para toda  $n$ . Tomemos la hipótesis inductiva (1.51) y hagamos los cálculos para  $A_{n+1}$ :

$$A_{n+1} = (2 \cos(\theta))A_n - A_{n-1}, \quad (1.56)$$

$$A_{n+1} = 2 \cos(\theta)(B \cos(n\theta) + C \sin(n\theta)) - (B \cos(n-1)\theta + C \sin(n-1)\theta), \quad (1.57)$$

$$A_{n+1} = B(2 \cos(n\theta) \cos(\theta) - (\cos(n\theta) \cos(\theta)) + \sin(n\theta) \sin(\theta)) + C(2 \sin(n\theta) \cos(\theta) - (\sin(n\theta) \cos(\theta)) - \cos(n\theta) \sin(\theta)), \quad (1.58)$$

$$= B(\cos(n\theta) \cos(\theta) - \sin(n\theta) \sin(\theta)) + C(\sin(n\theta) \cos(\theta) + \cos(n\theta) \sin(\theta)). \quad (1.59)$$

$$= B \cos((n+1)\theta) + C \sin((n+1)\theta). \quad (1.60)$$

Que es justo la expresión esperada para  $A_{n+1}$  por lo tanto se cumple para un número infinito de masas en ambas direcciones.  $\square$

Lo que esto nos dice es que hemos encontrado una solución de la forma

$$x_n(t) = A_n e^{i\omega t} = (B \cos(n\theta) + C \sin \theta) e^{i\omega t}. \quad (1.61)$$

Esto asumiendo que  $\omega$  es positiva. Sin embargo hay que recordar que  $x$

$$x_n(t) = A_n e^{-i\omega t} = (D \cos(n\theta) + E \sin \theta) e^{-i\omega t}, \quad (1.62)$$

también es solución. Como las ecuaciones del tipo (1.46) son lineales la suma de las soluciones también es solución. Entonces la solución más general es la suma de las soluciones (1.61) y (1.62).

De nuevo, las soluciones tienen que ser reales. Esto implica que (1.61) y (1.62) deben ser el conjugado la una de la otra. Y como esto debe cumplirse para

todos los valores de  $n$ ,  $B$  y  $D$  deben ser conjugados complejos al igual que  $C$  y  $E$ . Entonces definimos  $B = D^* \equiv \frac{F}{2}e^{i\beta}$  y  $C = E^* \equiv \frac{G}{2}e^{i\gamma}$ . La suma de las dos soluciones se convierte en

$$x_n(t) = F \cos(n\theta) \cos(\omega t + \beta) + G \sin(n\theta) \cos(\omega t + \gamma) \quad (1.63)$$

Usando la fórmula del coseno de una suma podemos reescribirla como:

$$x_n(t) = C_1 \cos(n\theta) \cos(\omega t) + C_2 \cos(n\theta) \sin(\omega t) + C_3 \sin(n\theta) \cos(\omega t) + C_4 \sin(n\theta) \sin(\omega t), \quad (1.64)$$

donde  $\theta$  está determinado por

$$\theta \equiv \cos^{-1} \left( \frac{2\omega_0^2 - \omega^2}{2\omega_0^2} \right) \quad (1.65)$$

## 1.8 $N \rightarrow \infty$ la ecuación de onda

lg Ahora consideremos el caso  $N \rightarrow \infty$  límite para el arreglo de masas y resortes. Lo que obtenemos es un sistema continuo. Ahora  $x$  representará las posiciones de las masas en reposo y  $\xi$  el desplazamiento de las masas, de esta forma  $\xi_n$  es el desplazamiento de la  $n$ -ésima masa. Las  $x$ 's son constantes, sólomente son para nombrar las posiciones de equilibrio, que son fijas. La posición de la  $n$ -ésima masa es  $x_n + \xi_n$  pero sólo la parte  $\xi_n$  aparece en la ecuación  $F = ma$  ya que sólo  $\xi_n$  contribuye a la aceleración. Escribiremos la función del desplazamiento como  $\xi(x_n)$  y por ahora no escribiremos la dependencia temporal.

Sea  $\Delta x \equiv x_n - x_{n-1}$  el espacio igual entre las posiciones de equilibrio de todas las masas. Entonces, la ecuación  $F = ma$  se convierte en:

$$m\ddot{\xi}_n = k\xi_{n-1} - 2k\xi_n + k\xi_{n+1} \quad (1.66)$$

$$\Rightarrow m\ddot{\xi}(x_n) = k\xi(x_n - \Delta x) - 2k\xi(x_n) + k\xi(x_n + \Delta x), \quad (1.67)$$

$$\Rightarrow m\ddot{\xi}(x_n) = k\xi(x - \Delta x) - 2k\xi(x) + k\xi(x + \Delta x). \quad (1.68)$$

El primer paso es regresarlo a una ecuación de la forma  $F = ma$ . Entonces tenemos:

$$m \frac{d^2 \xi(x)}{dt^2} = k [(\xi(x + \Delta x) - \xi(x)) - (\xi(x) - \xi(x - \Delta x))], \quad (1.69)$$

$$\Rightarrow \frac{m}{\Delta x} \frac{d^2 \xi(x)}{dt^2} = k \Delta x \left( \frac{\xi(x + \Delta x) - \xi(x)}{\Delta x} - \frac{\xi(x) - \xi(x - \Delta x)}{\Delta x} \right) \quad (1.70)$$

Entonces usamos las definiciones de 1er y 2a derivada para obtener:

$$\frac{m}{\Delta x} \frac{d^2 \xi(x)}{dt^2} = (k\Delta x) \frac{\xi'(x) - \xi'(x - \Delta x)}{\Delta x}, \quad (1.71)$$

$$= (k\Delta x) \xi''(x), \quad (1.72)$$

donde  $\frac{m}{\Delta x}$  es conocida como la densidad de masa  $\rho$  y  $(k\Delta x)$  es conocida como el módulo elástico  $E$ . Entonces la ecuación se reescribe como:

$$\rho \frac{d^2 \xi(x)}{dt^2} = E \xi''(x) \quad (1.73)$$

Como  $\xi$  es una función de  $x$  y  $t$  procedemos a escribir:

$$\rho \frac{\partial^2 \xi(x, t)}{\partial t^2} = E \frac{\partial^2 \xi(x, t)}{\partial x^2}. \quad (1.74)$$

Que es conocida como la ecuación de onda. Para resolver la ecuación de onda podemos retomar la estrategia del caso del oscilador con  $N$  masas. Suponemos que la solución es del tipo:

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ \xi_{n-1} \\ \xi_n \\ \xi_{n+1} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vdots \\ a_{n-1} \\ a_n \\ a_{n+1} \\ \vdots \end{pmatrix} e^{i\omega t}. \quad (1.75)$$

Si re etiquetamos  $\xi_n \rightarrow \xi(x_n, t) \rightarrow \xi(x, t)$  y  $a_n \rightarrow a(x_n) \rightarrow a(x)$  podemos reescribir nuestra suposición como:

$$\xi(x, t) = a(x) e^{i\omega t}. \quad (1.76)$$

Esto es, de hecho, un conjunto infinito de ecuaciones (una para cada  $x$ ). La ecuación  $a(x)$  da las amplitudes de las masas. Entonces, sustituyendo en la expresión (1.74) obtenemos lo siguiente:

$$\rho \frac{\partial^2}{\partial t^2} (a(x) e^{i\omega t}) = E \frac{\partial^2}{\partial x^2} (a(x) e^{i\omega t}), \quad (1.77)$$

$$\implies -\omega^2 \rho a(x) = E \frac{d^2}{dx^2} (a(x)), \quad (1.78)$$

$$\implies \frac{d^2}{dx^2} (a(x)) = -\frac{\omega^2 \rho}{E} (a(x)). \quad (1.79)$$



En la ecuación (1.79) lo que tenemos es la ecuación de un oscilador armónico

$$a(x) = Ae^{\pm ikx}$$

con

$$k \equiv \omega \sqrt{\frac{\rho}{E}}, \quad (1.80)$$

y se conoce a  $k$  como el número de onda. La interpretación física del número  $k$  es la siguiente. Si  $\lambda$  es la longitud de onda, entonces el exponente  $kx$  en la ecuación (1.80) incrementa  $2\pi$  cada que  $x$  incrementa  $\lambda$ . Entonces tenemos:

$$k\lambda = 2\pi \implies k = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (1.81)$$

Entonces  $k$  es igual al número de radianes de oscilaciones espaciales que caben en una unidad de longitud. Usando entonces (1.80) en la solución la ecuación (1.76) se convierte en:

$$\xi(x, t) = a(x)e^{i\omega t} = Ae^{(\pm kx + \omega t)}. \quad (1.82)$$

## 1.9 El principio de Hamilton

Para describir las interacciones entre partículas se emplean los conceptos de fuerza y energía potencial. En coordenadas cartesianas la energía potencial es igual al gradiente de la fuerza cambiado de signo, para una partícula se obtiene:

$$F_x = -\frac{\partial U}{\partial x}, F_y = -\frac{\partial U}{\partial y}, F_z = -\frac{\partial U}{\partial z}, \quad (1.83)$$

donde las  $F_k$  son las componentes de la fuerza y  $U$  es la energía potencial a veces llamada simplemente *potencial*.  $U$  es muy importante por que contiene toda la información del sistema. De modo que hayar  $U$  equivale a determinar el modelo físico del sistema. Cuando  $U$  no depende explícitamente del tiempo se conserva la energía total que vale la suma de la cinética y la potencial. En este caso se acostumbra llamar fuerzas conservativas a aquellas que se deducen de un potencial. El principio de Hamilton dice que existe una función potencial para todo sistema ideal y explica como, a partir de ella, se puede obtener su ecuación de movimiento. El principio de Hamilton dice: A todo sistema ideal con  $n$  grados de libertad con coordenadas  $q_1, q_2, \dots, q_n$  le corresponde

una función  $U(q, \dot{q}, t)$  llamada el potencial, que describe las interacciones, caracteriza y determina el movimiento de la forma siguiente:

Cuando el sistema va desde la configuración  $q_k^{(1)}$  en  $t = t_1$  hasta la  $q_k^{(2)}$  en  $t = t_2$ , lo hace de modo que la llamada integral de acción S,

$$S = \int_{t_1}^{t_2} (T(q, \dot{q}, t) - U(q, \dot{q}, t)) dt, \quad (1.84)$$

donde T es la energía cinética, toma un valor estacionario. Definiendo el Lagrangiano o función Lagrangiana como

$$L(q, \dot{q}, t) = T(q, \dot{q}, t) - U(q, \dot{q}, t), \quad (1.85)$$

Se puede escribir la integral de acción como

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt, \quad (1.86)$$

esto implica que se deben cumplir las ecuaciones de Euler-Lagrange.

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 \quad k = 1, 2, \dots, n, \quad (1.87)$$

y son entonces las ecuaciones del sistema.

Como  $L$  depende de  $q_k$  y  $\dot{q}_k$  entonces (1.87) es un conjunto de  $n$  ecuaciones de segundo orden en el que, si la matriz

$$L_{ij} = \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} \quad (1.88)$$

es regular y tiene inversa, por tanto es posible despejar las aceleraciones que son funciones de las coordenadas y las velocidades.

Generalizando se definen las fuerzas como  $F_k$  como las derivadas de potencial respecto a las coordenadas cambiadas de signo, es decir

$$F_k = \frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \dot{q}_k}, \quad (1.89)$$

lo que permite escribir las ecuaciones de Lagrange de una forma un poco distinta

$$F_k = \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial T}{\partial q_k} \quad (1.90)$$

## 1.10 La energía del sistema Lagrangiano

Consideremos ahora un sistema con Lagrangiano

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i,j} M_{ij}(q) \dot{q}_i \dot{q}_j - U(q), \quad (1.91)$$

que tiene un punto de equilibrio en  $q_i = q_{0i}$ . Esto significa que  $U(q)$  toma un valor estacionario en  $q_{0i}$  y que sus derivadas parciales se anulan allí

$$\frac{\partial U(q_0)}{\partial q_i} = 0$$

por lo que

$$U = U(q_0) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 U(q_0)}{\partial q_i \partial q_j} (q_i - q_{0i})(q_j - q_{0j}) + O[(q_i - q_{0i})^3] \quad (1.92)$$

Si el sistema se aleja un poco de la posición de equilibrio, las cantidades  $\dot{q}_k(t) = q_k(t) - q_{0k}$ , tendrán valores pequeños. En ese caso, la primera aproximación se obtiene despreciando los valores cuadráticos, cúbicos, etc en  $q_i$  y  $\dot{q}_k$  y conservando sólo los lineales.

