

Libros de **Cátedra**

Mecánica cuántica para alumnos de Astronomía

Eduardo Bauer

FACULTAD DE
CIENCIAS ASTRONÓMICAS Y
GEOFÍSICAS

e
exactas


EDITORIAL DE LA UNLP



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA

Mecánica cuántica para alumnos de Astronomía

Eduardo Bauer

Facultad de Ciencias Astronómicas y Geofísicas



A Claudia y Francisco

Agradecimientos

En primer lugar, deseo expresar mi agradecimiento a los miembros de la Facultad de Ciencias Astronómicas y Geofísicas, junto aquellos de la Universidad Nacional de La Plata, del Instituto de Física La Plata y del CONICET, que trabajan para que estas instituciones sean tierra fértil donde pude desarrollar la labor materializada en este libro. Yendo ahora a aquellas personas menos numerosas, pero cuyos rostros no me resultan anónimos, deseo agradecerles a todos aquellos que leyeron los diferentes borradores del libro, quienes señalaron errores y realizaron valiosas sugerencias para mejorarlo. Entre estas personas debo nombrar a los alumnos de la asignatura, junto a Ignacio Ranea. Finalmente, deseo destacar mi agradecimiento a Fausto Bredice, Gianni Garbarino y Antonio Lallena; no solo por sus observaciones, sino también por la riqueza de sus comentarios y especialmente por su amistad.

Índice

Introducción	11
1. Mecánica ondulatoria	15
1.1. Consideraciones generales	16
1.2. Postulados de la mecánica ondulatoria	18
1.3. Sobre la ecuación de Schrödinger	20
1.3.1. Ecuación de continuidad	22
1.3.2. Ecuación estacionaria de Schrödinger	23
1.3.3. Función de onda mezcla	25
1.4. Condiciones de contorno para la función de onda	28
1.5. Paridad de la función de onda	31
1.6. Valor medio de una magnitud física	32
2. El experimento de la doble rendija	37
2.1. El experimento de la doble rendija	38
2.1.1. El experimento de la doble rendija con partículas	38
2.1.2. El experimento de la doble rendija con ondas	40
2.1.3. El experimento de la doble rendija con electrones	41
2.2. El llamado experimento del gato de Schrödinger	45
3. Sistemas cuánticos simples	47
3.1. Partícula libre	47
3.1.1. Paquete de ondas	51
3.1.2. Sobre las funciones de onda en el continuo	53
3.2. Potencial constante a trozos	55
3.3. Ejemplos de potenciales constantes a trozos	57

3.3.1.	Pozo infinito de potencial	58
3.3.2.	Potencial escalón	62
3.3.3.	Discusión adicional sobre el potencial escalón para $E < V_0$	69
3.3.4.	Barrera de potencial: el efecto túnel	74
4.	El oscilador armónico	81
4.1.	Solución de la ecuación de Schrödinger para el oscilador	82
4.2.	Análisis numérico del oscilador	85
5.	Postulados de la mecánica cuántica	97
5.1.	Postulados a tiempo fijo	99
5.1.1.	De los estados cuánticos y del principio de superposición	99
5.1.2.	De los observables	103
5.1.3.	Sobre la medida de una cantidad física	111
5.2.	Postulados dependientes del tiempo	120
5.3.	Evolución temporal	123
5.4.	Valor medio y autovalores	124
5.5.	Relaciones de incertidumbre de Heisenberg	125
5.6.	Corolarios	128
5.6.1.	Ortogonalidad de los estados cuánticos	128
5.6.2.	Demostración de la desigualdad de Schwartz	129
5.6.3.	Operadores canónicos conjugados	129
5.6.4.	Cálculo del conmutador $[\hat{X}, \hat{P}_x]$	130
5.6.5.	Teorema de Ehrenfest: evolución temporal del valor medio	130
5.6.6.	El límite clásico	132
6.	Teoría de perturbaciones independiente del tiempo	135
6.1.	Sistema no degenerado	136
6.1.1.	Primera corrección a la energía	139
6.1.2.	Primera corrección a la función de onda	140
6.1.3.	Segunda corrección a la energía	142
6.1.4.	Evaluación de $\langle n N^{(1)}\rangle$	143
6.2.	Sistema degenerado	144

6.3.	Sobre la aplicabilidad de la Teoría de Perturbaciones	147
7.	La ecuación de Schrödinger para un potencial central	151
7.1.	Potencial central	152
7.2.	La ecuación angular	155
7.3.	La ecuación radial	161
7.4.	Un caso interesante: el oscilador armónico	162
8.	Momento angular	165
8.1.	Momento angular	166
8.2.	Relaciones de conmutación para el momento angular	167
8.2.1.	Unidades	169
8.3.	El momento angular en coordenadas esféricas	170
8.4.	Nuevamente el potencial central	172
8.5.	Acción de los operadores \hat{L}_+ y \hat{L}_-	174
8.5.1.	Sobre los valores de ℓ y m	176
8.6.	Cálculo de los valores medios $\langle \hat{L}_x \rangle$ y $\langle \hat{L}_y \rangle$	177
9.	El átomo de hidrógeno	179
9.1.	El problema de dos cuerpos	180
9.2.	Un modelo simple para el átomo de hidrógeno	183
9.3.	Solución de la ecuación de Schrödinger para el pot. Coulombiano	184
9.4.	Sobre la paridad de la función de onda	188
9.5.	Análisis de los resultados	189
9.5.1.	Sobre los números cuánticos y la degeneración	190
9.5.2.	Espectros y comparación con el experimento	191
9.5.3.	Funciones de onda y $\langle r \rangle$ para el estado fundamental	192
10.	Un número cuántico nuevo: el spin	197
10.1.	Algo de electromagnetismo	199
10.1.1.	Corolarios	200
10.2.	Spin 1/2	202
10.2.1.	Matrices de Pauli	205
10.2.2.	Propiedades de las matrices de Pauli	206

10.3. Función de onda con spin	208
10.4. Interacción de una partícula con spin con el campo magnético externo	209
11. Suma de momentos angulares	211
11.1. El momento angular total	211
11.2. Spin total para dos partículas	213
11.3. Conjunto completo de operadores que conmutan	216
12. El átomo de hidrógeno más allá del potencial Coulombiano	219
12.1. Interacción fina: el acoplamiento $L \cdot S$	220
12.2. Interacción hiperfina. La línea de 21cm del hidrógeno	223
12.3. Interacciones externas al átomo	227
12.3.1. Un campo magnético externo: efecto Zeeman	227
12.3.2. Un campo eléctrico externo: efecto Stark	229
13. Teoría de perturbaciones dependiente del tiempo I	233
13.1. Sobre la ecuación de Schrödinger	234
13.2. Ansatz para resolver la ecuación de Schrödinger	235
13.3. Teoría de Perturbaciones dependiente del tiempo	236
13.3.1. Sobre la probabilidad de transición	238
13.3.2. Resumen del método	239
13.4. Algunas ejemplos y aplicaciones	240
13.4.1. Perturbación periódica en el tiempo	241
13.4.2. Perturbación constante que se enciende en $t = 0$	246
13.5. Degeneración de niveles y transiciones al continuo	247
13.5.1. Niveles degenerados	248
13.5.2. Comentario sobre la medida de una transición	249
13.5.3. Transiciones al continuo	250
13.5.4. Sobre la densidad de estados $\rho(E)$	252
13.6. La Regla de Oro de Fermi	253
14. Teoría de perturbaciones dependiente del tiempo II	257
14.1. Formulación alternativa	258
14.2. Anchos de decaimiento y vida media	261

14.3. Sobre la llamada relación de incertidumbre tiempo–energía	264
14.4. Sección eficaz de dispersión: la aproximación de Born	265
14.5. Reseña del método	268
15. Entrelazamiento cuántico e información cuántica	271
15.1. El problema de muchos cuerpos	272
15.1.1. Simetría en la función de onda total	274
15.1.2. El principio de exclusión de Pauli	276
15.2. Entrelazamiento cuántico	277
15.2.1. Discusión del entrelazamiento cuántico - La paradoja EPR . . .	279
15.2.2. Noción de sistema cuántico	280
15.3. Elementos de información cuántica	282
15.3.1. Qubit y estados de Bell	283
15.3.2. Notación para dos o más qubits	285
15.3.3. Puertas cuánticas	285
15.3.4. Teletransportación cuántica	288
15.3.5. Computación cuántica	293
Comentario final	297
Bibliografía	299
El autor	301

Introducción

En algún lugar de La Mancha, cuyo nombre prefiero no recordar, debe existir un alumno preguntándose con qué libro de Mecánica Cuántica estudiar. La dificultad que enfrenta este estudiante para elegir un libro como guía para estudiar esta área del conocimiento, estriba en que existen muchos libros de Mecánica Cuántica y la mayoría de ellos son obras de muy buena calidad. Al escribir “Mecánica Cuántica” me refiero al primer curso de esta asignatura. A veces, se habla de “Introducción a la Mecánica Cuántica” o “Mecánica Cuántica no relativista”. En cualquier caso, no tengo dudas de que existen muy pocas áreas del conocimiento que reúna tantos libros de muy buena calidad. Muchos de ellos fueron escritos por personas que ganaron el Premio Nobel (en este caso de Física). Algunos de estos autores son (entre paréntesis escribo el año en que ganaron el Premio Nobel): Werner Heisenberg (1932), Paul Dirac (1933), Enrico Fermi (1938), Max Born (1954), Lev Landau (1962), Richard Feynman (1965) y Claude Cohen–Tannoudji (1997). Esta lista no pretende ser completa. Seguramente existe algún otro ganador del Premio Nobel que escribió un libro sobre el tema. Nombro a este conjunto pues son aquellos que he leído.

Sobre todas estas obras, deseo destacar las de Landau, Feynman y Cohen–Tannoudji. Son muy diferentes y cada una es de interés en sí misma. Siempre recuerdo un pasaje del libro Fahrenheit 451 de Ray Bradbury. En ese pasaje, el autor decía que un buen libro tiene “poros”. Voy a hacer una interpretación libre de ese pasaje de Fahrenheit 451. La profundidad en la lectura de un libro depende de muchos factores. Quizá el primero es el interés que despierta el libro en cada lector. Cuando uno tiene ante sí un libro auténticamente bueno, los conocimientos que extraemos de ese libro dependen de la sagacidad, formación y conocimientos del lector. Cualquier libro admite una lectura superficial, lisa, sin prestar atención a si tiene poros o no. Aquel libro con “poros”

admite sumergirse en el mismo y descubrir elementos nuevos en cada lectura. Cuán profundamente puede uno sumergirse en los poros, cada vez más delgados, depende del lector. Aquel libro sin poros, admite una sola lectura lisa y llana. Sobre los tres libros listados al comienzo de este párrafo, admiten ser usados como libros de texto como primera lectura para adquirir las herramientas básicas de la Mecánica Cuántica. Pero son libros de una riqueza increíble. Su lectura, partiendo del conocimiento del tema, permite sumergirse en el modo en que personas geniales piensan los problemas. De ellos, no solo aprendemos Mecánica Cuántica, sino que aprendemos a pensar los problemas.

Otro grupo importante de libros lo forman aquellos que resultan de la experiencia de impartir cursos de Mecánica Cuántica. Existen infinidad de ellos. A lo largo de este libro, cito varios y la mayoría son muy buenos. En general, me permito sugerir estos libros antes que los de los Premios Nobel como primera lectura, ya que este grupo de libros son más pedagógicos y eso favorece la adquisición de las herramientas básicas del tema. En este grupo intento que se inscriba el presente libro. Es verdad que en sentido estricto y hasta donde yo sé, todos los libros del tema, incluidos los de los Premio Nobel, resultaron del dictado de un curso. Hago la diferencia entre estos dos grupos por elementos algo más sutiles. El primero es que es que algunos de los temas comunes a todos los libros, fueron hechos por estos Premios Nobel. El segundo es que ciertas personas de una notable genialidad conciben un curso y lo dan pensando prioritariamente en su contenido, mientras que otros libros resultan de años de prueba y error sobre qué temas dar, en qué orden y de qué forma.

Quizá, quien haya llegado a este punto en la lectura, se pregunte por qué escribo sobre libros en lugar de introducir la Mecánica Cuántica. La razón de esto, la encontramos en la frase de partida: nuestro alumno de La Mancha, que desea elegir un libro de Mecánica Cuántica. Dado que existen muchos libros del tema y muy buenos, me veo en la obligación de explicar por qué vale la pena escribir otro más. La respuesta es simple: cada docente tiene un enfoque personal de la asignatura y para el alumno el contar con un libro a medida del curso es de gran ayuda.

Dicho esto, creo que quien lee la Introducción de un libro de Mecánica Cuántica desea tener alguna pista de qué es la Mecánica Cuántica. Enseguida explicaré por qué la mejor respuesta a esa pregunta supone leer este libro o algún otro sobre el tema. Desarrollamos nuestros pensamientos, nuestras ideas, la visión que tenemos de la realidad, en base a

nuestra experiencia. El lenguaje se construye sobre la base de la experiencia. Luego, desarrollamos conceptos abstractos llevados por un proceso que obviamente denominamos “proceso de abstracción”. Un ejemplo simple de esto es dibujar un punto (lo podemos hacer: “ . ”), y preguntar qué dibujamos. Aún intuyendo que se trata de una trampa, todas las personas van a responder que dibujamos un punto. Sin embargo, lo que en realidad dibujamos es una pequeña mancha sobre el papel. Matemáticamente un punto no tiene superficie, mientras que una mancha sí. Afirmamos que se trata de un punto, pues a partir de una pequeña mancha imaginamos manchas cada vez más pequeñas y en el límite de superficie cero, tenemos nuestro punto.

De este modo, aún detrás de conceptos abstractos encontramos algo asociado con la experiencia. Y este es el punto de partida de cualquier libro de Mecánica Cuántica: el mundo mecánico cuántico se comporta de forma diferente al mundo de nuestras experiencias. Esto es brutal. Durante toda la Historia de la Humanidad, fuimos acumulando información y experiencia sobre nuestra realidad y de pronto encontramos que existe otro plano de la realidad misma, donde las cosas funcionan de un modo diferente. Donde no tenemos palabras para describir esa realidad; pues como dijimos, el lenguaje se basa en la experiencia. Este nuevo plano de la realidad tiene que ver en cómo ocurren las cosas en la escala de lo muy pequeño, en la escala atómica para fijar ideas. Este es uno de los primeros puntos que analizaremos en este trabajo.

Uno de los Premios Nobel citados, Richard Feynman, dijo una vez: “nadie entiende realmente la Mecánica Cuántica”. No se trata de una expresión de desdén. Para entender su significado se debe explicar el marco en el que la dijo. Feynman leyó un artículo periodístico que afirmaba que existían en el Mundo unos pocos cientos de personas que entendían la Teoría General de la Relatividad. Entender la Teoría General de la Relatividad significa entender un conjunto muy complejo de ecuaciones y cualquier persona con capacidad para entender ecuaciones complejas, si se lo propone, es capaz de entender la Teoría General de la Relatividad. No ocurre lo mismo con la Mecánica Cuántica. Por ejemplo, al medir ciertos estados cuánticos podemos obtener diferentes valores para la misma magnitud física, con diferentes probabilidades. Existe un azar intrínseco en la Mecánica Cuántica. El escepticismo sobre este hecho, fue lo que hizo que Albert Einstein afirmaba que “Dios no juega a los dados”. De este modo, si medimos un sistema cuántico una vez, no sabemos a priori qué valor obtendremos. No entendemos por qué

esto funciona así, pero es lo que nos dice el experimento. Durante muchos años se discutió si esto es una limitación de la teoría cuántica o si es una propiedad intrínseca de la Naturaleza. Especialmente debido a los trabajos de John S. Bell, sabemos hoy que se trata de una propiedad intrínseca de la Naturaleza. De acuerdo, alguien puede estar pensando ahora: "quizá en el futuro lo entiendan". Al no conocer el tema, es un punto de vista válido. Sin embargo, hoy ya no afirmamos no entenderlo a secas. Hoy afirmamos que sí entendemos que no se puede entender. No es lo mismo la ignorancia, que la certeza de que la ignorancia es la realidad misma.

De estas líneas se infiere que el desarrollo de la teoría cuántica supuso un desafío enorme, ya que se debió construir un modelo de la realidad sobre una realidad que no entendemos, pero cuyos efectos podemos medir. Se construyó la teoría para dar cuenta de los experimentos, con esta teoría se hicieron y se hacen predicciones sobre magnitudes aún no medidas y cuando se hace finalmente la medida de estas magnitudes y éstas coinciden con la predicción teórica, adquirimos cierta confianza en la teoría. Sin dudas, la Mecánica Cuántica es uno de los logros más destacados del pensamiento humano.

Para terminar, volvamos a nuestro estudiante de La Mancha. Es pertinente inferir por qué esta persona desea estudiar Mecánica Cuántica. Probablemente se trate de una de las asignaturas de su plan de estudios, ya que se estableció que se trata de un alumno. Pero si además esta persona desea explorar los fenómenos cuánticos solo por curiosidad, por el desafío de aprender algo que en verdad no es simple, debemos sentirnos satisfechos. Ese es el motor del progreso del conocimiento. Solo se puede saber qué es la Mecánica Cuántica estudiándola; y para ayudar a ello fue escrito este libro.

CAPÍTULO 1

Mecánica ondulatoria

Introducción

Cuando se habla de Mecánica Cuántica, en realidad se describe una de las posibles interpretaciones del formalismo de los fenómenos cuánticos. De hecho, el término “Mecánica Cuántica” a secas, es la llamada “interpretación de Copenhague”. Existen otros esquemas, como el de integrales de camino de Feynman y la interpretación de Bohm. En este capítulo, describiremos la llamada Mecánica Ondulatoria, que es una manera de describir los fenómenos cuánticos en forma más accesible que las otras interpretaciones.

Discutimos la Mecánica Ondulatoria por varios motivos. El principal, es porque es el esquema más rápido para poder comenzar a hacer cálculos. Las herramientas para comenzar a calcular dentro de la Mecánica Ondulatoria son más simples, menos abstractas, que las de la Mecánica Cuántica en sí. De todos modos, para llevar a la práctica muchos cálculos de la Mecánica Cuántica, primero los expresamos en términos de la Mecánica Ondulatoria. Luego, aún si desde el comienzo discutiéramos la Mecánica Cuántica según la interpretación de Copenhague, en algún punto deberíamos mostrar las técnicas de cálculo de la Mecánica Ondulatoria.

En este capítulo, discutiremos en primer lugar los postulados de la Mecánica Ondulatoria y luego veremos varias aplicaciones de estos postulados.

1.1. Consideraciones generales

Al estudiar Mecánica Cuántica, veremos que el esquema que desarrollaremos se aplica no solo a problemas mecánicos. El cálculo de la longitud de onda de la radiación electromagnética emitida por un átomo, no es un problema mecánico y sin embargo lo estudiamos empleando mecánica cuántica. Pocos autores hablan de “Teoría Cuántica” u otras denominaciones. Sin embargo, el término “Mecánica Cuántica” se impuso por el uso y lo aceptaremos como tal.

Cuándo emplear Mecánica Cuántica

Comenzaremos sin embargo y como es de esperar, por los problemas puramente mecánicos. El problema general de la mecánica de una partícula es predecir su trayectoria en función del tiempo, conociendo la posición y la velocidad inicial. Esto es, el estado mecánico de una partícula está completamente definido si conocemos $\mathbf{r}(t=0)$ y $\dot{\mathbf{r}}(t=0)$. Con esta información, podemos conocer la trayectoria, esto es, $\mathbf{r}(t)$ empleando las leyes de Newton. Alternativamente, si empleamos la mecánica Lagrangiana, y queremos saber la trayectoria entre el punto A y el punto B , debemos calcular el valor de la acción \mathcal{S}_{AB} , entre esos puntos:

$$\mathcal{S}_{AB} = \int_A^B dt \mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t), \quad (1.1)$$

donde $\mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t)$, es el Lagrangiano del problema. Recordemos que esta es una integral de línea y aquella trayectoria que minimiza la acción, es la trayectoria física. El Lagrangiano tiene unidades de energía, por lo tanto la acción tiene unidades de energía \times tiempo.