Como la deducción de las ecuaciones desde el Lagrangiano incluye los valores  $\frac{\partial L}{\partial q_k}, \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}$  eso equivale a tomar sólo los términos de segundo grado en  $L$ . Entonces, para estudiar las oscilaciones pequeñas en torno a  $q_i = 0$  hay que considerar la parte cuadrática del Lagrangiano.

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i,j} M_{i,j} \dot{q}_i \dot{q}_j - \frac{1}{2} \sum_{i,j} K_{i,j} q_i q_j \quad (1.93)$$

donde

$$M_{i,j} = M_{i,j}(0) \quad y \quad K_{i,j} = \frac{\partial^2 U(0)}{\partial q_i \partial q_j}$$

La ecuación de movimiento que se deduce de (1.93) es

$$L = \sum_j M_{i,j} \ddot{q}_j + K_{i,j} q_j, \quad (1.94)$$

que se puede escribir en notación vectorial como

$$\mathbf{M} \ddot{\mathbf{q}} + \mathbf{K} \mathbf{q} = 0. \quad (1.95)$$

En este caso existen  $n$  modos normales de oscilación, uno por cada grado de libertad, y se obtienen resolviendo un problema de valores propios. Sea el modo  $k$ -ésimo

$$q = A_k \cos(\omega_k t + \delta_k) \quad (1.96)$$

Sustituyendo en (1.93) se obtiene

$$\omega_k^2 M A_k = K A_k, \quad (1.97)$$

lo que produce un problema de valores propios. Como (1.97) es un sistema homogéneo de ecuaciones sólo tiene solución si el determinante se anula, es decir si

$$\det((K) - \omega_k^2(M)) = 0 \quad (1.98)$$

o bien

$$\begin{vmatrix} K_{11} - \omega_k^2 M_{11} & K_{12} - \omega_k^2 M_{12} & \cdots \\ K_{21} - \omega_k^2 M_{21} & K_{22} - \omega_k^2 M_{22} & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \cdots & \cdots & K_{nn} - \omega_k^2 M_{nn} \end{vmatrix} = 0 \quad (1.99)$$

que es una ecuación de orden  $n$  en la cantidad  $\omega^2$ , por lo que tiene  $n$  soluciones  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ . Multiplicando (1.97) por  $M^{-1}$  obtenemos

$$M^{-1} K A_k = \omega_k^2 A_k, \quad (1.100)$$

que tiene la forma clásica de un problema de valores propios. Pero  $M^{-1}K$  no es, en general, simétrica por lo que no tiene  $n$  vectores propios ortogonales. Una matriz definida positiva como  $M$  tiene raíz cuadrada. Sean  $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$  los valores propios de  $M$  (todos ellos positivos). En ese caso, si  $\mathbf{R}$  es la matriz ortogonal que pasa desde la base propia de  $\mathbf{M}$  a la de  $q_i$  se tiene:

$$\mathbf{M} = \mathbf{R} \text{diag}(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n) \mathbf{R}^t, \quad (1.101)$$

donde  $\text{diag}(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n)$  es la diagonalización de  $\mathbf{M}$ . Definimos la raíz cuadrada de  $\mathbf{M}$  como la matriz

$$\mathbf{M}^{+1/2} = \mathbf{R} \text{diag}(\sqrt{\mu_1}, \sqrt{\mu_2}, \dots, \sqrt{\mu_n}) \mathbf{R}^t, \quad (1.102)$$

Análogamente definimos  $\mathbf{M}^{-1/2}$  como la inversa de  $\mathbf{M}$  definida en (1.102). Conviene usar  $\mathbf{M}^{+1/2}$  como matriz de cambio de coordenadas. La ecuación (1.97) se transforma en

$$(\mathbf{M}^{-1/2} \mathbf{K} \mathbf{M}^{-1/2}) (\mathbf{M}^{1/2} \mathbf{A}_k) = \omega_k^2 (\mathbf{M}^{1/2} \mathbf{A}_k) \quad (1.103)$$

que nos dice que los  $\mathbf{M}^{1/2}\mathbf{A}_k$  son vectores propios de la matriz  $(\mathbf{M}^{-1/2}\mathbf{K}\mathbf{M}^{-1/2})$ , por lo que podemos decir que hay  $n$  valores propios positivos  $\omega^2$  y  $n$  vectores propios ortogonales  $\mathbf{B}_k = \mathbf{M}^{+1/2}\mathbf{A}_k$ .

Una vez resuelto este problema podemos escribir la solución general como

$$q(t) = \sum_k c_k \cos(\omega_k t + \delta_k) A_k, \quad (1.104)$$

o bien, en componentes, como

$$q_i(t) = \sum_k c_k \cos(\omega_k t + \delta_k) A_{ki}. \quad (1.105)$$

Si usamos la matriz  $A_{ij}$  para definir nuevas variables  $Q_i$  resulta

$$q_i(t) = \sum_k \mathbf{A}_{ks} Q_k(t), \quad (1.106)$$

$$Q_k(t) = c_k \cos(\omega_k t + \delta_k), \quad (1.107)$$

es decir, que las  $Q_k$  son coordenadas normales. Las ecuaciones del movimiento en las variables  $Q_k$  son

$$\ddot{Q}_k + \omega_k^2 Q_k = 0 \quad k = 1, \dots, n, \quad (1.108)$$

por lo que cada una de ellas es la coordenada de un oscilador armónico.

Sea  $\mathbf{A}$  la matrix con elementos  $\mathbf{A}_{kj}$ , es decir, cuyas filas son los vectores  $\mathbf{A}_k$ . Se tiene

$$q = \mathbf{A}^t \mathbf{Q}, \quad \mathbf{Q} = \mathbf{S} q, \mathbf{S} = (\mathbf{A}^t)^{-1} \quad (1.109)$$

La ecuación (1.97) tiene un elemento r

$$\sum_s (\mathbf{M}^{-1}\mathbf{K})_{rs} A_{ks} = \omega_k^2 A_{kr}, \quad (1.110)$$

Multiplicando por  $S_{jr}$  y sumando en  $r$  se obtiene

$$\sum_{r,s} S_{jr} (\mathbf{M}^{-1}\mathbf{K})_{rs} A_{sk} = \omega_k^2 S_{jr} A_{kr} = \omega_k^2 \delta_{jk}, \quad (1.111)$$

que en forma matricial se convierte en

$$\mathbf{S} (\mathbf{M}^{-1}\mathbf{K}) \mathbf{S}^{-1} = \omega^2 \quad (1.112)$$

donde  $\omega^2 = \text{diag}(\omega_1^2, \dots, \omega_n^2)$ .

La energía del sistema Lagrangiano vale

$$E = \frac{1}{2} \sum_{r,s} (\mathbf{M}_{rs} \dot{q}_r \dot{q}_s + \mathbf{K}_{rs} q_r q_s) = \frac{1}{2} (\dot{q}^t \mathbf{M} \dot{q} + q^t \mathbf{K} q) \quad (1.113)$$

Sustituyendo (1.109) se obtiene

$$E = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{Q}}^t [\mathbf{S}^{-1t} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1}] \dot{\mathbf{Q}} + \frac{1}{2} \mathbf{Q}^t [\mathbf{S}^{-1t} \mathbf{K} \mathbf{S}^{-1}] \mathbf{Q}, \quad (1.114)$$

insertando  $\mathbf{M} \mathbf{S}^{-1} \mathbf{M}^{-1}$  en el segundo término se tiene

$$\mathbf{S}^{-1} \mathbf{K} \mathbf{S}^{-1} = \mathbf{S}^{-1t} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1} (\mathbf{S} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{K} \mathbf{S}^{-1}) = \mathbf{S}^{-1t} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1} \omega^2, \quad (1.115)$$

por (1.112) y tomando en cuenta que  $\mathbf{S}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{S}^{-1} = \mathbb{I}$  toma la forma

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2} [\dot{\mathbf{Q}}^t \dot{\mathbf{Q}} + \dot{\mathbf{Q}}^t \omega^2 \mathbf{Q}] \\ &= \sum_k E_k = \frac{1}{2} \sum_k (\dot{Q}_k^2 + \omega_k^2 Q_k^2) \\ E_k &= \frac{1}{2} \omega_k^2 c_k^2 \end{aligned} \quad (1.116)$$

A esta descomposición de la energía  $E = T + U$  en modos normales corresponde la del lagrangiano  $L = T - U$

$$L = \sum_k L_k = \frac{1}{2} \sum_k (\dot{Q}_k^2 - \omega_k^2 Q_k^2). \quad (1.117)$$

El sistema es completamente equivalente a una colección de  $n$  osciladores armónicos independientes cuyas frecuencias son las normales  $\omega_k$  y cuyas coordenadas son las normales  $Q_k$ .

# Capítulo 2

## El modelo de Ising

### 2.1 El modelo de Ising unidimensional

El modelo de Ising es uno de los pocos modelos de partículas interactuantes para el cuál se conoce una solución exacta. Es de gran utilidad ya que, aunque originalmente fue formulado para resolver problemas físicos (ferromagnetismo) tiene muchísima aplicaciones en el modelado de problemas de otras áreas como la biología, finanzas, etc.

En una dimensión, el Hamiltoniano del modelo de Ising puede ser escrito como

$$\mathbb{H} = -\epsilon \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - \mu B \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (2.1)$$

donde  $\sigma = \pm 1$  y estos valores indican cada uno de los estados posibles: Si la partícula apunta hacia arriba o hacia abajo. Se usa también la siguiente representación matricial:

$$|\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.2)$$

$$|\downarrow\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (2.3)$$

y se considera que la red es cíclica, es decir:

$$\sigma_N = \sigma_{N+1},$$

lo cual equivale a resolver el problema en un anillo. En este caso tenemos la siguiente relación:

$$\sum_{i=1}^N \sigma_i = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (\sigma_i + \sigma_{i+1}). \quad (2.4)$$

Tomando (2.4) la función de partición puede ser escrita como

$$Z_N(T, B) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{\beta \sum_{i=1}^N [\epsilon \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} \mu \beta (\sigma_i \sigma_{i+1})]}. \quad (2.5)$$

Entonces introducimos la siguiente matriz:

$$\bar{P} = \begin{pmatrix} e^{\beta(\epsilon+\mu\beta)} & e^{-\beta\epsilon} \\ e^{-\beta\epsilon} & e^{\beta(\epsilon-\mu\beta)} \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

notando que

$$\langle \sigma_i | \bar{P} | \sigma_{i+1} \rangle = e^{\beta [\epsilon \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} \mu B (\sigma_i + \sigma_{i+1})]}. \quad (2.7)$$

Esto se comprueba fácilmente usando la forma matricial que se muestra en (2.2) , (2.3), la matriz que contiene cada uno de los dos estados posible para cada espín y haciendo el producto de matrices:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i | \bar{P} | \sigma_{i+1} \rangle &= \begin{pmatrix} \sigma_i^+ \\ \sigma_i^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{\beta(\epsilon+\mu\beta)} & e^{-\beta\epsilon} \\ e^{-\beta\epsilon} & e^{\beta(\epsilon-\mu\beta)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{i+1}^+ \\ \sigma_{i+1}^- \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sigma_i^+ \\ \sigma_i^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{\beta(\epsilon+\mu\beta)} \sigma_{i+1}^+ + e^{-\beta\epsilon} \sigma_{i+1}^- \\ e^{-\beta\epsilon} \sigma_{i+1}^+ + e^{\beta(\epsilon-\mu\beta)} \sigma_{i+1}^- \end{pmatrix} \\ &= e^{\beta(\epsilon+\mu\beta)} \sigma_{i+1}^+ \sigma_i^+ + e^{-\beta\epsilon} \sigma_{i+1}^- \sigma_i^+ + e^{-\beta\epsilon} \sigma_{i+1}^+ \sigma_i^- + e^{\beta(\epsilon-\mu\beta)} \sigma_{i+1}^- \sigma_i^-. \end{aligned}$$

Sabemos que  $\sigma$  toma los valores  $\pm 1$ , entonces identificamos los siguientes casos:

1.  $\sigma_i^+ \sigma_i^+$  da un signo positivo.
2.  $\sigma_i^- \sigma_i^-$  da un signo positivo.
3.  $\sigma_i^+ \sigma_i^-$  da un signo negativo.

De esta manera obtenemos el resultado esperado:

$$\langle \sigma_i | \bar{P} | \sigma_{i+1} \rangle = e^{\beta [\epsilon \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} \mu B (\sigma_i + \sigma_{i+1})]}. \quad (2.8)$$

Usando (2.6), reescribimos la función de partición:

$$Z_N(T, B) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \langle \sigma_1 | \bar{P} | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | \bar{P} | \sigma_3 \rangle \cdots \langle \sigma_N | \bar{P} | \sigma_1 \rangle. \quad (2.9)$$

Nótese que:

$$\sum_{\sigma=\pm 1} |\sigma\rangle \langle \sigma| = \mathbb{I} \quad (2.10)$$



de manera que

$$Z_N(T, B) = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \langle \sigma_1 | \bar{P}^N | \sigma_1 \rangle = \text{Tr}(\bar{P}^N). \quad (2.11)$$

La matriz  $\bar{P}$  es simétrica por construcción, por lo tanto sus valores propios son reales. Si  $\lambda_{\pm}$  son sus valores propios, entonces:

$$Z_N(T, B) = \lambda_+^N + \lambda_-^N. \quad (2.12)$$

Obtenemos los valores propios de:

$$\begin{vmatrix} e^{\beta(\epsilon + \mu\beta)} & e^{-\beta\epsilon} \\ e^{-\beta\epsilon} & e^{\beta(\epsilon - \mu\beta)} \end{vmatrix} = \lambda^2 - 2\lambda e^{\beta\epsilon} \cosh(\beta\mu B) + 2 \sinh(2\beta\epsilon) = 0, \quad (2.13)$$

de donde obtenemos los valores propios

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta\epsilon} \left[ \cosh(\beta\mu B) \pm \sqrt{\cosh^2(\beta\mu B) - 2e^{-2\beta\epsilon} \sinh(2\beta\epsilon)} \right], \quad (2.14)$$

y tomamos  $\lambda_+ > \lambda_-$ . Para obtener la energía libre es conveniente reescribir la función de partición como:

$$Z_N(T, B) = \lambda_+^N \left[ 1 + \left( \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right]. \quad (2.15)$$

Como  $\lambda_- < \lambda_+$ , para calcular la energía libre, obtenemos el siguiente límite:

$$g(T, B) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ -\frac{1}{\beta N} \log Z_N \right] = -\frac{1}{\beta} \log \lambda_+, \quad (2.16)$$

esto es:

$$g(T, B) = -\frac{1}{\beta} \log e^{\beta\epsilon} \cosh(\beta B) + [e^{2\beta\epsilon} \cosh^2(\beta B) - 2 \sinh(2\beta B)]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.17)$$

La magnetización por espín está dada por

$$m(T, B) = -\frac{\partial g}{\partial B} = \frac{\sinh(\beta B)}{[\sin^2(\beta B) + e^{-4\beta\epsilon}]^{\frac{1}{2}}}. \quad (2.18)$$

### 2.1.1 Un ejemplo de aplicación: Teoría de juegos.

La teoría de juegos estudia modelos matemáticos de conflicto y cooperación entre tomadores de decisiones racionales. Los problemas en teoría de juegos son descritos generalmente con  $N$  jugadores que tienen un conjunto  $s_x = 1, 2, 4, \dots, N$  estrategias disponibles. Cada jugador adoptará una estrategia que maximizará su ganancia  $u_x$  en el siguiente paso. En casos especiales existe un estado estacionario en el que a ningún jugador le favorece cambiar de estrategia. Matemáticamente este estado satisface la siguiente condición.

$$u_x\{s_1^*, s_2^*, \dots, s_N^*\} \leq u_x\{s_1^*, s_2^*, \dots, s'_x, \dots, s_N^*\} \quad \forall x, \forall s'_x \neq s_x^* . \quad (2.19)$$

Esto se conoce como el equilibrio de Nash y cuando la desigualdad es estricta se le llama equilibrio puro de Nash.

También se puede modelar de forma que, en lugar de buscar maximizar la ganancia, los individuos escojan una estrategia que tienen una cierta probabilidad y es a su vez una función de la ganancia:

$$p(s_x \rightarrow s'_x) = f(u_x\{s_1, s_2, \dots, s'_x, \dots, s_N\}) - u_x\{s_1, s_2, \dots, s_x, \dots, s_N\}. \quad (2.20)$$

Este ruido alrededor de la estrategia óptima es el equivalente a la temperatura en un sistema termodinámico y la probabilidad de transición está dada por:

$$p(s_x \rightarrow s'_x) = \frac{1}{1 + e^{\beta \Delta u_x}} \quad (2.21)$$

$$\Delta u_x = u_x\{s_1, s_2, \dots, s_x, \dots, s_N\} - u_x\{s_1, s_2, \dots, s_x, \dots, s_N\}. \quad (2.22)$$

En este caso  $\frac{1}{\beta}$  denota el "ruido" en el sistema. En el caso donde la toma de decisiones es probabilística no existe el equilibrio puro pero en sistemas con un número largo de individuos con funciones de ganancia idénticas el sistema alcanza valores estables en sus parámetros promediados entre la población entera.

### 2.1.2 El caso de N jugadores y 2 estrategias

Un problema básico en teoría de juegos es aquel en el que se tienen dos jugadores y dos estrategias: Cooperación (C) y deserción (D). La ganancia en esta situación puede ser representada usando esta matriz:

$$\begin{matrix} & \begin{bmatrix} C & D \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} R & S \\ T & P \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (2.23)$$

donde la fila  $(C, D)$  denota las opciones de estrategia del jugador que estamos intentando determinar y la columna  $(C, D)$  las de el otro jugador.  $R$  es la recompensa obtenida cuando ambos cooperan,  $S$  es el costo que se paga por un jugador cuando éste coopera y el otro no,  $T$  es la ganancia por desertar cuando el otro jugador si coopera y  $P$  es el castigo que se paga cuando ambos jugadores desertan. Un ejemplo de un sistema es el que se conoce como el dilema del prisionero. La encunciación es la siguiente:

La policía arresta a dos personas. No hay pruebas suficientes para condenarlas y tras haberlas separado las visita individualmente y les ofrece un trato: Si una confiesa y su cómplice no, la cómplice será condenada a diez años en prisión. Si la primera calla y la cómplice confiesa, la primera recibirá la condena. Si ambas personas confiesan, serán condenadas a seis años. Si ninguna confiesa, a lo más podrán ser condenadas a un año en prisión. En este caso el equilibrio de Nash se obtiene cuando ambas personas confiesan y la ganancia combinada se maximiza cuando ambas personas cooperan. En un sistema probabilístico con  $N$  participantes el interés principal es saber cuántos participantes desertan comparado con el número de participantes. Esto está dado por:

$$m = \frac{P_C - P_D}{N}, \quad (2.24)$$

donde  $P_C$  y  $P_D$  es el número de agentes que cooperan y desertan, respectivamente. La transición de fase se da cuando el signo de  $m$  cambia.

### 2.1.3 Analogías con los sistemas termodinámicos

En este sistema, al convertir a los agentes en partículas, cada uno de las estrategias se convierte en un estado del espín:  $\sigma = +1$  para la cooperación y  $\sigma = -1$  para la deserción.

La ecuación 2.24 se convierte en la ecuación de la magnetización promedio del sistema.

El objetivo principal es, entonces, encontrar el Hamiltoniano del sistema. Se pueden comprobar los cálculos termodinámicos al tomar el límite de la temperatura crítica ( $\beta \rightarrow \infty$ ) que debe corresponder con el equilibrio de Nash. Para lograr esto, Sarkar y Benjamin ([13]) desarrollaron el siguiente método.

La premisa es que el equilibrio de Nash se mantiene intacto si transformamos la matriz (2.24) de esta forma:

$$U = \begin{bmatrix} R & S \\ T & P \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} R - \lambda & S - \mu \\ T - \lambda & P - \mu \end{bmatrix} = U' \quad (2.25)$$

para  $\lambda = \frac{R+T}{2}$  y  $\mu = \frac{S+P}{2}$  obtenemos:

$$U' = \begin{bmatrix} \frac{R-T}{2} & \frac{S-P}{2} \\ \frac{T-R}{2} & \frac{P-S}{2} \end{bmatrix} \quad (2.26)$$

Ahora consideramos un Hamiltoniano de un sistema de Ising 1D usando dos espines:

$$\mathbb{H} = -2J\sigma_1\sigma_2 - h\sigma_1 - h\sigma_2, \quad (2.27)$$

donde  $\sigma \pm 1$  denota los espines. Para este Hamiltoniano la energía que contribuye cada espin puede ser escrita como:

$$E = \begin{bmatrix} -J-h & J-h \\ J+h & -J+h \end{bmatrix} \quad (2.28)$$

En esta matriz las columnas representan el estado del espín  $\sigma_2 = (+1, -1)$  y las filas el estado del espín  $\sigma_1 = (+1, -1)$ . Se puede formular un juego en el que cada jugador obtiene una ganancia dada por  $-E$ . A estos juegos se le llaman juegos de Ising. Tienen la propiedad de que minimizar (2.27) corresponde con el equilibrio de Nash. Nótese que la ganancia dada por la ecuación (2.26) se parece a la ganancia de un juego de Ising. Entonces, el equilibrio de Nash para cualquier juego simétrico de 2x2 es el mismo que el de un juego de Ising en el que

$$J = \frac{R - T + P - S}{4} \quad h = \frac{R - T + S - P}{4} \quad (2.29)$$

Entonces, al usar herramientas termodinámicas en el juego de Ising podemos encontrar el estado de equilibrio que es equivalente al equilibrio de Nash. Sarkar y Benjamin ([13]) extendieron esta equivalencia para cuando uno tiene  $N$  jugadores en el dilema del prisionero. EL Hamiltoniano para este sistema está dado por:

$$\mathbb{H} = - \sum_{i=1}^N J\sigma_i\sigma_{i+1} - \sum_{i=1}^n \frac{h}{2}(\sigma_i\sigma_{i+1}). \quad (2.30)$$

La función de partición está dada por

$$Z = e^{N\beta J} (\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}). \quad (2.31)$$

Usando esta función de partición podemos calcular la magnetización promedio.

$$m = \frac{1}{N} \langle J_z \rangle = \frac{1}{N} \frac{\partial \log z}{\partial \beta h} = \frac{\sinh \beta h}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}} \quad (2.32)$$

En el caso del dilema del prisionero, ( $T > R > P > S$ ), usando la relación de (2.29) tenemos que  $h < 0$  y  $j > 0$ . Entonces, en el límite  $\beta \rightarrow \infty$ :

$$m \approx -1,$$

que corresponde a cuando todos los jugadores desertan, y entonces este resultado no contradice al equilibrio de Nash. Podemos calcular también la energía promedio por partícula:

$$E = \frac{1}{N} \langle \mathbb{H} \rangle = -\frac{1}{N} \frac{\partial \log Z}{\partial \beta} = -J - h \frac{\sin(\beta h) + \frac{1}{2} \frac{\sinh(2\beta h) - 4e^{-4\beta J} J/h}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}}}{\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}} \quad (2.33)$$

En el límite  $\beta \rightarrow \infty$  para  $h < 0$  y  $J > 0$ ,

$$E \approx -J + h, \quad (2.34)$$

que corresponde al estado en el que ambas partículas tienen espín  $-1$  lo cual no contradice los resultados conocidos sobre el equilibrio de Nash.

#### 2.1.4 Una aplicación a la ciencia política

Muchas situaciones en la ciencia política pueden ser vistas como agentes jugando el mismo juego una y otra vez. Es de interés estudiar como ciertas prácticas, convenciones y cooperación se sostienen cuando los involucrados pueden tener algún inventivo en el corto plazo por desviarse de el comportamiento esperado. Por ejemplo: Los tratados de libre comercio. Muchas veces se cree que la economía global mejoraría si todos los países accedieran a el libre comercio, pero que individualmente les iría mejor si adoptan medidas proteccionistas. Por ejemplo, se considera la siguiente representación de las políticas de comercio entre México y Estados Unidos:

MX/EU	Libre Mercado	Proteccionismo
Libre Mercado	10,10	1,12
Proteccionismo	12,1	4,4

(2.35)

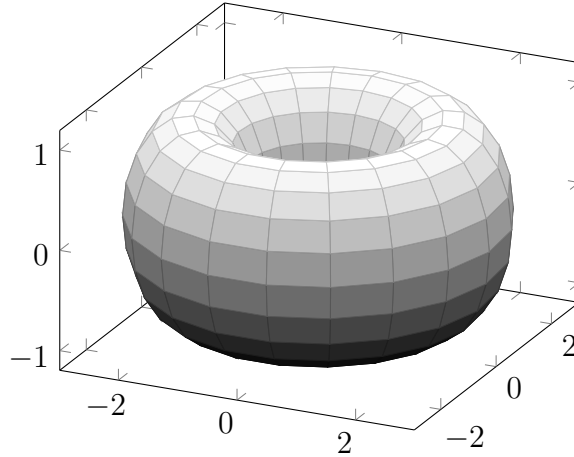
En este caso, si el juego es jugado sólo una vez, el equilibrio de Nash se da cuando los dos países eligen las políticas proteccionistas. Al generalizar para un número infinito de juegos podemos ver que se repite el patrón en el que cada país elige las políticas proteccionistas.