Si bien no es nuestro objetivo el hacer historia de la física, sabemos que al comienzo del siglo XX fueron desarrolladas dos teorías de profundo impacto en la ciencia. Estas teorías fueron la Teoría de la Relatividad y la Mecánica Cuántica. Asociamos la Teoría de la Relatividad con la velocidad de la luz, c . También sabemos que si tenemos una expresión relativista, podemos encontrar el límite no-relativista cuando la velocidad puesta en juego es mucho menor que la velocidad de la luz. Operativamente, es práctico encontrar ese límite haciendo $c \rightarrow \infty$. Hagamos un paralelismo entre la Teoría de la Relatividad y la Mecánica Cuántica. La cantidad análoga a la velocidad de la luz en Mecánica Cuántica

es la constante de Planck, h , cuyo valor es,

$$h = 6,6260664 \times 10^{-34} \text{ J} \times \text{s} \quad (1.2)$$

Es común emplear la constante de Planck dividida por 2π , que se designa con el símbolo \hbar ($= h/(2\pi)$) y se lee “h barra”).

Notemos que la constante de Planck tiene unidades de energía \times tiempo, al igual que la acción en mecánica y además, en términos de acción su valor es extremadamente pequeño en comparación con los problemas mecánicos a los que estamos acostumbrados. No se trata de una afirmación rigurosa, pero como criterio de trabajo, se puede decir que cuando el valor de la acción de un problema mecánico es comparable a la constante de Planck, entonces los efectos cuánticos son importantes. Mientras que en relatividad tomábamos el límite $c \rightarrow \infty$, en cuántica deberemos tomar el límite $\hbar \rightarrow 0$, en cuyo caso la acción es siempre “grande”, comparada con la constante de Planck.

De este modo, cuando la acción de un problema mecánico toma un valor comparable al de la constante de Planck, debemos trabajar en términos cuánticos. A diferencia de la Teoría de la Relatividad, no siempre es simple obtener el límite clásico de un problema cuántico, ya que ciertos elementos (como el spin), simplemente no tienen un límite clásico. Para las cantidades que sí tienen un límite clásico, rige el llamado *Principio de Correspondencia*, que en términos simples establece que no puede haber conflicto entre el resultado clásico y el cuántico.

Sobre la trayectoria en Mecánica Cuántica

Antes de seguir adelante, indiquemos un elemento algo sutil. En el curso de Física Moderna se vio el llamado Principio de Indeterminación de Heisenberg. Este principio afirma que la incertidumbre, en la medida de la posición y de la cantidad de movimiento, están relacionadas según la expresión,

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.3)$$

Esta expresión es en una dimensión, en general, vale,

$$\Delta q_i \Delta p_j \geq \delta_{q_i, p_j} \frac{\hbar}{2}, \quad \text{con } q_i, p_j = x, y, z. \quad (1.4)$$

Es común leer a partir de estas expresiones que en Mecánica Cuántica “no existe la trayectoria”. Esa afirmación es algo extrema. Es verdad que no se puede obtener una expresión de la forma $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$. Pero sí se puede pensar en una familia infinita de trayectorias dentro de una cierta región. Para ser claros, si dibujamos la trayectoria de una partícula, la línea sobre el papel tiene un cierto grosor. La trayectoria en ese caso resulta del proceso de abstracción en donde la línea tiene cada vez un menor grosor hasta desaparecer. Cuánticamente, la línea tiene un cierto grosor que no puede desaparecer. En cada instante podemos dar la posición y la cantidad de movimiento con una cierta incertidumbre, esto es, $\mathbf{r} \pm \Delta\mathbf{r}$ y $\mathbf{p} \pm \Delta\mathbf{p}$. No podemos escribir una función $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$, pero sí podemos dar el valor medio, $\langle \mathbf{r} \rangle = \langle \mathbf{r}(t) \rangle$.

Con respecto a la trayectoria, el punto relevante que diferencia el comportamiento clásico del cuántico, es que en el caso cuántico existe siempre una incertidumbre en los valores de la cantidad de movimiento y la posición. Para fijar ideas, concentrémonos en la posición. Al dar $\mathbf{r} \pm \Delta\mathbf{r}$, la pregunta relevante es cómo se compara $\Delta\mathbf{r}$ respecto de la región del espacio en que miro la trayectoria. Para una trayectoria macroscópica, donde el grosor de la línea que marca la trayectoria es de hecho más gruesa que la incertidumbre, podemos hablar de trayectoria sin más. Pero si nos vamos a una escala atómica, donde $\Delta\mathbf{r}$ es comparable con las dimensiones del espacio en donde se mueve la partícula, entonces definitivamente no podemos hablar de trayectoria. Nuevamente, las ecs. (1.3) y (1.4), nos dicen que esa escala está relacionada con la constante de Planck.

1.2. Postulados de la mecánica ondulatoria

La llamada Mecánica Ondulatoria es quizá el modelo cuántico más sencillo y es por ello que comenzamos por él. Cuando un modelo simple es exitoso, es porque describe correctamente un conjunto de fenómenos. La existencia de modelos más complejos, advierte la existencia de limitaciones: si existe un modelo simple que describe correctamente todos los fenómenos, dejaríamos de lado los que son más complejos.

Presentamos ahora los postulados de este modelo. Un postulado es una afirmación que se acepta sin demostración y es válida en tanto no se encuentre algún hecho experimental que lo contradiga.

Primer Postulado: En un instante dado, el estado de una partícula está caracterizado por una función $\psi(\mathbf{r}, t)$, compleja, llamada función de onda.

Por “estado” entendemos toda la información física que caracteriza a una partícula. También podemos hablar de “estado cuántico” ya que nos referimos al estado de una partícula desde el punto de vista de la Mecánica Cuántica. Más abajo caracterizaremos mejor el estado cuántico por contraste con el caso clásico.

Segundo Postulado: La probabilidad dP de que en el instante t , la partícula con función de onda $\psi(\mathbf{r}, t)$, se encuentre localizada en un elemento de volumen dV centrado en el punto \mathbf{r} , es,

$$dP = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = \psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)dV.$$

Tercer Postulado: La evolución temporal del estado cuántico de una partícula de masa m , está regida por la llamada ecuación de Schrödinger para $\psi(\mathbf{r}, t)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}.$$

En esta expresión, la función $V(\mathbf{r})$ es la energía potencial de nuestro problema. Al escribir la energía potencial como una función solo de la posición, estamos suponiendo que tenemos un sistema cerrado. Eventualmente, la energía potencial puede depender del tiempo. Esa situación no la analizaremos sino hasta los capítulos finales. Por otra parte, recordemos que en coordenadas cartesianas el operador laplaciano está dado por,

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

Existe un principio fuerte en Mecánica Cuántica, que básicamente afirma que sólo podemos conocer las cantidades que pueden ser medidas experimentalmente. Las cantidades que pueden ser medidas experimentalmente, las llamamos “observables”. La función de onda $\psi(\mathbf{r}, t)$, no es un observable. Sí podemos medir la probabilidad de encontrar la partícula en algún punto, $dP = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV$. Como el módulo al cuadrado de la función de onda sí lo podemos observar, entonces nos damos cuenta de cierta indeterminación en la función de onda: puede ser multiplicada por una fase arbitraria, pues no altera su módulo:

$$\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow e^{i\theta}\psi(\mathbf{r}, t),$$

donde θ es una constante real. Toda la información que podemos conocer de una partícula cuántica está contenida en la función de onda. En Mecánica Clásica el estado mecánico de

una partícula está determinado por la posición y la velocidad (o cantidad de movimiento), inicial de la partícula: $\mathbf{r}(t=0)$ y $\mathbf{p}(t=0)$. De esta manera, el estado mecánico de una partícula en mecánica clásica está determinado por seis números. Pero en mecánica cuántica, necesitamos de una función (la función de onda $\psi(\mathbf{r}, t)$), esto es, de infinitos números.

¿Qué es la función de onda? El segundo postulado nos permite interpretarla. Vemos que el módulo al cuadrado de la función de onda, multiplicado por un diferencial de volumen, nos da un diferencial de probabilidad. De este modo, la función de onda representa la *amplitud de probabilidad de encontrar una partícula en el entorno de un punto dado, en un cierto instante*. El módulo al cuadrado de la función de onda es entonces la densidad de probabilidad. Ya que la probabilidad es adimensional, entonces la función de onda tiene unidades de:

$$[\psi(\mathbf{r}, t)] = \frac{1}{\sqrt{\text{volumen}}}.$$

Siguiendo con el segundo postulado, sabemos que la probabilidad de que en un instante la partícula con función de onda $\psi(\mathbf{r}, t)$, se encuentre localizada en un elemento de volumen dV centrado en el punto \mathbf{r} , es,

$$dP = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = \psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)dV.$$

Si integro esta expresión en todo el espacio, la probabilidad de encontrar a la partícula en algún lugar de todo el espacio debe ser uno, estos es,

$$\int_{R^3} dP = 1 = \int_{R^3} dV |\psi(\mathbf{r}, t)|^2.$$

Esto restringe el universo de funciones que representan estados físicos, a aquellas funciones *de cuadrado integrables*. Esto constituye un corolario de la interpretación de la función de onda como una amplitud de probabilidad.