## 2.2 El modelo de ising bidimensional

Considere un enrejado bidimensional como el que se muestra

$$\begin{array}{ccccccc}
 n+1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & & \\
 \vdots & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & & \\
 3 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & & \\
 2 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & , \\
 1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & & \\
 1 & 2 & \dots & & n+1 & & 
 \end{array}$$

se imponen condiciones de frontera periódicas de forma que la partícula al final de cada fila y columna están conectadas. Esta configuración puede ser pensada como la superficie de un toro:



El Hamiltoniano se escribe como

$$\mathbb{H} = -J \sum_{i,j} (\sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}) - h \sum_{i,j} \sigma_{i,j}, \quad (2.36)$$

donde los espines ahora son indexados por dos índices que corresponden a las coordenadas de un punto en el enrejado. Se introduce una notación corta para  $\mathbb{H}$ :

$$\mathbb{H} = \sum_{j=1}^n [E(\mu_j, \mu_{j+1}) + E(\mu_j)], \quad (2.37)$$

donde

$$E(\mu_j, \mu_k) \equiv - \sum_{i=1}^n \sigma_{ij} \sigma_{ik}, \quad (2.38)$$

$$E(\mu_j) \equiv -J \sum_{i=1}^n \sigma_{ij} \sigma_{i+1} - h \sum_{i,j} \sigma_j, \quad (2.39)$$

y  $\mu_j$  se define como el conjunto de los espines en una columna en particular:

$$\mu_j \equiv \sigma_{1j}, \dots, \sigma_{nj}. \quad (2.40)$$

Luego se define una matriz de transferencia con elementos:

$$\langle \mu_j | P | \mu_k \rangle = e^{-\beta[E(\mu_j, \mu_k) + E(\mu_j)]}, \quad (2.41)$$

que es una matriz de  $2 \times 2$ . La función de partición será dada por

$$\Delta = Tr(P^n), \quad (2.42)$$

e, igual que en el caso unidimensional, el eigenvalor mayor es el buscado. En el límite termodinámico, el resultado final es

$$g(T) = -kT \ln[2 \cosh(2\beta J)] - \frac{kT}{2\pi} \int_0^\pi d\phi \ln \frac{1}{2} \left( 1 + \sqrt{1 - K^2 \sin^2 \phi} \right), \quad (2.43)$$

donde

$$K = \frac{2}{\cosh(2\beta J) \coth(2\beta J)}. \quad (2.44)$$

La energía por espín está dada por

$$\epsilon(T) = -2J \tanh(2\beta J) + \frac{k}{2\pi} \frac{dK}{d\beta} \int_0^\pi d\phi \frac{\sin^2 \phi}{\Delta(1 + \Delta)} \quad (2.45)$$

donde

$$\Delta = \sqrt{1 - K^2 \sin^2 \phi}. \quad (2.46)$$

De esta forma la magnetización se convierte en

$$m = \{1 - [\sinh(2\beta J)]^{-4}\}^{\frac{1}{8}}, \quad (2.47)$$

para  $T > T_c$  y 0 para  $T < T_c$  indicando una transición de fase de orden a desorden para el campo cero. La condición para determinar la temperatura crítica a la que ocurre la transición de fase resulta ser

$$2 \tanh^2(2\beta J) = 1, kT_c \approx 2.269185J. \quad (2.48)$$

Cerca de  $T = T_c$  la capacidad calorífica por espín está dada por:

$$\frac{C(t)}{k} = \frac{2}{\pi} \left( \frac{2J}{kT_c} \right)^2 \left[ -\ln \left( 1 - \frac{T}{T_c} \right) + \ln \left( \frac{kT_c}{2J} \right) - \left( 1 + \frac{\pi}{4} \right) \right]. \quad (2.49)$$

Entonces se ve que la capacidad calorífica diverge conforme  $T \rightarrow T_c$ . Por último, se encuentran los valores para los exponentes críticos. Los exponentes críticos son valores universales que caracterizan las propiedades singulares de las cantidades físicas. Para explicar los exponentes críticos del modelo de Ising en 2 dimensiones necesitaremos las siguientes definiciones.

$\Psi$	La magnetización en el límite de Curie.
$\tau$	$\frac{T-T_c}{T}$ .
$f$	La energía libre específica.
$C$	El calor específico.
$J$	El campo externo.
$\chi$	La susceptibilidad magnética.
$\xi$	La longitud de la correlación.
$d$	El número de dimensiones espaciales.
$\langle \Psi(\vec{x}) \Psi(\vec{y}) \rangle$	La función de correlación.
$r$	La distancia espacial.

De ahí obtenemos:

Exponentes para  $\tau > 0$

$\alpha$	$C \propto \tau^{-\alpha}$
$\gamma$	$\chi \propto \tau^{-\gamma}$
$\nu$	$\xi \propto \tau^{-\nu}$

Exponentes para  $\tau < 0$

$\beta$	$\Psi \propto (-\tau)^\beta$
---------	------------------------------



Exponentes para $\tau = 0$	
$\delta$	$J \propto \Psi^\delta$
$\mu$	$\langle \Psi(\vec{x}) \Psi(\vec{y}) \rangle \propto r^{-d+2-\mu}$

Los exponentes críticos obtenidos de la solución de Onsager [14] son:

$$\alpha = 0, \quad (2.50)$$

$$\beta = \frac{1}{8}, \quad (2.51)$$

$$\gamma = \frac{7}{4}, \quad (2.52)$$

$$\delta = 15, \quad (2.53)$$

$$\mu = \frac{1}{4}, \quad (2.54)$$

$$\nu = 1, \quad (2.55)$$

$$\omega = 2. \quad (2.56)$$

## 2.3 Aproximación del campo promedio para un enrejado en d dimensiones

Se pueden obtener aproximaciones de las propiedades termodinámicas de un enrejado de d dimensiones usando la aproximación del campo promedio. En esta aproximación el Hamiltoniano toma la siguiente forma:

$$\mathbb{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nu \epsilon \langle s \rangle s_i - \mu B \sum_{i=1}^N s_i = \sum_{i=1}^N E(\epsilon, B) s_i, \quad (2.57)$$

donde  $\epsilon$  es la constante de acoplamiento,  $\nu$  es el numero de vecinos cercanos y  $E(\nu, B) = \frac{1}{2} \nu \epsilon \langle s \rangle + \mu B$ . El término  $\frac{1}{2}$  nos asegura que sólo contemos cada espín una vez. La cantidad  $\langle s \rangle \equiv \langle s_i \rangle$  es el espín promedio por sitio. La cantidad  $\nu \epsilon \langle s \rangle s_i$  es la magnetización promedio entre el sitio  $i$  y sus vecinos más cercanos suponiendo que todos los vecinos tienen espín  $\langle s \rangle$ .

La función de partición puede ser escrita como

$$Z_n = \left( \sum_{s_i \pm 1} e^{\beta E s_i} \right)^N = (2 \cosh(\beta E))^N. \quad (2.58)$$

La energía libre de Gibbs es:

$$g(\epsilon, B) = -k_B T \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{N} \ln(Z_N) \right) = -k_B T \ln[2 \cosh(\beta E)]. \quad (2.59)$$

La probabilidad  $P(s_i)$  de que el sitio  $i$  tenga espín  $s_i$  está dada por:

$$P(s_i) = \frac{e^{\beta E s_i}}{\sum_{s_i=\pm 1} e^{\beta E s_i}} = \frac{e^{\beta E s_i}}{2 \cosh(\beta E)}. \quad (2.60)$$

La magnetización promedio está dada por:

$$\langle M \rangle = N \mu \langle s \rangle, \quad (2.61)$$

donde

$$\langle s \rangle = \frac{\sum_{s_i=\pm 1} s_i e^{\beta E s_i}}{\sum_{s_j=\pm 1} s_j e^{\beta E s_j}} = \tanh[\beta E] = \tanh \left[ \beta \left( \frac{1}{2} \nu \epsilon \langle s \rangle + \mu B \right) \right]. \quad (2.62)$$

Podemos determinar la temperatura crítica  $T_c$  a la que el enrejado comienza a ordenarse mientras la temperatura va descendiendo de la expresión del espín promedio (2.62). Escribamos (2.62) para  $B = 0$ :

$$\langle s \rangle = \tanh \left[ \frac{1}{2} \beta \nu \epsilon \langle s \rangle \right] = \tanh \left[ \frac{\nu \epsilon \langle s \rangle}{2 k_B T} \right]. \quad (2.63)$$

La ecuación (2.63) puede resolverse de manera gráfica. Vemos que la ecuación es de la forma  $\tanh(\alpha \langle s \rangle)$  con

$$\alpha = \left[ \beta \frac{\nu \epsilon}{2} \langle s \rangle + \beta \mu B \right]. \quad (2.64)$$

Entonces, tomamos  $f \equiv \langle s \rangle$  y graficamos  $\tanh(\alpha \langle s \rangle)$  vs  $\langle s \rangle$ . Y obtenemos las siguientes gráficas para  $\alpha < 1$  y  $\alpha > 1$ . Notamos que para el caso  $\alpha < 1$  sólo se intersectan en un punto, en  $\langle s \rangle = 0$ . Para  $\alpha > 1$  se intersectan en tres puntos: en  $\langle s \rangle = 0$  y en  $\langle s \rangle \pm s_0$ . La energía libre para estos casos está dada por:

$$X(m, n) = \begin{cases} -k_B T \ln(2), & \text{si } \langle s \rangle = 0 \\ -k_B T \ln(2 \cosh(\frac{1}{2} \beta \nu \epsilon s_0)), & \text{si } \langle s \rangle \pm s_0 \end{cases}$$

Entonces los valores  $\langle s \rangle = \pm s_0$  describen estados de posible equilibrio termodinámico ya que minimizan la energía libre. El punto de transición ocurre en  $\alpha = 1$  y por lo tanto cuando  $\frac{\nu \epsilon}{2 k_B T} = 1$ . La temperatura crítica en la aproximación de campo promedio es  $T = T_c = \frac{\nu \epsilon}{2 k_B}$ . Ahora analizaremos el comportamiento de la capacidad calorífica cerca de la temperatura crítica. La energía interna para  $B = 0$  es:

$$U = -\frac{1}{Z_N} \frac{\partial Z_N}{\partial \beta} = -\frac{1}{2} N \nu \epsilon \langle s \rangle^2. \quad (2.65)$$

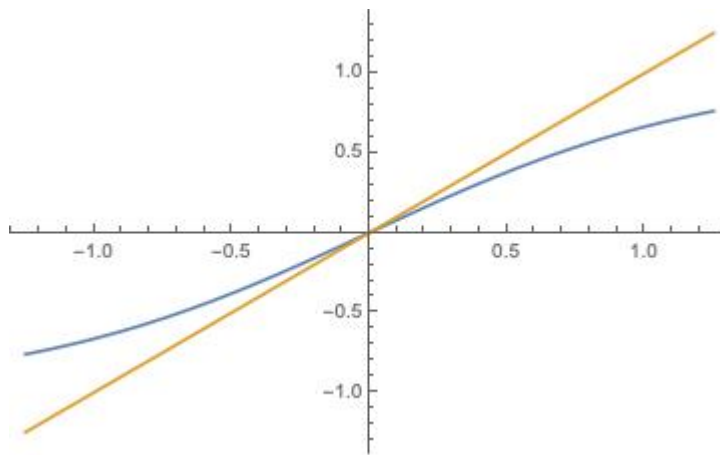


Figura 2.1: Gráfica de (2.63) para  $\alpha < 1$

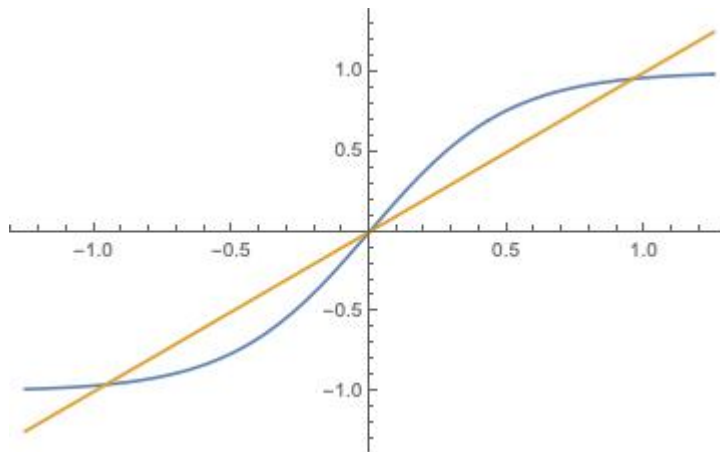


Figura 2.2: Gráfica de (2.63) para  $\alpha > 1$

La capacidad calorífica es

$$C_N = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_N = -k_B \beta^2 \left( \frac{\partial U}{\partial \beta} \right)_N = N k_B \nu \epsilon \beta^2 \langle s \rangle \left( \frac{\partial \langle s \rangle}{\partial \beta} \right)_N \quad (2.66)$$

pero

$$\left( \frac{\partial \langle s \rangle}{\partial \beta} \right)_N = \text{sech}^2 \left( \beta \frac{\nu \epsilon}{2} \langle s \rangle \right) \left[ \frac{\nu \epsilon}{2} \langle s \rangle + \beta \frac{\nu \epsilon}{2} \left( \frac{\partial \langle s \rangle}{\partial \beta} \right)_N \right], \quad (2.67)$$

entonces

$$\left( \frac{\partial \langle s \rangle}{\partial \beta} \right)_N = \frac{\nu \epsilon \langle s \rangle}{3 \cosh^2 \left( \beta \frac{\nu \epsilon \langle s \rangle}{2} \right) - \beta \nu \epsilon}, \quad (2.68)$$

entonces la capacidad calorífica se convierte en

$$C_N = \frac{N k_B \beta^2 \nu^2 \epsilon^2 \langle s \rangle^2}{2 \cosh^2 \left( \beta \frac{\nu \epsilon}{2} \langle s \rangle \right) - \beta \nu \epsilon} = \frac{2 N k_B \langle s \rangle^2 \left( \frac{T_c}{t} \right)}{[\cosh^2 \left( \langle s \rangle \frac{T_c}{T} \right) - \frac{T_c}{T}]}. \quad (2.69)$$