1.3. Sobre la ecuación de Schrödinger

El tercer postulado, es la ecuación de Schrödinger,

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}} \quad (1.5)$$

Se trata de un postulado, por lo tanto no lo podemos demostrar. Sin embargo, podemos dar una justificación del mismo. Para ello, estableceremos las llamadas *transformaciones canónicas*. Estas transformaciones vinculan magnitudes de la mecánica clásica, con la mecánica cuántica. Son demostrables, pero en este punto solamente las exponemos sin demostración. En mecánica cuántica, la información está contenida en la función de onda y ciertas cantidades medibles (posición, cantidad de movimiento, energía), las describimos como operadores que actúan sobre la función de onda. Damos ahora una tabla con las transformaciones que nos interesan en este momento:

$$\begin{array}{l}
 \text{Mecánica Clásica} \quad \rightarrow \quad \text{Mecánica Cuántica} \\
 \mathbf{r} \quad \rightarrow \quad \mathbf{r}, \\
 V(\mathbf{r}) \quad \rightarrow \quad V(\mathbf{r}), \\
 \mathbf{p} \quad \rightarrow \quad \frac{\hbar}{i} \nabla, \\
 E \quad \rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t},
 \end{array} \tag{1.6}$$

donde \mathbf{r} , $V(\mathbf{r})$, \mathbf{p} y E representan posición, energía potencial, cantidad de movimiento y energía, respectivamente.

En mecánica clásica, la energía mecánica total, es la suma de la energía cinética, más la energía potencial:

$$\frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = E_T,$$

si ahora empleamos las transformaciones canónicas, tenemos,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \tag{1.7}$$

Al actuar con estos operadores sobre la función de onda $\psi(\mathbf{r}, t)$, obtenemos la ecuación de Schrödinger. Esto no demuestra la ecuación de Schrödinger, sino que solamente ofrece una justificación de su expresión: podemos escribir el operador de la ec. (1.7), pero el que deba actuar sobre una función $\psi(\mathbf{r}, t)$, debe ser postulado.

Al operador de la izquierda de la ec. (1.7), lo llamaremos operador Hamiltoniano y lo denotaremos por medio de $\hat{\mathcal{H}}$:

$$\hat{\mathcal{H}} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}). \tag{1.8}$$

Podemos reescribir la ecuación de Schrödinger en forma más compacta empleando el operador Hamiltoniano como,

$$\hat{\mathcal{H}}\psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}. \quad (1.9)$$

Es conveniente repetir que estamos considerando el caso particular de energías potenciales que no dependen del tiempo.

1.3.1. Ecuación de continuidad

Dada la ecuación de Schrödinger, lo que diferencia a un problema físico de otro, es el potencial $V(\mathbf{r})$ que proponemos y las condiciones de contorno. Mostraremos ahora una propiedad de la función de onda que es independiente del potencial. Vamos a considerar un potencial real y escribimos la ecuación de Schrödinger, junto con el complejo conjugado de la misma ecuación,

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t) &= i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r}, t) &= -i\hbar \frac{\partial \psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t}. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Multiplicamos la primera ecuación por $\psi^*(\mathbf{r}, t)$ por la izquierda y la segunda por $\psi(\mathbf{r}, t)$ por la derecha:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) &= i\hbar \psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) &= -i\hbar \frac{\partial \psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t). \end{aligned}$$

Ahora, a la primera ecuación le restamos la segunda. Notemos que al hacerlo, el término que contiene el potencial se cancela,

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) - \nabla^2 \psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) \right) &= \\ = i\hbar \left(\psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) \right). \end{aligned} \quad (1.11)$$

Esta expresión puede ser reescrita como,

$$-\frac{\hbar}{2mi} \nabla \left(\psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) - \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) \right) = \frac{\partial (\psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t))}{\partial t}. \quad (1.12)$$

Definimos ahora,

$$\rho(\mathbf{r}, t) \equiv \psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t), \quad (1.13)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{\hbar}{2mi} [\psi^*(\mathbf{r}, t)\nabla\psi(\mathbf{r}, t) - \nabla\psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)], \quad (1.14)$$

donde $\rho(\mathbf{r}, t)$ es la densidad de probabilidades y $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ es el flujo de probabilidades. A partir de estas definiciones, la ec. (1.12), se puede reescribir como,

$$\boxed{\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0} \quad (1.15)$$

Esta ecuación se denomina Ecuación de Continuidad y representa la conservación de la probabilidad.

1.3.2. Ecuación estacionaria de Schrödinger

Nuevamente, escribamos la ecuación de Schrödinger,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}.$$

Proponemos una solución de la forma de una función producto del espacio y del tiempo:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r})T(t), \quad (1.16)$$

y reemplazamos esta expresión en la ecuación de Schrödinger,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla^2\phi(\mathbf{r}))T(t) + V(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})T(t) = i\hbar\phi(\mathbf{r})\left(\frac{\partial T(t)}{\partial t}\right), \quad (1.17)$$

ahora dividimos ambos términos por $\phi(\mathbf{r})T(t)$,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2\phi(\mathbf{r})}{\phi(\mathbf{r})} + V(\mathbf{r}) = i\hbar\frac{1}{T(t)}\frac{\partial T(t)}{\partial t}. \quad (1.18)$$

Ahora bien, la expresión de la izquierda es una función solo de la posición, mientras que la de la derecha lo es del tiempo. Las cantidades \mathbf{r} y t , son variables independientes. De este modo, para que se satisfaga la igualdad, ambas expresiones deben ser igual a una constante. Por inspección, la constante debe tener las mismas unidades que $V(\mathbf{r})$,

que tiene unidades de energía; debido a ello empleamos la letra E , para indicar dicha constante:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 \phi(\mathbf{r})}{\phi(\mathbf{r})} + V(\mathbf{r}) = i\hbar \frac{1}{T(t)} \frac{\partial T(t)}{\partial t} = E. \quad (1.19)$$

Obtuvimos entonces, dos ecuaciones diferenciales, una en el espacio y la otra en el tiempo,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) = E \phi(\mathbf{r}), \quad (1.20)$$

$$i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = E T(t). \quad (1.21)$$

En estas dos ecuaciones, solo en la ec. (1.20), aparece el potencial $V(\mathbf{r})$. Para cada problema debemos proponer un potencial. Pero en la ec. (1.21), no aparece el potencial y por lo tanto, podemos resolver la ecuación. Para ello, en primer lugar la reescribimos de la siguiente manera,

$$\frac{dT(t)}{T(t)} = -\frac{i}{\hbar} E dt. \quad (1.22)$$

Esta ecuación es fácilmente integrable. Obtenemos,

$$T(t) = T(t=0) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}. \quad (1.23)$$

La función de onda, resulta entonces,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}, \quad (1.24)$$

donde esta función debe estar normalizada. Ya que la función exponencial a la derecha de esta expresión, tiene módulo uno; para normalizar la función de onda debemos trabajar sobre la función $\phi(\mathbf{r})$. Ya que $T(t=0)$ es una constante, podemos pensar que esa constante fue absorbida en la normalización, sin pérdida de generalidad. Recordemos que la función $\phi(\mathbf{r})$, se obtiene como solución de la llamada *ecuación estacionaria de Schrödinger*, dada por,

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) = E \phi(\mathbf{r})} \quad (1.25)$$

Notemos que esta ecuación la podemos escribir de un modo interesante empleando al Hamiltoniano, como,

$$\hat{\mathcal{H}}\phi(\mathbf{r}) = E \phi(\mathbf{r}), \quad (1.26)$$

donde lo que tenemos aquí, es un operador (el operador Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$), actuando sobre la función de onda $\phi(\mathbf{r})$, igualado a la constante E , por la misma función de onda. Esta es una ecuación de autovalores y autovectores.

1.3.3. Función de onda mezcla

Analicemos con un poco de detenimiento la expresión (1.26):

$$\hat{\mathcal{H}}\phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r}),$$

esta ecuación tiene el aspecto de una ecuación de autovalores y autovectores; pues un operador actuando sobre una función, está igualado a una constante por la misma función. La primera pregunta que nos debemos formular, es cuántos autovalores y autovectores diferentes admite esta ecuación. Al mirar la expresión del Hamiltoniano en (1.8),

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}),$$

y teniendo en cuenta que la variable \mathbf{r} , es una variable continua, nos inclinaríamos a responder que debemos tener infinitos autovalores y autovectores, barriendo un conjunto continuo de valores. Sin embargo, las condiciones de contorno, *junto con la exigencia de que las funciones de onda sean de cuadrado integrable*, determina que en muchos problemas el conjunto de autovalores y autovectores diferentes sea discreto (en un número finito o infinito). Veremos ejemplos de esto, pero nos adelantamos para decir que en aquellos problemas en que la partícula está ligada, esto es, cuando está restringida a una región finita del espacio, entonces el espectro es discreto. El electrón de un átomo de hidrógeno, es quizá el ejemplo más representativo. Si tenemos un espectro discreto, podemos escribir,

$$\hat{\mathcal{H}}\phi_n(\mathbf{r}) = E_n\phi_n(\mathbf{r}), \quad (1.27)$$

donde n , es una variable discreta. En síntesis, tenemos un operador que denominamos Hamiltoniano, cuyo autovalor es la energía y cuyas autofunciones son las funciones de onda. Notemos que en la ec. (1.27), podemos reemplazar $\phi_n(\mathbf{r})$ por $\psi_n(\mathbf{r}, t)$, sin alterar la igualdad; donde la función de onda resulta,

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = \phi_n(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}. \quad (1.28)$$

A esta función de onda, la denominamos como un “estado puro”, pues tiene la energía definida en E_n . Para un estado puro la incertidumbre en la energía es cero. Puede ocurrir, que para más de un $\phi_n(\mathbf{r})$, tengamos el mismo valor de la energía. En ese caso, hablamos de estados “degenerados”. El orden de la degeneración, es el número de diferentes estados con la misma energía. El orden de la degeneración puede ser finito o infinito, discreto o continuo¹. Para fijar ideas, en lo que sigue consideremos estados no degenerados; lo cual significa para para cada energía existe una única función $\phi_n(\mathbf{r})$. Consideremos además, que n va de 1 a un valor N (eventualmente, $N \rightarrow \infty$).

Dado un problema físico particular, tenemos entonces un conjunto de N estados puros. Cuando se escribe “un problema físico particular”, lo que se señala es un Hamiltoniano y ciertas condiciones de contorno. Este conjunto de N estados puros constituyen *una base de autofunciones de nuestro problema*. Esta es una idea algo abstracta que iremos desarrollando a lo largo de los próximos capítulos. Sin dar ahora una fundamentación fuerte, debemos pensar que cada problema físico particular admite un conjunto de autofunciones, tales que cualquier función de onda correspondiente a dicho problema en un instante dado, puede escribirse como una combinación lineal de dichas autofunciones. Para que se entienda la idea, esto es análogo a que cualquier vector del espacio de tres dimensiones, R^3 , se puede construir como una combinación lineal de los versores \hat{i} , \hat{j} y \hat{k} . Al igual que en este ejemplo, el conjunto de autofunciones no es único.

Recordemos que hemos postulado la normalización de las funciones de onda. Además, los estados puros cumplen con,

$$\int_{R^3} dV \psi_i^*(\mathbf{r}, t) \psi_j(\mathbf{r}, t) = \delta_{i,j}. \quad (1.29)$$

Esto es, si $i = j$, la integral es uno, que es la normalización de la función de onda ya discutida. Si $i \neq j$, la integral es cero, lo cual se interpreta como la ortogonalidad de las funciones de onda. Ambas propiedades contenidas en la ec. (1.29), se denominan *ortonormalización* de la función de onda. La propiedad de ortogonalidad deberemos aceptarla hasta su demostración en la Subsección 5.6.1. Notemos, además, que esta expresión implica que,

$$\int_{R^3} dV \psi_i^*(\mathbf{r}, t) \psi_j(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_j - E_i)t} \int_{R^3} dV \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}) = \delta_{i,j}, \quad (1.30)$$

¹Recién en el Capítulo 3, analizaremos la partícula libre; que es un caso de degeneración continua. La degeneración continua implica una degeneración infinita.

ya que la integral se hace sobre la variable espacial. Si $i = j$ el exponencial de energía se hace uno, mientras que si $i \neq j$, los exponenciales quedan multiplicados por cero. Podemos escribir entonces,

$$\int_{R^3} dV \phi_i^*(\mathbf{r})\phi_j(\mathbf{r}) = \delta_{i,j}. \quad (1.31)$$

La ecuación de Schrödinger es lineal y homogénea, por lo cual la suma de cualquier número de soluciones (como las autofunciones) es también una solución. Podemos formar una combinación lineal de autofunciones de la siguiente manera,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N c_i \phi_i(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t}, \quad (1.32)$$

donde los factores c_i representan al peso relativo de cada componente de la función de onda y como veremos enseguida, sus valores están restringidos por la condición de normalización. Si al menos dos de los factores c_i son no nulos, decimos que tenemos una “función de onda mezcla”.

Analicemos ahora la normalización de la función de onda mezcla, para lo cual pedimos que,

$$\int_{R^3} dV \psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) = 1, \quad (1.33)$$

reemplazando ahora la expresión de la función de onda dada por la ec. (1.32), en el integrando, tenemos,

$$\int_{R^3} dV \left(\sum_{i=1}^N c_i^* \phi_i^*(\mathbf{r}) e^{\frac{i}{\hbar} E_i t} \right) \left(\sum_{j=1}^N c_j \phi_j(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} \right) = 1, \quad (1.34)$$

que podemos reescribir como,

$$\sum_{i,j=1}^N c_i^* c_j e^{\frac{i}{\hbar} (E_i - E_j) t} \int_{R^3} dV \phi_i^*(\mathbf{r})\phi_j(\mathbf{r}) = 1. \quad (1.35)$$

Empleamos ahora la relación de ortonormalización dada por la ec. (1.30), con lo cual $i = j$ y obtenemos finalmente,

$$\sum_{i=1}^N |c_i|^2 = 1. \quad (1.36)$$

Notemos que si existe un único c_i no nulo, entonces estamos ante un estado puro. Si existen al menos dos factores c_i no nulos, entonces necesariamente tenemos que $|c_i| < 1$ (menor estricto).

Antes de terminar con esta sección, notemos que cuando en la ec. (1.16), propusimos que la función de onda fuera una función separable de la posición y del tiempo, lo hicimos sin ninguna justificación. No es el objetivo de este trabajo el discutir los fundamentos de la Mecánica Cuántica, sino su empleo. Aún así, el haber propuesto la función de onda como de variables separables se inspira en que las funciones de onda forman un espacio vectorial cerrado y completo². Finalmente llegamos a la función de onda mezcla dada por la ec. (1.32), que resulta *no ser separable*. Solo lo es para estados puros. La solución más general de la ecuación de Schrödinger no es separable, lo cual nos aleja del temor a habernos restringido a un subconjunto de soluciones del problema.

1.4. Condiciones de contorno para la función de onda

En esta sección mostraremos que la función de onda es continua en todo el espacio y en particular, en un punto en donde el potencial es discontinuo. Mostraremos también que la derivada primera de la función de onda respecto de la posición es continua en todo el espacio y en particular, en un punto en el que el potencial es discontinuo en tanto la discontinuidad del potencial sea finita. Además, la función de onda y su derivada deben ser finitas. Demostraremos estas propiedades empleando la parte espacial de la función de onda ya que la inclusión de la parte temporal es inmediata de la ec. (1.32). Por simplicidad, trabajaremos en una dimensión: $\phi(\mathbf{r}) \rightarrow \varphi(x)$. Resumamos los puntos que vamos a demostrar:

- 1a. la función de onda $\varphi(x)$ debe ser finita.
- 1b. la derivada de la función de onda $d\varphi(x)/dx$, debe ser finita.
- 2a. la función de onda $\varphi(x)$ debe ser continua.
- 2b. la derivada de la función de onda $d\varphi(x)/dx$, debe ser continua si el potencial $V(x)$ es finito.

²Más adelante, en el Capítulo 5, desarrollaremos mejor estos conceptos. La idea básica es que al ser cerrado y completo, la suma de vectores permanece en el mismo espacio y cualquier vector se puede proyectar sobre un conjunto de vectores que forman una base del espacio vectorial.

Para demostrar estas propiedades, es conveniente reescribir la ecuación estacionaria de Schrödinger y la ecuación de continuidad en una dimensión,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x), \quad (1.37)$$

donde la función de onda es,

$$\psi(x, t) = e^{iEt/\hbar} \varphi(x). \quad (1.38)$$

Mientras que la ecuación de continuidad resulta,

$$\frac{\partial J_x(x, t)}{\partial x} + \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = 0, \quad (1.39)$$

con,

$$\rho(x, t) = \psi^*(x, t)\psi(x, t), \quad (1.40)$$

$$J_x(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\psi^*(x, t) \frac{d\psi(x, t)}{dx} - \frac{d\psi^*(x, t)}{dx} \psi(x, t) \right], \quad (1.41)$$

donde $\rho(x, t)$ es la densidad de probabilidades y $J_x(x, t)$ es el flujo de probabilidades en la dirección x . Es obvio que si $\psi(x, t)$ y su derivada primera, son finitas y derivables, entonces $\varphi(x)$ también lo es, pues la función $e^{iEt/\hbar}$ lo es para todo tiempo t .

Comencemos demostrando los puntos 1a y 1b. Si la función de onda y su derivada no tuvieran valores finitos, entonces la densidad de probabilidades y el flujo de probabilidades no estarían definidos, lo cual es un absurdo pues ambas cantidades representan una partícula física y deben estar definidos. Otro modo de verlo, es que ya que la función de onda es de cuadrado integrable, debe tomar valores finitos. Por otra parte, la función de onda se obtiene resolviendo la ecuación de Schrödinger. Si la derivada primera no está definida (no toma valores finitos), no podríamos calcular la derivada segunda, que se requiere para resolver la ecuación de Schrödinger. *De este modo, tanto $\varphi(x)$, como $d\varphi(x)/dx$, deben tomar valores finitos.*

Demostrar que la función de onda y su derivada son continuas, es relativamente simple una vez que demostramos su carácter finito. Comencemos por la función de onda y pensemos que en un punto x_0 puede existir una discontinuidad de la función de onda. Evaluamos la derivada de la función de onda en x_0 :

$$\frac{d\varphi(x)}{dx} = \lim_{\Delta x_0 \rightarrow 0} \frac{\varphi(x_0 + \Delta x_0) - \varphi(x_0 - \Delta x_0)}{\Delta x_0},$$

si la función es discontinua, entonces,

$$\lim_{\Delta x_0 \rightarrow 0} [\varphi(x_0 + \Delta x_0) - \varphi(x_0 - \Delta x_0)] = \alpha,$$

donde α es algún número diferente de cero. Luego,

$$\frac{d\varphi(x)}{dx} = \lim_{\Delta x_0 \rightarrow 0} \frac{\alpha}{\Delta x_0} \rightarrow \infty,$$

en contradicción con el hecho de que la derivada de la función de onda es finita. Luego, concluimos que la función de onda debe ser continua.

Usando la ecuación estacionaria de Schrödinger es igualmente simple demostrar que la derivada primera de la función de onda también debe ser continua, *en tanto el potencial sea finito*. Escribimos la ec. (1.37) reordenando un poco los términos,

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \varphi(x). \quad (1.42)$$

Sabemos que la función de onda es finita y continua, pedimos que el potencial sea finito. Luego, todo el término de la derecha de la igualdad es finito. Si la derivada segunda de la función de onda es finita, entonces repetimos el mismo razonamiento que empleamos para demostrar que la función de onda es continua a partir de que su derivada primera es finita. Como corolario de esta expresión, vemos que si el potencial es discontinuo, la derivada segunda de la función de onda también lo es. Sobre la continuidad de la derivada primera de la función de onda (cuando el potencial es finito), existe una demostración similar, pero algo más intuitiva. En la Fig. (1.1), mostramos un punto x_0 en donde el potencial tiene una discontinuidad. Integramos la ecuación de Schrödinger en un entorno de ese punto, empleando la ec. (1.37),

$$\int_{x_0 - \Delta x_0}^{x_0 + \Delta x_0} d \left(\frac{d\varphi(x)}{dx} \right) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0 - \Delta x_0}^{x_0 + \Delta x_0} [V(x) - E] \varphi(x) dx, \quad (1.43)$$

donde un dx de la derivada segunda lo llevamos al lado derecho de la igualdad multiplicando; mientras que del lado izquierdo queda el diferencial de la derivada primera.