La última cantidad que queremos calcular es la susceptividad magnética  $\chi_{T,N}$  que se define de la siguiente manera.

$$\chi_{T,N}(B) = \left( \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} \right)_{T,N} = N \mu \left( \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} \right)_{t,n}. \quad (2.70)$$

De (2.62) podemos escribir:

$$\left( \frac{\partial \langle s \rangle}{\partial B} \right)_{T,N} = \text{sech}^2 \left( \beta \frac{\nu \epsilon}{2} \langle s \rangle + \beta \mu B \right) \left( \beta \frac{\nu \epsilon}{2} \left( \frac{\partial \langle s \rangle}{\partial B} \right)_{T,N} + \beta \mu \right), \quad (2.71)$$

O

$$\left( \frac{\partial \langle s \rangle}{\partial B} \right)_{T,N} = \frac{2 \beta \mu}{2 \cosh^2 \left[ \beta \frac{\nu \epsilon}{2} \langle s \rangle + \beta \mu B \right] - \beta \nu \epsilon} \quad (2.72)$$

La susceptibilidad magnética  $\chi_{T,N}(B)$  está entonces dada por:

$$\chi_{T,N}(B) = \frac{2 \beta N \mu^2}{2 \cosh^2 \left[ \beta \frac{\nu \epsilon}{2} \langle s \rangle + \beta \mu B \right] - \beta \nu \epsilon} \quad (2.73)$$

La susceptibilidad magnética, el límite cuando  $B = 0$  es igual a:

$$\chi_{T,N}(0) = \frac{2 \beta N \mu^2}{2 \cosh^2 \left[ \beta \frac{\nu \epsilon}{2} \langle s \rangle \right] - \beta \nu \epsilon} = \frac{2 N \mu^2}{\nu \epsilon} \frac{\left( \frac{T_c}{T} \right)}{\cosh^2 \left( \langle s \rangle \frac{T_c}{T} \right) - \frac{T_c}{T}}, \quad (2.74)$$

con  $\langle s \rangle$  dado en (2.62).

## **2.4 Simulación por computadora.**

Una simulación por computadora es muy útil para evaluar las variables del sistema. Uno de los métodos más usados para hacer simulaciones por computadora es el método de Montecarlo. De la simulación obtenemos lo siguiente:

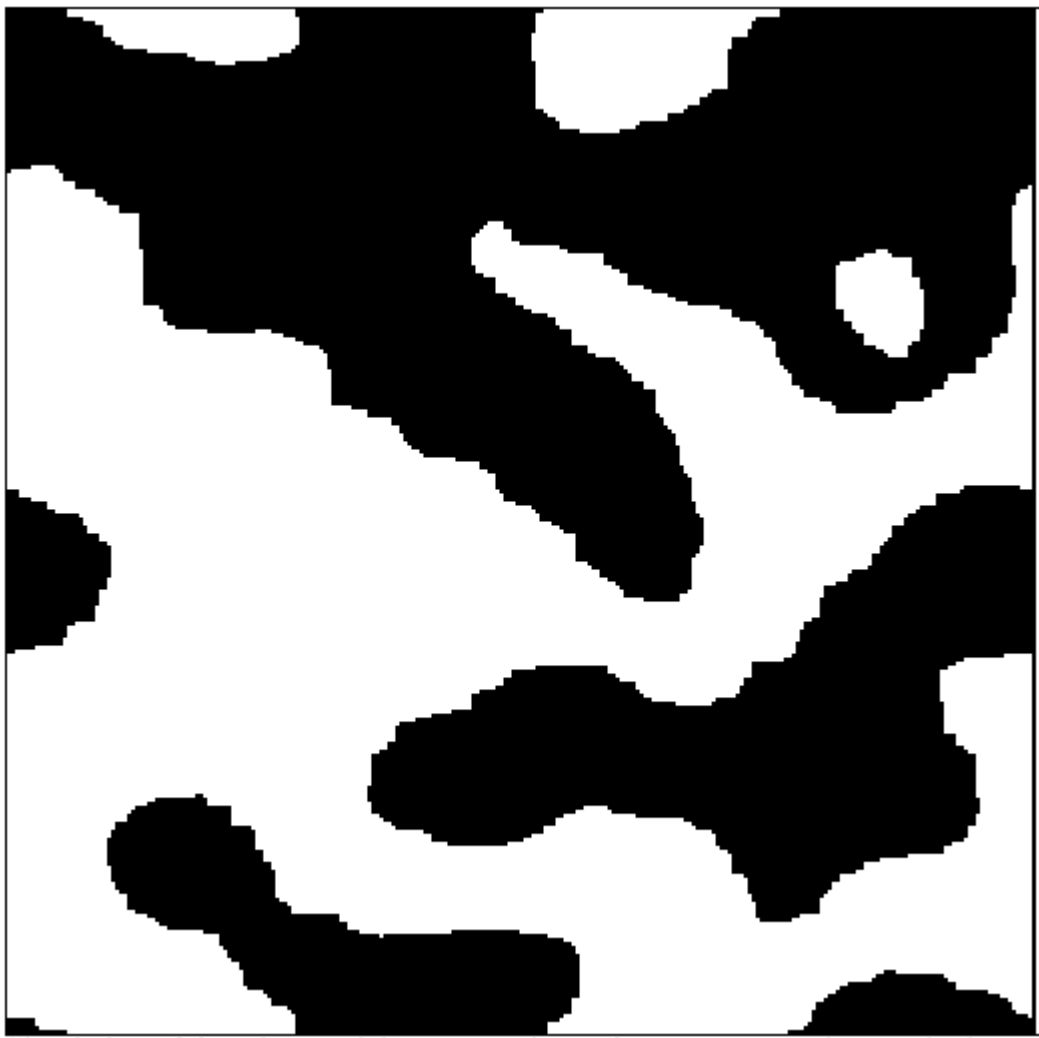


Figura 2.3: En la gráfica se muestran los elementos de dominio.

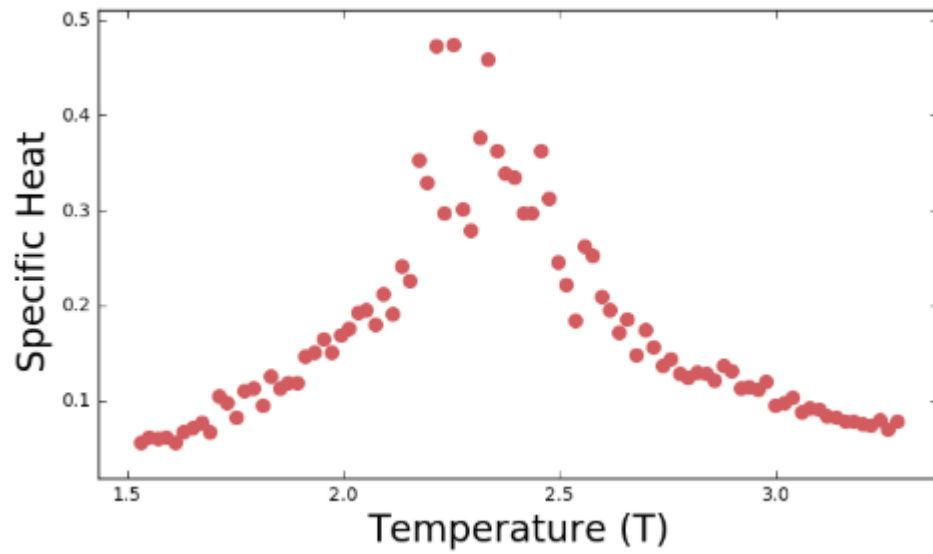


Figura 2.4: Esta gráfica corresponde a la temperatura vs calor específico.

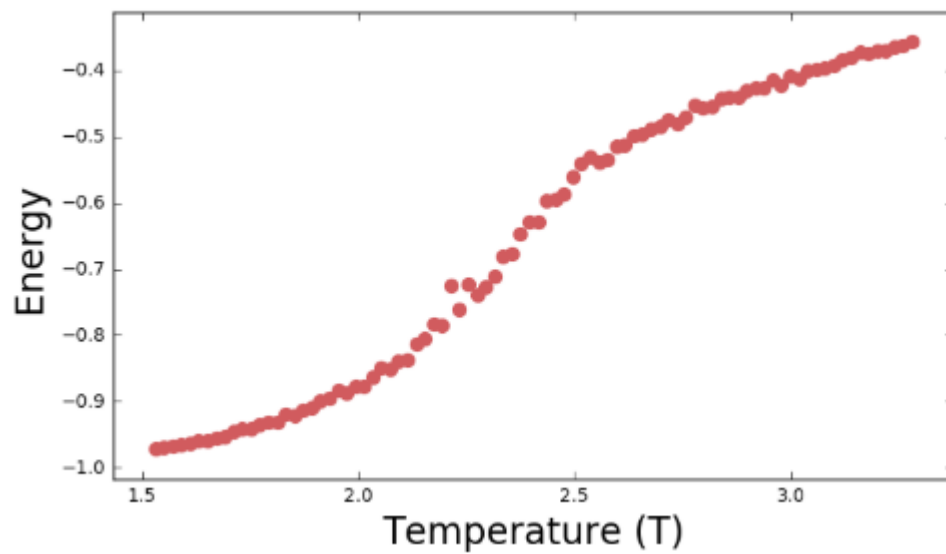


Figura 2.5: Esta gráfica corresponde a la temperatura vs energía.

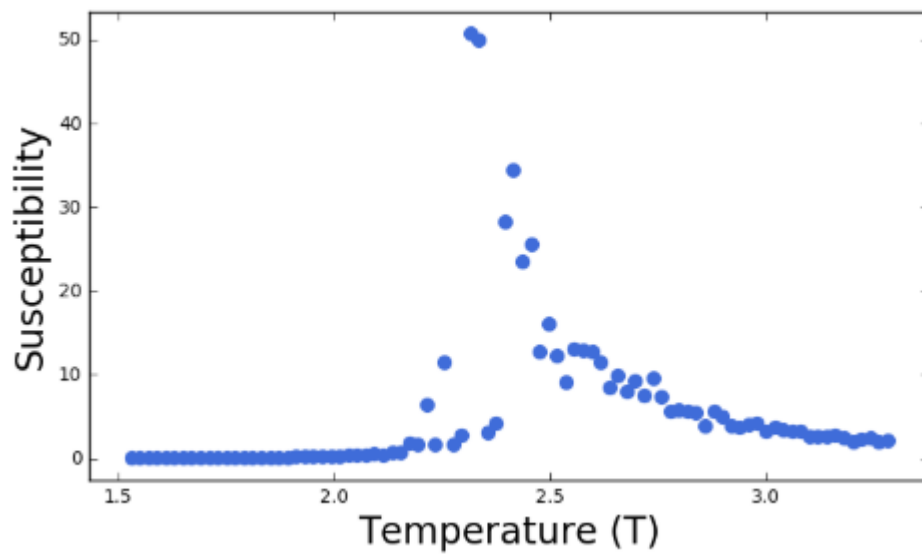


Figura 2.6: Esta gráfica corresponde a la temperatura vs la susceptibilidad.

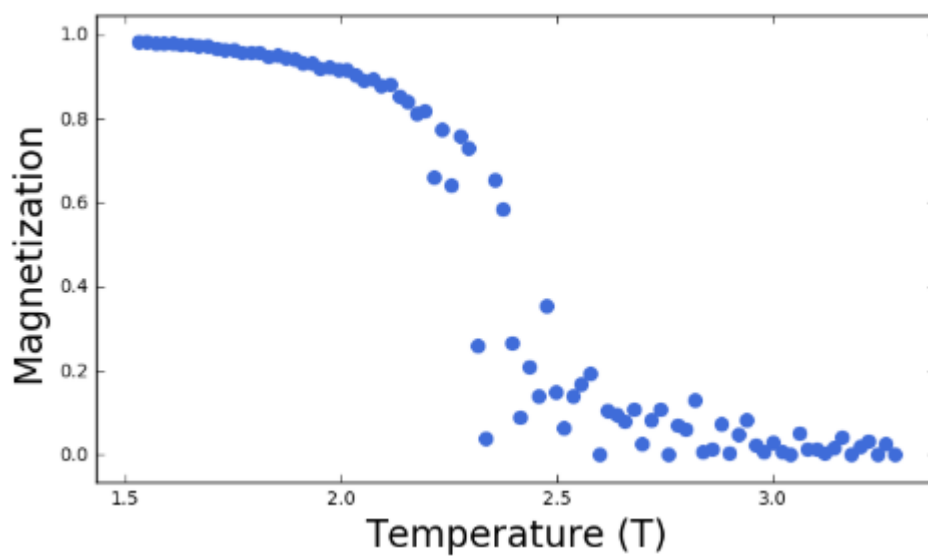


Figura 2.7: Esta gráfica corresponde a la temperatura vs magnetizacion.



## Capítulo 3

# El oscilador armónico cuántico unidimensional

En este capítulo se resuelve la ecuación de Schrödinger para un oscilador armónico cuántico unidimensional. Primero se muestran algunos operadores lineales y sus propiedades. Luego se introduce el concepto de operador Hermítico y se dan algunos ejemplos. Para finalizar, usando estas herramientas matemáticas, se resuelve la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico cuántico unidimensional usando los operadores de creación y aniquilación.

### 3.1 Operadores lineales

Sean  $\hat{A}$  y  $\hat{B}$  dos operadores lineales. Se define el conmutador entre dos operadores como

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (3.1)$$

**Proposición 3.1.1.** *El conmutador satisface el álgebra de Poisson.*

$$[\hat{A}, \hat{A}] = 0 \quad (3.2)$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}] \quad (3.3)$$

$$[\hat{A}, \alpha] = 0 \quad \alpha = \text{constante} \quad (3.4)$$

$$[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}] \quad (3.5)$$

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \quad (3.6)$$

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0 \quad (3.7)$$

*Proof.* Para (3.2) tenemos lo siguiente

$$[\hat{A}, \hat{A}] = \hat{A}\hat{A} - \hat{A}\hat{A} = 0 \quad (3.8)$$

$$(3.9)$$

Para (3.3) tenemos, por un lado:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (3.10)$$

Por otro lado

$$-[\hat{B}, \hat{A}] = -\hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{B}, \quad (3.11)$$

por lo tanto

$$-[\hat{B}, \hat{A}] = [\hat{A}, \hat{B}]. \quad (3.12)$$

$$(3.13)$$

Para (3.4) tenemos:

$$[\hat{A}, \alpha] = 0. \quad (3.14)$$

Se sigue del hecho de que  $\alpha$  es un número.

Para (3.5) tenemos:

$$[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}] \quad (3.15)$$

$$= \hat{A}(\hat{B} + \hat{C}) - (\hat{B} + \hat{C})\hat{A} \quad (3.16)$$

$$= (\hat{A}\hat{B}) + (\hat{A}\hat{C}) - (\hat{B}\hat{A} + \hat{C}\hat{A}) \quad (3.17)$$

$$= (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) + (\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}) \quad (3.18)$$

$$= [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}] \quad (3.19)$$

Para (3.6) del lado izquierdo de la igualdad tenemos:

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} \quad (3.20)$$

Y del otro lado

$$[\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{C} + (\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}) \quad (3.21)$$

$$= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} \quad (3.22)$$

$$= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} \quad (3.23)$$

Por lo tanto

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \quad (3.24)$$

Para (3.7) tenemos, primero:

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] = [\hat{A}, (\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B})] = [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] \quad (3.25)$$

$$\begin{aligned} & - [\hat{A}, \hat{C}\hat{B}], \\ & = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} - (\hat{C}[\hat{A}, \hat{B}] \\ & + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}) \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned} & = \hat{B}(\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}) + (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{C}, \\ & - (\hat{C}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) + (\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A})\hat{B}) \end{aligned} \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} & = \hat{B}\hat{A}\hat{C} + \hat{A}\hat{B}\hat{C} + \hat{C}\hat{B}\hat{A} + \hat{C}\hat{A}\hat{B} \\ & - (\hat{B}\hat{C}\hat{A} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} + \hat{C}\hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}\hat{B}), \end{aligned} \quad (3.28)$$

$$= \hat{A}\hat{B}\hat{C} + \hat{C}\hat{B}\hat{A} - (\hat{B}\hat{C}\hat{A} + \hat{A}\hat{C}\hat{B}). \quad (3.29)$$

Siguiendo el mismo procedimiento obtenemos, para  $[\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]]$  y  $[\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]]$

$$[\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = \hat{C}\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} - (\hat{A}\hat{B}\hat{C} + \hat{C}\hat{B}\hat{A}), \quad (3.30)$$

$$[\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] = \hat{B}\hat{C}\hat{A} + \hat{A}\hat{C}\hat{B} - (\hat{C}\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}\hat{C}). \quad (3.31)$$

Sumando los tres resultados obtenemos lo que buscábamos.  $\square$

## 3.2 Operadores Hermíticos

Otra clase importante de operadores son los operadores autoadjuntos o Hermíticos, que se definen de la siguiente manera:

$$A^\dagger = A, \quad (3.32)$$

donde  $\dagger$  es el operador adjunto que satisface lo siguiente:

$$\langle Av|u \rangle = \langle v|A^\dagger u \rangle, \quad (3.33)$$

con  $u$  y  $v$  vectores arbitrarios.

Los operadores Hermíticos tienen las siguientes propiedades:

- La suma de operadores Hermíticos es un operador Hermítico.
- El producto de operadores Hermíticos que conmutan, es decir  $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ , es Hermítico.

### 3.3 Oscilador armónico

El Hamiltoniano básico es

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad (3.34)$$

donde  $\omega$  es la frecuencia del oscilador. Se definen los operadores

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x - \frac{ip}{m\omega} \right), \quad (3.35)$$

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x + \frac{ip}{m\omega} \right), \quad (3.36)$$

llamados operadores de creación y aniquilación respectivamente. Usando las propiedades de conmutación verificamos:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \left( \frac{1}{2\hbar} \right) (-i[x, p] + i[p, x]) = 1. \quad (3.37)$$

También se define el operador número de la siguiente manera

$$N = \hat{a}^\dagger \hat{a}, \quad (3.38)$$

que es Hermitico. Se demuestra que

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} = \left( \frac{m\omega}{2\hbar} \right) \left( x^2 + \frac{p^2}{m^2\omega^2} + \frac{i}{2\hbar} \right) [x, p], \quad (3.39)$$

$$= \frac{\mathcal{H}}{\hbar} - \frac{1}{2}. \quad (3.40)$$

De ahí obtenemos a siguiente relación entre el operador número y el Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \hbar\omega \left( N + \frac{1}{2} \right) \quad (3.41)$$

Como  $\mathcal{H}$  es una función lineal en  $N$ , éstas se pueden diagonalizar simultáneamente. Definimos un estado estacionario como

$$N|n\rangle = n|n\rangle, \quad (3.42)$$

donde  $n$  es un eigenvalor.

De (3.41) tenemos que

$$H|n\rangle = \left( N + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega |n\rangle \quad (3.43)$$

lo cual significa que los eigenvalores están dados por

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega. \quad (3.44)$$

Nótese también la siguiente relación:

$$[N, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}] = \hat{a}^\dagger [a, a] + [a^\dagger, a] a = -a, \quad (3.45)$$

y

$$[N, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger. \quad (3.46)$$

De esas relaciones obtenemos

$$N \hat{a}^\dagger |n\rangle = ([N, \hat{a}^\dagger] + \hat{a}^\dagger N) |n\rangle = (n+1) \hat{a}^\dagger |n\rangle, \quad (3.47)$$

y también

$$N \hat{a} |n\rangle = ([N, \hat{a}] + \hat{a} N) |n\rangle = (n-1) \hat{a} |n\rangle. \quad (3.48)$$

Estas relaciones implican que  $\hat{a}^\dagger |n\rangle$  ( $\hat{a} |n\rangle$ ) es también un estado estacionario con el valor propio incrementado o reducido en 1. De ahí el nombre de operador de creación y aniquilación, por que la energía se va aumentando o reduciendo en una unidad cuántica  $\hbar\omega$ .

De (3.47) deducimos que  $\hat{a} |n\rangle$  y  $|n-1\rangle$  son iguales salvo por una constante que las multiplica. Entonces escribimos

$$\hat{a} |n\rangle = c |n-1\rangle, \quad (3.49)$$

donde  $c$  es una constante a determinar tomando en cuenta el hecho de que  $|n\rangle$  y  $|n-1\rangle$  están normalizados. Entonces, por un lado

$$\langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} | n \rangle = c^2. \quad (3.50)$$

Del lado izquierdo tenemos  $\hat{a}^\dagger \hat{a} = N$ , entonces obtenemos

$$n = |c|^2. \quad (3.51)$$

Tomando como convención que  $c$  sea positivo obtenemos

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad (3.52)$$

y también

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad (3.53)$$

Supongamos que seguimos aplicando el operador de aniquilación a ambos lados de (3.52)

$$\hat{a}^2|n\rangle = \sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle, \quad (3.54)$$

$$\hat{a}^3|n\rangle = \sqrt{n(n-1)(n-2)}|n-3\rangle, \quad (3.55)$$

$\vdots$

Obtendríamos estados estacionarios con  $n$  cada vez más pequeño. Dado el requerimiento de que la norma de  $a|n\rangle$  debe ser positiva

$$n = \langle n|N|n\rangle = (\langle n|\hat{a}^\dagger) \cdot (\hat{a}|n\rangle) \geq 0, \quad (3.56)$$

entonces  $n$  nunca puede ser negativa y la secuencia termina en  $n = 0$ . Definimos como estado fundamental el estado de menor energía del oscilador que corresponde a

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (3.57)$$

Podemos aplicar el operador de creación al estado fundamental de manera consecutiva y obtenemos

$$1| \rangle = \hat{a}^\dagger|0\rangle, \quad (3.58)$$

$$2| \rangle = \frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}}1| \rangle = \left[ \frac{(\hat{a}^\dagger)^2}{\sqrt{2}}|0\rangle \right], \quad (3.59)$$

$$3| \rangle = \frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{3}}2| \rangle = \left[ \frac{(\hat{a}^\dagger)^3}{\sqrt{3!}}|0\rangle \right], \quad (3.60)$$

$$:n| \rangle = \left[ \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \right]. \quad (3.61)$$

De esta forma encontramos una forma de los estados estacionarios de  $N$  y  $\mathcal{H}$  con niveles de energía

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (3.62)$$

De (3.52) y (3.53), y la ortonormalidad de  $|n\rangle$  obtenemos los elementos de la matriz

$$\langle n'|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n\delta_{n',n-1}} \quad , \quad \langle n'|\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1\delta_{n',n+1}}. \quad (3.63)$$

Esto, junto a

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(-\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad (3.64)$$

nos da los elementos de la matriz para los operadores  $x$  y  $p$

$$\langle n'|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n\delta_{n',n-1}} + \sqrt{n+1\delta_{n',n+1}}), \quad (3.65)$$

$$\langle n'|p|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(-\sqrt{n\delta_{n',n-1}} + \sqrt{n+1\delta_{n',n+1}}). \quad (3.66)$$

El método de los operadores puede ser usado también para encontrar las eigenfunciones de energía en el espacio de posiciones. Empezamos usando el estado fundamental

$$a|0\rangle$$

que, en esta representación, se lee

$$\langle x'|\hat{a}|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\langle x'|p\left(x + \frac{ip}{m\omega}\right)|0\rangle = 0. \quad (3.67)$$

que se puede escribir como la ecuación diferencial del estado fundamental de la ecuación de onda  $x'|0\rangle$ :

$$\left(x' + x_0^2 \frac{d}{dx'}\langle x'|0\rangle\right) = 0, \quad (3.68)$$

donde se introduce

$$x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad (3.69)$$

que nos da las unidades de longitud del oscilador. Vemos que la solución normalizada de (3.68) es

$$\langle x'|0\rangle = \left(\frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{x_0}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x'}{x_0}\right)^2\right]\right). \quad (3.70)$$