Tomamos ahora el límite para $\Delta x_0 \rightarrow 0$, para lo cual, reescribimos esta expresión como,

$$\lim_{\Delta x_0 \rightarrow 0} \left[\frac{d\varphi(x_0 + \Delta x_0)}{dx} - \frac{d\varphi(x_0 - \Delta x_0)}{dx} \right] = \frac{2m}{\hbar^2} \lim_{\Delta x_0 \rightarrow 0} \int_{x_0 - \Delta x_0}^{x_0 + \Delta x_0} [V(x) - E] \varphi(x) dx, \quad (1.44)$$

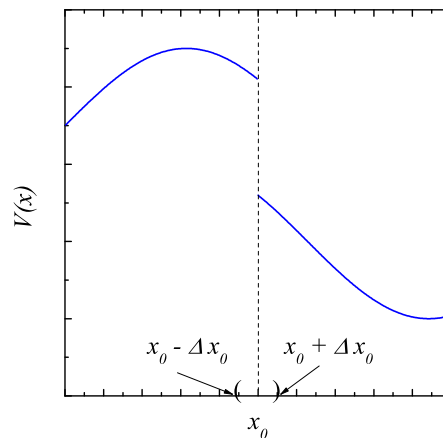


Figura 1.1: En esta figura mostramos en forma esquemática, la discontinuidad de un potencial $V(x)$, en el entorno de x_0 .

como el integrando del lado derecho es finito y el intervalo de integración tiende a cero, tenemos,

$$\lim_{\Delta x_0 \rightarrow 0} \int_{x_0 - \Delta x_0}^{x_0 + \Delta x_0} [V(x) - E] \varphi(x) dx = 0,$$

de este modo,

$$\frac{d\varphi(x_0^+)}{dx} = \frac{d\varphi(x_0^-)}{dx},$$

que demuestra la continuidad de la derivada de la función de onda en tanto el potencial es finito y continuo ó el potencial tiene una discontinuidad finita.

Eventualmente, el la discontinuidad del potencial puede tender a infinito. Es ese caso, la función de onda debe ser continua, pero la derivada primera de la función de onda puede ser discontinua.

1.5. Paridad de la función de onda

Sabemos que las funciones pueden o no tener la paridad definida. Cuando sí la tienen, pueden ser pares ($f_P(-x) = f_P(x)$) o impares ($f_I(-x) = -f_I(x)$). Por ejemplo

la función $f_1(x) = x$, es impar; la función $f_2(x) = x^2$, es par y la función $f_3 = x + x^2$, no tiene la paridad definida. Análogamente, en tres dimensiones debemos hacer el cambio de \mathbf{r} por $-\mathbf{r}$. Consideremos la ecuación estacionaria de Schrödinger,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r}). \quad (1.45)$$

Pensemos además que el potencial es una función par de las coordenadas ($V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$). Si el potencial posee esa propiedad, reemplazo $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$, en la ec. (1.45):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi(-\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\phi(-\mathbf{r}) = E\phi(-\mathbf{r}). \quad (1.46)$$

Esto nos dice que $\phi(\mathbf{r})$ y $\phi(-\mathbf{r})$ son soluciones de la ecuación estacionaria de Schrödinger con la misma energía. Como la función de onda está definida a menos de una fase, si $|\phi(\mathbf{r})| = |\phi(-\mathbf{r})|$, entonces la función de onda o bien es par o bien es impar. Si $|\phi(\mathbf{r})| \neq |\phi(-\mathbf{r})|$, entonces significa que el sistema está degenerado, pues dos funciones de onda diferentes tienen la misma energía. En ese caso, podemos construir,

$$\begin{aligned} \phi_P(\mathbf{r}) &= \frac{\phi(\mathbf{r}) + \phi(-\mathbf{r})}{2}, \\ \phi_I(\mathbf{r}) &= \frac{\phi(\mathbf{r}) - \phi(-\mathbf{r})}{2}, \end{aligned} \quad (1.47)$$

donde estas combinaciones lineales tienen la misma energía E y la paridad definida.

En resumen, cuando el potencial es par, las funciones de onda tienen la paridad definida. Más adelante, en la Sec. 9.4, mostraremos algunos detalles de la operación de paridad, introduciendo un operador que realiza la operación de paridad. En particular, veremos cómo actuar en coordenadas esféricas.

1.6. Valor medio de una magnitud física

Como mencionamos en la Sección 1.3, las magnitudes físicas son representadas por medio de operadores. El valor medio de una magnitud física depende del estado en que se encuentra el sistema. Dado un operador \hat{A} que representa a alguna magnitud física, el valor medio de dicha magnitud física correspondiente a un sistema que se encuentra en un estado $\psi(\mathbf{r}, t)$, está dado por,

$$\langle \hat{A} \rangle = \int_{R^3} dV \psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{A} \psi(\mathbf{r}, t), \quad (1.48)$$

donde el símbolo $\langle \rangle$, indica al valor medio. Podemos obtener una idea intuitiva del significado del valor medio considerando al operador Hamiltoniano. En ese caso, cualquier función de onda se puede escribir como (ec. 1.32),

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N c_i \phi_i(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t},$$

donde,

$$\hat{\mathcal{H}}\phi_i(\mathbf{r}) = E_i\phi_i(\mathbf{r}). \quad (1.49)$$

Reemplazando esta ecuación de onda en la expresión (1.48), teniendo en cuenta la ecuación de autovalores y siguiendo pasos similares a los de las ecs. (1.34)-(1.36), obtenemos,

$$\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = \sum_{i=1}^N |c_i|^2 E_i. \quad (1.50)$$

Sabemos que los factores $|c_i| \leq 1$, de modo que esta expresión es el promedio de la energía, ponderado con factores de peso, que es el modo convencional en que se calcula el valor medio. Es interesante notar que el valor medio del operador Hamiltoniano *no depende del tiempo*. Ocurre lo mismo con cualquier otro operador que comparta la base de autofunciones con el Hamiltoniano. Para que no queden dudas, dadas las autofunciones $\phi_i(\mathbf{r})$ (ec. 1.49), si un operador $\hat{\mathcal{O}}$, cumple con $\hat{\mathcal{O}}\phi_i(\mathbf{r}) = \lambda_i\phi_i(\mathbf{r})$, entonces su valor medio para la misma función $\psi(\mathbf{r}, t)$, es,

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle = \sum_{i=1}^N |c_i|^2 \lambda_i. \quad (1.51)$$

Pensemos ahora en un operador $\hat{\mathcal{A}}$, cuya base de autofunciones no es la misma que para el Hamiltoniano. En ese caso, solo podemos usar la definición dada por la ec. (1.48). *El valor medio del operador dependerá del tiempo*. Analizaremos con más detenimiento esta afirmación en la Subsección 5.6.5. Este es un punto con consecuencias físicas importantes: cuando tenemos una magnitud que no cambia con el tiempo, tenemos entonces una magnitud que se conserva. Ya lo sabemos con la energía y existen otras magnitudes que se conservan.

Trabajemos un poco más sobre el operador $\hat{\mathcal{A}}$. Consideremos al conjunto de estados para los cuales este operador responde a una ecuación de autovalores y autovectores, *para un instante dado, que tomaremos como $t = t_{fijo}$* ,

$$\hat{\mathcal{A}}\psi_n(\mathbf{r}, t_{fijo}) = a_n\psi_n(\mathbf{r}, t_{fijo}). \quad (1.52)$$

Escribimos un estado mezcla arbitrario empleando las autofunciones de la ec. (1.52), pero limitándonos al caso³ en que $t_{fijo} = 0$,

$$\psi(\mathbf{r}, t_{fijo}) = \sum_{i=1}^N \beta_i \psi_i(\mathbf{r}, t_{fijo}). \quad (1.53)$$

El valor medio del operador $\hat{\mathcal{A}}$, cuando el sistema se encuentra en un estado $\psi(\mathbf{r}, t_{fijo})$, está dado por,

$$\langle \hat{\mathcal{A}} \rangle_{t=t_{fijo}} = \int_{R^3} dV \psi^*(\mathbf{r}, t_{fijo}) \hat{\mathcal{A}} \psi(\mathbf{r}, t_{fijo}). \quad (1.54)$$

Empleando ahora las ecs. (1.52) y (1.53), junto con los mismos pasos desarrollados en las ecs. (1.34)-(1.36), obtenemos,

$$\langle \hat{\mathcal{A}} \rangle_{t=t_{fijo}} = \sum_{i=1}^N |\beta_i|^2 a_i. \quad (1.55)$$

Esta expresión nos permite una interpretación más intuitiva del valor medio aún cuando el operador que consideramos no tiene una base común con el Hamiltoniano. Sin embargo, vincular esta expresión con una medición experimental requiere de elementos que aún no hemos expuesto y veremos en la Subsección 5.1.3. Repetimos el término “valor medio” una y otra vez. Esto se debe a que finalmente, es una cantidad vinculada con la medida y la medida de una magnitud física es el elemento más relevante de la Mecánica Cuántica. Vale la pena comentar y adelantándose al Capítulo 5, que para un instante dado, esto es para un t_{fijo} , el valor medio de la expresión (1.55) (o 1.51), es la cantidad que se debe comparar con el valor medio medido. En mecánica cuántica, el valor medio medido resulta de promediar el valor medido de un conjunto muy grande de sistemas, todos en el mismo estado cuántico, cuando una magnitud física es medida solo una vez por cada sistema.

Resumen

En este capítulo en particular, es conveniente mostrar los puntos principales en un resumen.

³Hacemos esto por simplicidad y no existe pérdida de generalidad en esta elección, pues el origen del tiempo puede ser elegido en forma arbitraria.

Los postulados de la Mecánica ondulatoria, son:

Primer Postulado: En un instante dado el estado cuántico de una partícula está caracterizado por una función $\psi(\mathbf{r}, t)$, compleja, llamada función de onda.