Obtenemos también las eigenfunciones de energía para estados excitados al evaluar

$$\langle x'|1\rangle = \langle x'|\hat{a}^\dagger|0\rangle \left(\frac{1}{\sqrt{2}x_0} \left(x' - x_0^2 \frac{d}{dx'}\right)\right) \langle x'|0\rangle, \quad (3.71)$$

$$\langle x'|2\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \langle x'|(\hat{a}^\dagger)^2|0\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}!}\right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\right)^2 \left(x' - x_0^2 \frac{d}{dx'}\right)^2 \langle x'|0\rangle, \dots,$$

En general obtenemos

$$\langle x'|n\rangle = \left(\frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}}\sqrt{2^n n!}\right) \left(\frac{1}{x_0^{n+\frac{1}{2}}}\right) \left(x' - x_0^2 \frac{d}{dx'}\right)^n \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x'}{x_0}\right)^2\right] \quad (3.72)$$

### 3.4 El principio de incertidumbre de Heisenberg

Una forma de medir la incertidumbre de los valores medidos se obtiene calculando la desviación cuadrática media. Para  $G$ , una observación es, el promedio del cuadrado de las diferencias de  $G$  y el valor medio  $\langle G \rangle$

$$(\Delta G)^2 := \langle G - \langle G \rangle^2 \rangle = \langle G^2 \rangle - \langle G \rangle^2 \quad (3.73)$$

La incertidumbre de una observación está definida como la raíz cuadrada de la desviación media cuadrática

$$\Delta G := \sqrt{\langle G^2 \rangle - \langle G \rangle^2} \quad (3.74)$$

En la mecánica clásica el estado de una partícula puede ser caracterizado por en cualquier momento por valores bien definidos para todas sus coordenadas  $q^i$  y todas las componentes  $p_k$  de su momento. En mecánica cuántica esas observaciones están sujetas a las incertidumbres  $\Delta q^i$  y  $\Delta p_k$ . Se define la incertidumbre como la diferencia del valor medio del cuadrado y el cuadrado del valor medio.

$$\Delta q^i = \sqrt{\langle (q^i)^2 \rangle - \langle q^i \rangle^2}, \quad \Delta p_j = \sqrt{\langle (p_j)^2 \rangle - \langle p_j \rangle^2}. \quad (3.75)$$

Las incertidumbres cumplen desigualdades que limitan las mediciones de forma fundamental. Entonces cumplen lo que se conoce como la relación de incertidumbre para la posición y el momento.

Sean

$$q^i, (i = 1, 2, \dots, f) \quad (3.76)$$

las coordenadas de un sistema Lagrangiano o Hamiltoniano con  $f$  grados de libertad. Y sea

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}, \quad k = 1, 2, \dots, f \quad (3.77)$$

el momento canónico conjugado. En un estado dado del sistema los resultados de cualquier medición siempre serán compatibles con la siguiente desigualdad para la desviación estándar de coordenadas y momento.

$$(\Delta p_k)(\Delta q^i) \geq \frac{1}{2} \hbar \delta_k^i. \quad (3.78)$$



Donde  $\hbar$  es la constante reducida de Plank .El oscilador armónico unidimensional es decrito por el Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \equiv \frac{1}{2} [z_2^2 + z_1^2] \quad (3.79)$$

donde

$$z_2 := \frac{p}{\sqrt{m}}, \quad \sqrt{m\omega} q \quad (3.80)$$

Suponiendo que el oscilador es reemplazado por los operadores cuánticos al rememplazar  $p$  y  $q$  por operadores. El promedio de  $\mathcal{H}$  con energía  $E$  es

$$E = \langle \mathcal{H} \rangle = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \langle q^2 \rangle \equiv [\langle z_2^2 \rangle + \langle z_1^2 \rangle] \quad (3.81)$$

La simetría  $q \leftrightarrow -q$  y  $p \leftrightarrow -p$  sugiere que los valores medios para esas variables se desvanecen en  $\langle q \rangle = 0$  y  $\langle p \rangle = 0$ . En ese caso obtenemos

$$(\Delta q)^2 = \langle q^2 \rangle, \quad (\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle \quad (3.82)$$

y de (3.78) obtenemos la siguiente desigualdad:

$$\langle z_2^2 \rangle \langle z_1^2 \rangle = \omega^2 \langle q^2 \rangle \langle p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \omega^2. \quad (3.83)$$

De (3.73) se concluye que  $\langle G^2 \rangle \geq (\Delta G)^2$  y por lo tanto que

$$\langle q^2 \rangle \langle p^2 \rangle \geq (\Delta q)^2 (\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (3.84)$$

Esto es suficiente para que se cumplan las siguientes desigualdades

$$0 \leq \frac{1}{2} \left( \sqrt{z_2^2} - \sqrt{z_1^2} \right)^2 = \langle \mathcal{H} \rangle - \sqrt{\langle z_1^2 \rangle \langle z_2^2 \rangle} \leq E - \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (3.85)$$

Si hacemos  $E = E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$  entonces

$$\langle z_1^2 \rangle = \langle z_2^2 \rangle = \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (3.86)$$

Entonces, la energía del oscilador armónico está acotada por debajo por la relación de incertidumbre de Heisenberg para la posición y el momento. El estado con menor energía  $E = \frac{\hbar\omega}{2}$  y con propiedades

$$\langle p^2 \rangle = \frac{1}{2}m\hbar\omega \quad y \quad \langle q^2 \rangle = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m\omega} \quad (3.87)$$

es compatible con esa relación.

### 3.5 Solución a la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico unidimensional

Los estados de una partícula que se mueve en un potencial atractivo son estados ligados. En la mecánica clásica esto ocurre cuando la partícula está también atrapada en un potencial. Para el oscilador armónico unidimensional donde

$$U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (3.88)$$

la partícula está cautiva para cualquier nivel de energía  $E$  y todos los estados son estados ligados y entonces el espectro energético es discreto. Tomamos la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar\dot{\psi}(t, x) = \mathcal{H}\psi(t, x), \quad (3.89)$$

y la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$E\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x)\right)\psi(x), \quad (3.90)$$

insertamos el Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad (3.91)$$

y escogemos la forma estacionaria de las soluciones

$$\psi(t, x) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\phi(x). \quad (3.92)$$

La ecuación (3.90) toma la forma

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\phi(x) = E\phi(x), \quad (3.93)$$

Buscamos las soluciones para las condiciones de borde  $\phi(\pm\infty) = 0$ . Se puede resolver usando una serie de potencias o por el método que se muestra a continuación. Definimos también el conmutador de dos operadores lineales como:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}, \quad (3.94)$$

con las siguientes propiedades

$$[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}] \quad (3.95)$$

$$[\hat{A}, \alpha] = 0 \quad \alpha = \text{constante} \quad (3.96)$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}] \quad (3.97)$$

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{B}, \hat{A}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \quad (3.98)$$

$$(3.99)$$

Se definen los siguientes dos operadores diferenciales no Hermíticos.

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\hat{P} + im\omega x), \quad (3.100)$$

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\hat{P} - im\omega x), \quad (3.101)$$

llamados operadores de creación y aniquilación respectivamente. Al hacer el producto de estos operadores obtenemos lo siguiente

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right) \left(x^2 \frac{p^2}{m^2\omega^2}\right) + \left(\frac{i}{2\hbar}\right) [x, p] \quad (3.102)$$

$$= \frac{\mathcal{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \quad (3.103)$$

Usando el conmutador encontramos lo siguiente:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (3.104)$$

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{a}] = \hat{\mathcal{H}}\hat{a} - \hat{a}\hat{\mathcal{H}} = -\hbar\omega\hat{a} \quad (3.105)$$

$$\implies \hat{\mathcal{H}}\hat{a} = \hat{a}\hat{\mathcal{H}} - \hbar\omega\hat{a} \quad (3.106)$$

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{a}^\dagger] = \hat{\mathcal{H}}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{\mathcal{H}} = \hbar\omega\hat{a}^\dagger \quad (3.107)$$

$$\implies \hat{\mathcal{H}}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{\mathcal{H}} + \hbar\omega\hat{a}^\dagger \quad (3.108)$$

Aplicamos el operador de creación y obtenemos

$$\hat{\mathcal{H}}\phi_+ = E_+\phi_+ \quad (3.109)$$

$$\hat{\mathcal{H}}\phi_+ = \hat{\mathcal{H}}\hat{a}^\dagger\phi = (\hat{a}^\dagger\hat{\mathcal{H}} - \hbar\omega\hat{a}^\dagger)\phi \quad (3.110)$$

$$= \hat{a}^\dagger\hat{\mathcal{H}}\phi - \hbar\omega\hat{a}^\dagger\phi \quad (3.111)$$

$$= \hat{a}^\dagger E\phi - \hbar\omega\hat{a}^\dagger\phi \quad (3.112)$$

$$= E\hat{a}^\dagger\phi - \hbar\omega\hat{a}^\dagger\phi \quad (3.113)$$

$$= (E + \hbar\omega)\hat{a}^\dagger\phi \quad (3.114)$$

$$= (E + \hbar\omega)\phi_+ \quad (3.115)$$

$$E_+ = E + \hbar\omega \quad (3.116)$$

$$\hat{\mathcal{H}} = E_+\phi_+ \quad (3.117)$$

Aplicamos el operador de aniquilación y obtenemos

$$\hat{\mathcal{H}}\phi_- = E_-\phi_- \quad (3.118)$$

$$\hat{\mathcal{H}}\phi_- = \hat{\mathcal{H}}\hat{a}^\dagger\phi = (\hat{a}\hat{\mathcal{H}} - \hbar\omega\hat{a})\phi \quad (3.119)$$

$$= \hat{a}\hat{\mathcal{H}}\phi - \hbar\omega\hat{a}\phi \quad (3.120)$$

$$= \hat{a}E\phi - \hbar\omega\hat{a}\phi \quad (3.121)$$

$$= E\hat{a}\phi - \hbar\omega\hat{a}\phi \quad (3.122)$$

$$= (E - \hbar\omega)\hat{a}\phi \quad (3.123)$$

$$= (E - \hbar\omega)\phi_- \quad (3.124)$$

$$E_- = E - \hbar\omega \quad (3.125)$$

$$\hat{\mathcal{H}} = E_-\phi_- \quad (3.126)$$

El espectro energético se obtiene al aplicar repetidamente los operadores de creación y aniquilación. Entonces los niveles de energía están dados por

$$E' = E \pm n\hbar\omega \quad (3.127)$$

## Capítulo 4

# Ondas electromagnéticas

En este capítulo veremos las ecuaciones de Maxwell y como a partir de ellas se pueden deducir las ecuaciones de ondas electromagneticas en el vacío. Para esto es necesario introducir algunos conceptos. El operador  $\vec{\nabla}$  que se define como sigue [5]:

$$\vec{\nabla} = \hat{i} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{j} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{k} \frac{\partial}{\partial z},$$

donde  $\hat{i}$  es el vector unitario en dirección del eje  $x$ ,  $\hat{j}$  es el vector unitario en dirección del eje  $y$  y  $\hat{k}$  es el vector unitario en dirección del eje  $z$ . En un espacio de  $n$  dimensiones tenemos:

$$\vec{\nabla} = \left( \frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n} \right),$$

El gradiente de una función  $f$  de tres variables se define usando el operador  $\vec{\nabla}$  como sigue:

$$\vec{\nabla} f = \left( \hat{i} \frac{\partial f}{\partial x} + \hat{j} \frac{\partial f}{\partial y} + \hat{k} \frac{\partial f}{\partial z} \right).$$

La divergencia de  $\vec{F}$  se obtiene al hacer el producto punto de  $\vec{F}$  con  $\vec{\nabla}$ :

$$\text{div} \vec{F} = \vec{\nabla} \cdot \vec{F} = \frac{\partial F_1}{\partial x} + \frac{\partial F_2}{\partial y} + \frac{\partial F_3}{\partial z}.$$

La divergencia tiene una interpretación física muy importante. Si imaginamos que  $\vec{F}$  es el campo de velocidades de un fluido, entonces la divergencia representa la razón de expansión por unidad de volumen bajo el flujo del fluido en cuestión. El rotacional, usando la notación de Einstein se escribe de la siguiente manera:

$$(\vec{\nabla} \times \vec{F})_k = \epsilon_{klm} \partial_l F_m,$$

donde  $\epsilon_{ijk}$  es el tensor de Levi-Civita. Este operador también puede ser visto como el producto cruz de  $\vec{\nabla}$  con  $\vec{F}$ , es decir

$$\begin{aligned} \text{rot} \vec{F} &= \nabla \times \vec{F} \\ &= \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ F_1 & F_2 & F_3 \end{vmatrix} = \left( \frac{\partial F_3}{\partial y} - \frac{\partial F_2}{\partial z} \right) \hat{i} + \left( \frac{\partial F_1}{\partial z} - \frac{\partial F_3}{\partial x} \right) \hat{j} + \left( \frac{\partial F_2}{\partial x} - \frac{\partial F_1}{\partial y} \right) \hat{k}. \end{aligned}$$

Si  $\vec{F}$  representa el flujo de un fluido, entonces el rotacional nos dice si el fluido tiene remolinos o no. Por ejemplo, si se cumple que

$$\vec{\nabla} \times \vec{F} = 0$$

podemos decir que el fluido no tiene remolinos, a los campos vectoriales de este tipo se les llama *irrotacionales*.