Segundo Postulado: La probabilidad dP de que en el instante t , la partícula con función de onda $\psi(\mathbf{r}, t)$, se encuentre localizada en un elemento de volumen dV centrado en el punto \mathbf{r} , es,

$$dP = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = \psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)dV.$$

Tercer Postulado: La evolución temporal de una partícula de masa m está regida por la llamada ecuación de Schrödinger para $\psi(\mathbf{r}, t)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}.$$

Del segundo postulado restula que la función de onda debe ser de cuadrado integrable. Esto es, debe cumplir:

$$\int_{R^3} dP = 1 = \int_{R^3} dV|\psi(\mathbf{r}, t)|^2. \quad (1.56)$$

La Ecuación de Continuidad representa la conservación de la probabilidad y está dada por,

$$\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial\rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0, \quad (1.57)$$

donde,

$$\rho(\mathbf{r}, t) \equiv \psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t), \quad (1.58)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{\hbar}{2mi} [\psi^*(\mathbf{r}, t)\nabla\psi(\mathbf{r}, t) - \nabla\psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)]. \quad (1.59)$$

La función $\rho(\mathbf{r}, t)$ es la densidad de probabilidades y $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ es el flujo de probabilidades.

La ecuación estacionaria de Schrödinger, está dada por,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r}). \quad (1.60)$$

Que se puede escribir como,

$$\hat{\mathcal{H}}\phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r}), \quad (1.61)$$

donde $\hat{\mathcal{H}}$ se denomina operador Hamiltoniano.

Una función de onda pura es aquella que tiene un valor definido para la energía y su expresión está dada por,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \quad (1.62)$$

Mientras que una función de onda mezcla se escribe como,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N c_i \phi_i(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t}, \quad (1.63)$$

donde los factores c_i representan al peso relativo de cada componente de la función de onda y deben cumplir con,

$$\sum_{i=1}^N |c_i|^2 = 1. \quad (1.64)$$

Además de ser de cuadrado integrable, la función de onda debe cumplir:

- 1a. la función de onda $\varphi(x)$ debe ser finita.
- 1b. la derivada de la función de onda $d\varphi(x)/dx$, debe ser finita.
- 2a. la función de onda $\varphi(x)$ debe ser continua.
- 2b. la derivada de la función de onda $d\varphi(x)/dx$, debe ser continua si el potencial $V(x)$ es finito.

Finalmente, se define al valor medio de una magnitud física como,

$$\langle \hat{A} \rangle = \int_{R^3} dV \psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{A} \psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.65)$$

CAPÍTULO 2

El experimento de la doble rendija

Introducción

Este es un capítulo corto y algo singular, pues escribiremos muy pocas fórmulas. Básicamente describiremos un experimento cuyo valor didáctico para discutir los efectos cuánticos es enorme. El experimento de la doble rendija muestra varios de los puntos más contraintuitivos de la Mecánica Cuántica. Debemos recalcar que el lenguaje hablado se basa en la experiencia y no tenemos experiencia directa del submundo cuántico. Sin embargo, cualquier instrumento de medida es un objeto clásico. Los experimentos sí están en nuestra experiencia y es por ello que podemos describir este experimento solo con palabras. Pero cuando queremos *explicar* el resultado experimental, nos encontramos con aparentes contradicciones, resultados que no esperamos y no logramos modelar por medio de un mecanismo vivencial.

El conjunto de fenómenos cuánticos conduce a un conjunto de postulados, que como tales, los consideramos válidos en tanto no surja un experimento que los contradiga. Durante mucho tiempo, personas de la talla de Albert Einstein, dudaron sobre la validez de la interpretación de la mecánica cuántica sobre el mundo natural. Ellos hablaban de “variables ocultas”. Tomemos la idea ya discutida de la trayectoria de una partícula. El sentido común nos dice que la partícula *debe* tener una trayectoria. La cuántica nos dice que no. Podemos saber en todo instante el valor medio de la posición y de la velocidad, junto con una cierta incertidumbre, pero nunca podremos saber la trayectoria con certeza absoluta. La idea entonces era que existían ciertas variables no evidentes, que estamos olvidando y que una vez que fueran reconocidas e incorporadas, seríamos capaces de

describir una trayectoria. Esta fue una discusión que llevó mucho tiempo. Finalmente, el llamado teorema de Bell, afirma que ninguna teoría física de variables ocultas locales, puede reproducir todas las predicciones de la mecánica cuántica.

También en este capítulo, nos adelantamos a discutir lo que se da en llamar el “experimento del gato de Schrödinger”. En general, es algo que se discute luego de exponer el llamado colapso de la función de onda. Elegimos discutirlo aquí, pues nos ayuda a interpretar el experimento de la doble rendija.

2.1. El experimento de la doble rendija

La geometría de una doble rendija es conocida. El ancho de la rendija es pequeño comparado con la separación entre las dos rendijas. Además, el ancho de cada rendija es el mismo y este ancho debe ser lo suficientemente grande para dejar pasar las partículas u ondas que inciden sobre ellas, pero lo suficientemente pequeño como para que su emisión pueda pensarse como puntual. Analizaremos tres situaciones experimentales diferentes: cuando sobre las rendijas inciden partículas, en segundo lugar cuando inciden ondas y finalmente cuando lo hacen electrones. Naturalmente, para cada elección las rendijas en sí son diferentes.

2.1.1. El experimento de la doble rendija con partículas

En la Fig. (2.1), mostramos un experimento de doble rendija donde inciden partículas. Las partículas provienen de una fuente a la izquierda de las rendijas. Podemos tener diferentes fuentes de partículas. Solo es importante que en promedio, lleguen a cada rendija aproximadamente la misma cantidad de partículas. Por simplicidad, elegimos que todas las partículas se muevan en forma paralela y a la misma velocidad. Estamos pensando en una fuente de partículas clásicas. Nos referimos a partículas macroscópicas, que podemos ver y seguir sus trayectorias. Elegimos también las condiciones experimentales de modo tal que las partículas no interactúan entre sí, ni con el medio; sino solo con las rendijas y la pantalla.

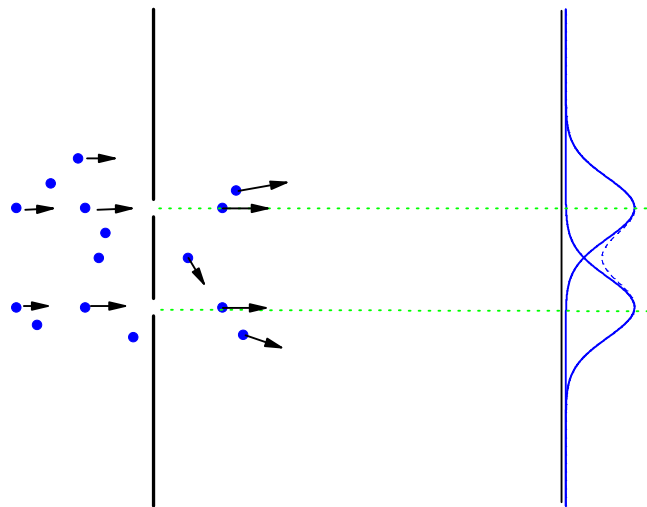


Figura 2.1: *Doble rendija para el caso de partículas. Suponemos que la dirección de movimiento de las partículas es aleatoria.*

Cuando una partícula incide sobre una rendija, puede ocurrir que pase de largo o que golpee un borde de la rendija. Si pasa de largo, incidirá sobre una pantalla que está del otro lado de la rendija, en un punto que resulta de la intersección de la pantalla con la línea verde de la Fig. (2.1). Si la partícula golpea un borde de la rendija, se va a desviar. El resultado experimental arroja que la probabilidad de que una partícula incida sobre la pantalla, tiene un comportamiento gaussiano, con sus máximos en la vertical del punto medio de cada rendija. De este modo, tenemos dos máximos, uno para cada rendija y la probabilidad total de que incida una partícula en un punto de la pantalla, es la suma de estas dos curvas. En la figura, dibujamos la distribución de probabilidad de partículas proveniente de cada rendija con una línea continua y la suma de las probabilidades con una línea de trazos (que solo se puede distinguir en la zona media entre los dos máximos).

En este experimento, las curvas de la derecha resultan de la suma de muchos eventos a lo largo del tiempo. Estamos pensando que arrojamos las partículas en una cantidad lo suficientemente espaciada, como para que las partículas no puedan chocar entre sí, como indicamos al comienzo. De hecho, podemos arrojar una partícula, esperar que llegue a la pantalla y recién entonces arrojar la siguiente. De esta manera, no existe ningún tipo

de interferencia entre las partículas.

Del modo en que está hecho, confirmamos que el resultado experimental nos muestra que al emplear partículas, no existen ningún tipo de interferencias.

2.1.2. El experimento de la doble rendija con ondas

Podemos construir un experimento de una doble rendija con ondas por medio de una superficie de agua y dos pequeñas ranuras sobre la que inciden ondas planas. Claro, muchos se preguntarán por qué no pensar simplemente en el experimento de Young con luz. Esto es porque la luz tiene un comportamiento cuántico que volveremos a nombrar en forma breve al final de esta sección. Volvemos a nuestro experimento con una superficie de agua, donde la perturbación que se propaga es claramente una onda mecánica que no transporta masa. Un esquema simplificado de este dispositivo, lo podemos ver en la Fig. (2.2).

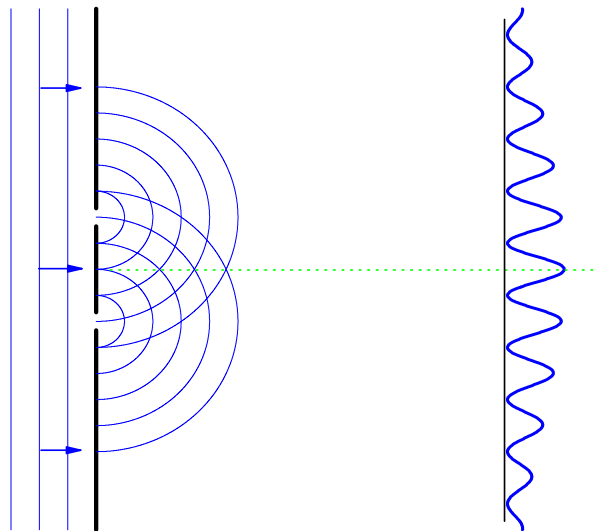


Figura 2.2: Doble rendija para el caso de ondas. El patrón de interferencia está modulado por el patrón de difracción.