Otro operador importante es el Laplaciano  $\nabla^2$ , el cual se define como la divergencia del gradiente, es decir

$$\nabla^2 f = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}.$$

Además, la ecuación de Laplace es:

$$\nabla^2 f = 0.$$

## 4.1 Ecuaciones de Maxwell y ondas electromagnéticas

En las unidades Gauss las ecuaciones de Maxwell son [6]

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi\rho, \tag{4.1}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \tag{4.2}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \tag{4.3}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = 4\pi\vec{J} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}. \tag{4.4}$$

Donde  $\vec{E}$  es el campo eléctrico,  $\vec{B}$  es el campo magnético,  $\rho$  es la densidad de carga eléctrica,  $\vec{J}$  es la densidad de corriente eléctrica y  $c$  es la velocidad de la

luz en el vacío.

Cada una de estas ecuaciones tiene una interpretación:

a) La ecuación (4.1) nos dice que el flujo eléctrico que pasa por un volumen es proporcional a la carga encerrada.

b) La ecuación (4.2) nos indica que la variación temporal de un campo magnético induce una corriente eléctrica.

c) La ecuación (4.3) nos dice que no hay monopolos magnéticos. Es decir, las líneas de campo magnético no divergen de ningún punto ni convergen a algún punto.

c) La ecuación (4.4) nos dice que un campo eléctrico que varía con el tiempo genera un campo magnético.

Se dice que las ecuaciones de Maxwell están en el vacío cuando no hay fuentes  $\rho = 0$  y  $\vec{J} = 0$ , en este caso se obtiene:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0, \quad (4.5)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (4.6)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad (4.7)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}. \quad (4.8)$$

Veamos como podemos obtener la ecuación de onda para el campo magnético y eléctrico, tomando el rotacional en las ecuaciones (4.8) y (4.6) obtenemos:

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{B}) = \vec{\nabla} \times \left( \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right), \quad (4.9)$$

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}) = \vec{\nabla} \times \left( -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \right), \quad (4.10)$$

es decir

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{B}) = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \times \vec{E}), \quad (4.11)$$

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}) = -\frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \times \vec{B}). \quad (4.12)$$

Ahora, ocupando las ecuaciones (4.6) y (4.8) en los segundos miembros de las dos ecuaciones anteriores obtenemos las siguientes expresiones:

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{B}) = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \right) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{B}, \quad (4.13)$$

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}) = -\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right) = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{E}. \quad (4.14)$$

Además, recordando que cualquier campo vectorial cumple la identidad

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) - \nabla^2 \vec{A} \quad (4.15)$$

y que se cumplen las ecuaciones (4.5)-(4.7) tenemos que

$$\nabla^2 \vec{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2}, \quad (4.16)$$

$$\nabla^2 \vec{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}. \quad (4.17)$$

Entonces, los vectores  $\vec{B}$  y  $\vec{E}$  cumplen la ecuación de onda en el vacío. [6]

## 4.2 Ondas planas

Ahora estudiemos las funciones de la forma

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}, \quad (4.18)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{B}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}, \quad (4.19)$$

con

$$\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$$

un vector constante y  $\omega$  un escalar constante. Note que derivando al campo eléctrico con respecto al tiempo, obtenemos

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{E} = \vec{E}_0 \frac{\partial}{\partial t} \left( e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right) = \vec{E}_0 (-i\omega) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} = -i\omega \vec{E}. \quad (4.20)$$

Además, las derivadas espaciales del campo eléctrico son

$$\frac{\partial}{\partial x} \vec{E} = \vec{E}_0 \frac{\partial}{\partial x} \left( e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right) = \vec{E}_0 (ik_x) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} = ik_x \vec{E}, \quad (4.21)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \vec{E} = \vec{E}_0 \frac{\partial}{\partial y} \left( e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right) = \vec{E}_0 (ik_y) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} = ik_y \vec{E}, \quad (4.22)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \vec{E} = \vec{E}_0 \frac{\partial}{\partial z} \left( e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right) = \vec{E}_0 (ik_z) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} = ik_z \vec{E}. \quad (4.23)$$



Lo mismo ocurre para el campo magnético  $\vec{B}$ . Entonces, para estos campos podemos hacer las identificaciones

$$\vec{\nabla} \longrightarrow i\vec{k}, \quad \frac{\partial}{\partial t} \longrightarrow -i\omega. \quad (4.24)$$

Tomando en cuenta estas identificaciones en las ecuaciones de Maxwell (4.5)-(4.8) y obtenemos las siguientes ecuaciones:

$$\vec{k} \cdot \vec{E} = 0, \quad (4.25)$$

$$\vec{k} \times \vec{E} = \frac{\omega}{c} \vec{B}, \quad (4.26)$$

$$\vec{k} \cdot \vec{B} = 0, \quad (4.27)$$

$$\vec{k} \times \vec{B} = -\frac{\omega}{c} \vec{E}. \quad (4.28)$$

Además la ecuación (4.16) toma la forma

$$\left( \vec{k} \cdot \vec{k} - \frac{\omega^2}{c^2} \right) \vec{B} = 0, \quad (4.29)$$

la cual implica la relación de dispersión

$$\vec{k} \cdot \vec{k} = \frac{\omega^2}{c^2}. \quad (4.30)$$

De (4.25) podemos ver que  $\vec{k}$  es ortogonal a  $\vec{E}$ , de (4.27) podemos ver que  $\vec{k}$  es ortogonal a  $\vec{B}$ , también podemos ver de (4.26) que  $\vec{E}$  perpendicular a  $\vec{B}$ .

### 4.3 Polarización

La polarización es una propiedad de las ondas que pueden oscilar con más de una orientación. En una onda electromagnética, tanto el campo eléctrico como el campo magnético son oscilantes, pero en diferentes direcciones; ambas perpendiculares entre sí y perpendiculares a la dirección de propagación de la onda. El comportamiento con el tiempo y el espacio de los vectores  $\vec{E}$  y  $\vec{B}$ , se describe en términos de la polarización de onda. Hasta el momento, sólo hemos considerado ondas monocromaticas planas, para las cuales la magnitud de  $\vec{B}$  y  $\vec{E}$  es constante respecto a la magnitud y dirección. Este tipo de ondas se llaman linealmente polarizadas. Entonces, es recomendable introducir los vectores constantes unitarios  $\epsilon_1$  y  $\epsilon_2$  perpendiculares uno del otro en las direcciones de

$\vec{B}_0$  y  $\vec{E}_0$ . Estos vectores generan el plano normal a  $\vec{k}$ , el cual es conocido como plano de polarización. Entonces, ambas soluciones

$$\vec{E}_1(r, t) = \epsilon_1 \vec{E}_1 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}, \quad (4.31)$$

$$\vec{E}_2(r, t) = \epsilon_2 \vec{E}_2 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}. \quad (4.32)$$

cumplen la ecuación de onda.  $\vec{B}_1(r, t)$  corresponde a  $\vec{E}_1(r, t)$  y  $\vec{E}_2(r, t)$  corresponde a  $\vec{B}_2(r, t)$ . Las amplitudes de  $\vec{E}_1$  y  $\vec{E}_2$  pueden tomar valores complejos para tomar en cuenta posibles diferencias de fase entre  $E_1$  y  $E_2$ . Una solución general para una onda plana que se propaga en la dirección del vector de onda  $\vec{k}$  es la combinación lineal de las ondas parciales  $E_1$  y  $E_2$ .

$$\vec{E}(r, t) = (\epsilon_1 \vec{E}_1 + \epsilon_2 \vec{E}_2) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}. \quad (4.33)$$

Dado lo anterior: El vector del campo eléctrico es representativo del campo de polarización completo y entonces determina todas las propiedades de polarización. Si  $E_1$  y  $E_2$  tienen la misma fase entonces se le llama onda linealmente polarizada y el ángulo del vector de polarización es el siguiente:

$$\Theta = \arctan \frac{E_2}{E_1}$$

Con el vector unitario  $\epsilon_1$ . La magnitud de la amplitud de la intensidad del campo está dada por

$$E = \sqrt{E_1^2 + E_2^2}. \quad (4.34)$$

Si un cambio de fase ocurre entre  $\vec{E}_1$  y  $\vec{E}_2$  entonces se habla de una onda con polarización elíptica.

$$E(r, t) = \epsilon_1 \vec{E}_1 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} + \epsilon_2 \vec{E}_2 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t + \phi)}. \quad (4.35)$$

Un caso especial de la onda con polarización elíptica es la onda con polarización circular. En este caso  $E_1$  y  $E_2$  son de la misma magnitud y presentan una diferencia de  $\pm 2\pi$  en la fase. En ese caso la ecuación (4.33) se escribe así:

$$E(r, t) = \vec{E}_0 (\epsilon_1 \pm i\epsilon_2) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}. \quad (4.36)$$

Donde  $E_0$  es a amplitud real. Para entender esto mejor, escogemos un sistema coordenado tal que la ondda se propague en la dirección del eje  $z$ . En ete caso los vectores  $\epsilon_1$  y  $\epsilon_2$  apuntan en la dirección del eje  $x$  y el eje "y" respectivamente.

$$\begin{aligned} E_x(r, t) &= \vec{E}_0 \cos kz - \omega t = +E_0 \cos \omega t - kz \\ , E_y(r, t) &= \pm \vec{E}_0 \sin kz - \omega t = \pm E_0 \sin \omega t - kz.. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Cuando  $z = 0$  esto nos da la ecuación paramétrica de un círculo. Esto es, el vector  $\vec{E}$  tiene una magnitud constante y rota a una velocidad angular constante. Dependiendo del signo en la ecuación (4.36) se habla de polarización derecha o izquierda. En el caso de la onda de polarización elíptica las ecuaciones (4.37) quedan así:

$$E_x(r, t) = \vec{E}_{01} \cos kz - \omega t, \quad (4.38)$$

$$E_y(r, t) = \pm \vec{E}_{02} \sin kz - \omega t. E_{01} \neq E_{02}. \quad (4.39)$$

En este caso, la amplitud del vector  $\vec{E}$  ya no es constante. Esto describe una trayectoria elíptica con semiejes  $E_{01}$  y  $E_{02}$ . Los ejes  $E_{01}$  y  $E_{02}$  coinciden con la dirección de los ejes  $y$  y  $z$ .

## 4.4 Interacción materia con luz

## 4.5 Fotosíntesis

## Capítulo 5

### Principios cuánticos de la luz

## Capítulo 6

# Entrelazamiento cuántico

# Capítulo 7

## Fotosíntesis cuántica

En la sección 4.2

# Capítulo 8

## Conclusiones

....

# Referencias

- [1] J. M. Romero Sanpedro, *Funciones Especiales y Transformadas Integrales con Aplicaciones a la Mecánica Cuántica y Electrodinámica*, Primera Edición, Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Cuajimalpa, 2013.
- [2] M. E. Rosheim, *Leonardo's Lost Robots*, (Springer, New York 2006).
- [3] L. Galvani, *De viribus electricitatis in motu musculari commentarius*, (Bonon. Sci. Art, Bologna 1791).
- [4] L. Esteva, G. Gómez, J. Hernández y M. Zepeda *Matemáticas y epidemiología*, Ciencias **24**, 57-63 (1991)
- [5] J. E. Marsden, *Vector Calculus*, Sixth Edition, (W. H. Freeman and Company, New York, 2012).
- [6] W. Greiner, *Classical Electrodynamics*, (First Edition, Springer, New, York, 1991).
- [7] E. Schrödinger, *What is life*, Cambridge University Press, 1944.
- [8] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics* (John Wiley and Sons, New York, 1999).
- [9] P. Ball, *The dawn of quantum biology*, Nature **474**, 272 (2011).
- [10] N. Lambert et al, *Quantum biology*, Nature Physics **9**, 10 (2013).
- [11] G. S. Engel, *Evidence for wavelike energy transfer through quantum coherence in photosynthetic systems*, Nature **446**, 782 (2007).
- [12] E. Collini, C. Wong, K. Wilk, P. Curmi, P. Brumer and G. Scholes *Coherently wired light-harvesting in photosynthetic marine algae at ambient temperature*, Nature **463**, 644 (2010).



- [13] S. Sarkar y C. Benjamin *Emergence of Cooperation in the thermodynamic limit*, ArXiv e-prints, arXiv:1803.10083 (2018).
- [14] L. Onsager, *Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition*, *Physical Review, Series II*, 65 (3-4): 117-149 (1944).