De esta manera, tenemos un frente de ondas plano, que viene desde la izquierda de

la rendija, incide sobre ella y desde las rendijas se emiten dos frentes de ondas circulares, según el principio de Huygens. Cuando estos frentes se cruzan entre ellos, se produce el fenómeno de interferencia. Esto ocurre en todo el espacio a la derecha de las rendijas, como se muestra en la figura. En particular, si colocamos una pantalla o detector, a la derecha de las rendijas, podemos ver el patrón de interferencia, donde existen máximos y mínimos (en los últimos, la intensidad de la onda es cero). La interferencia es un fenómeno puramente ondulatorio. Notamos que en el punto medio entre las dos rendijas, proyectamos una línea horizontal verde que indica en la pantalla la posición del máximo central.

2.1.3. El experimento de la doble rendija con electrones

Antes de comenzar, vale la pena comentar que el experimento de la doble rendija con electrones fue hecho en tiempos recientes ⁴. Durante mucho tiempo se pensó que se trataba de un experimento mental (en física para esto, suele usarse aún en castellano, la palabra alemana “Gedankenexperiment” que significa naturalmente “experimento mental”). Las dificultades técnicas para llevar adelante este experimento con electrones son enormes. Sin embargo y como dijimos, se logró hacer. Mucho antes del experimento, fue extensamente discutido en los libros de mecánica cuántica y el resultado experimental confirma dichos análisis. Quizá el más completo e interesante de dichos estudios es el que lleva adelante Richard Feynman en su libro [4].

Vayamos al experimento en sí: arrojamos electrones de a uno, sobre una doble rendija y luego detectamos los electrones en una pantalla. Hacemos esto con un número muy grande de electrones, siempre arrojándolos de a uno y acumulando el resultado sobre la misma pantalla. Sabemos que los electrones son partículas con carga eléctrica y una masa en reposo. Por otra parte, nos damos cuenta de que estamos ya en la escala cuántica y no debemos esperar un comportamiento clásico de un sistema cuántico.

El primer resultado del experimento es que una vez acumulados los datos del paso de muchos electrones a través de las rendijas, se observa un patrón de interferencia como el de la Fig. (2.2). Ahora bien, realizamos el experimento arrojando los electrones

⁴Se puede encontrar dicho experimento en: <https://www.hitachi.com/rd/research/materials/quantum/doubleslit/index.html>

de a uno a la vez. Luego, ¿cuál es el origen de la interferencia?, ¿qué interfiere con qué? Los electrones son partículas con carga y son muy fáciles de medir. Podemos poner un detector en cada una de las rendijas y determinar por qué rendija pasa. Al hacerlo, encontramos un resultado que al principio nos sorprende: desaparece el patrón de interferencia y ahora sobre la pantalla observamos una distribución como el de las partículas, de la Fig. (2.1). Resumamos los resultados:

- Cuando no medimos por cuál de las dos rendijas pasa el electrón, éste se comporta como una onda.
- Cuando medimos por cuál de las dos rendijas pasa el electrón, éste se comporta como una partícula.

Si estuviéramos haciendo esto por primera vez, especularíamos con que quizá se está cometiendo algún error al armar el experimento. Pero no es el caso. Los resultados correctos del experimento son estos. Descartado un error en el experimento, nuestra primera conclusión es:

El acto de medir, altera al objeto observado.

Pues se obtiene un resultado diferente cuando observamos al electrón antes de llegar a la pantalla. Existe una segunda conclusión, algo más sutil:

El comportamiento de un objeto cuántico como el electrón, no es ni el de una partícula, ni el de una onda; sino que es una entidad nueva que en algunos casos se comporta como una partícula y en otros, como una onda.

Este último punto genera cierta controversia, pues choca con nuestro lenguaje. El que el acto de observar, altere al objeto observado se acepta mejor. Existe el concepto de “pánico escénico” para aquellos actores que al salir al escenario sufren pánico. Lo sufren pues se saben observados por el público y la crítica y eso altera su conducta. Pero el decir que un cierto objeto no es ni una partícula, ni una onda, es más complicado. Les damos un ejemplo para que se entienda esta idea. Todos sabemos que los posibles estados de agregación de la materia son: sólido, líquido, gas o plasma. Pensemos ahora que solo conocemos dos de los estados de agregación: los gases y los sólidos. De pronto nos encontramos con los líquidos. Vemos que frente a la compresión, el líquido se comporta en forma similar a un sólido. Pero en cuanto a conservar o no su forma, se parece más a un gas. Dado que en nuestra experiencia tenemos clara la existencia de los líquidos

como uno de los estado de agregación de la materia, nadie emplea tiempo en dirimir si un líquido es un gas o un sólido. La duda y esa falsa dualidad onda–partícula, proviene de que el comportamiento cuántico no está en nuestra experiencia directa.

Como resumen de lo que hemos discutido hasta ahora, el experimento nos dice que a diferencia de la física clásica, al observar⁵ al electrón, éste tiene otro comportamiento. Además, el comportamiento del electrón es un comportamiento que denominaremos comportamiento cuántico, que no podemos asimilar con el comportamiento de un objeto clásico. Como al comienzo de esta subsección, no es un error el llamar “partícula” al electrón en un marco más coloquial. Todos hablamos de “las ondas electromagnéticas” y la mayoría de nosotros hemos escuchado la palabra “fotón” para designar la *partícula* asociada a la luz. Para el uso en que fueron desarrolladas, estas palabras son las adecuadas y su empleo es correcto. Cuando debemos explicar un experimento como el de la doble rendija para el electrón, debemos tener más cuidado.

Muy bien, ya sabemos lo que ocurre, también sabemos lo que “no es”, pero ahora debemos explicar por qué ocurre lo que ocurre.

Del capítulo anterior, sabemos que todo lo que podemos decir de un objeto cuántico está contenido en su función de onda. La incertidumbre en la trayectoria de un objeto cuántico, es una propiedad intrínseca, esto es, no tiene que ver con la precisión del instrumento, sino con algo que es propio de un sistema cuántico. La incertidumbre en la posición, hace que no podamos saber por cuál de las dos rendijas pasa la partícula, a menos que la midamos. La partícula está representada por su función de onda y dada la incertidumbre en la posición, proponemos que la función de onda atraviesa ambas rendijas, con la misma probabilidad. Las dos componentes de la función de onda que salen de cada rendija, interfieren entre sí y de ahí proviene el efecto de la interferencia. Pongamos esto en términos analíticos, pero dentro de un esquema simplificado.

En primer lugar, designaremos por medio de la letra “*s*” a la rendija superior y empleamos “*i*”, para la inferior. Supongamos que tapamos la rendija inferior, el flujo de probabilidades solo puede provenir de la rendija superior y la probabilidad de que el electrón impacte en un punto a una altura *y* de la pantalla es,

$$dP = |\psi_s(y)|^2 dy. \quad (2.1)$$

⁵Vale la pena indicar que en el marco de la Mecánica Cuántica, “observar” y “medir” deben ser tomados como sinónimos.

Ahora tapamos la rendija superior, tenemos entonces,

$$dP = |\psi_i(y)|^2 dy. \quad (2.2)$$

Cada una de estas funciones de onda, está adecuadamente normalizada. Ahora habilitamos a las dos rendijas. La probabilidad es ahora,

$$dP = |\mathcal{C}(\psi_s(y) + \psi_i(y))|^2 dy, \quad (2.3)$$

donde \mathcal{C} es una constante de normalización. Pensamos ahora que $\psi_s(y)$ y $\psi_i(y)$ difieren solo en una fase. Físicamente, esto significa que pensamos que el flujo de probabilidad por cada rendija es el mismo y que está en fase. Estas hipótesis son similares a las del experimento de Young: el flujo de probabilidades que sale de cada rendija está en fase y las probabilidades $\psi_s(y)$ y $\psi_i(y)$, ahora sobre la pantalla, tienen una diferencia de fase que resulta de una distancia diferente entre el punto y sobre la pantalla y cada una de las dos rendijas. De esta manera, modelamos la función de onda sobre la pantalla como,

$$\psi_{pantalla}(y) = \mathcal{C}[\psi_s(y) + \psi_i(y)] = \mathcal{C}\psi_s(y)(1 + e^{i\delta}), \quad (2.4)$$

donde en forma arbitraria supusimos que $\psi_i(y) = \psi_s(y)e^{i\delta}$. Calculamos ahora,

$$dP = |\psi_{pantalla}(y)|^2 dy = |\mathcal{C}|^2 |\psi_s(y)|^2 |1 + e^{i\delta}|^2 dy = |\mathcal{C}|^2 |\psi_s(y)|^2 (2 + 2\cos(\delta)) dy, \quad (2.5)$$

con lo cual, tenemos finalmente,

$$dP = |\psi_{pantalla}(y)|^2 dy = 2|\mathcal{C}|^2 |\psi_s(y)|^2 (1 + \cos(\delta)) dy, \quad (2.6)$$

dado que $\delta \in Re$ y $\cos(\delta) \in [-1, 1]$, esto explica los ceros y los máximos del patrón de interferencia de la pantalla. Por otra parte, la expresión $(1 + \cos(\delta))$, está modulada por $|\psi_s(y)|^2$. El patrón de interferencia resulta de la diferencia de fase entre las funciones de onda provenientes de cada rendija, sobre los diferentes puntos de la pantalla⁶.

De este modo, ya entendemos cómo aparece el patrón de interferencia. Cuando medimos por cuál de las rendijas pasa el electrón, eso equivale a tapar la otra rendija. Ahora no podemos decir que la probabilidad de que el electrón pase por una rendija o la otra, vale lo mismo. Al eliminar esa posibilidad, estamos en las condiciones de la ec. (2.1)

⁶Podemos multiplicar toda una función de onda por una fase arbitraria; pero no podemos multiplicar por fases diferentes las componentes de una función de onda.

o la ec. (2.2), según lo que nos diga el detector y por lo tanto no hay interferencia. Este es un punto central de la Mecánica Cuántica: si mido el electrón pasando por una de las rendijas, la probabilidad de que éste pase por la otra rendija es cero (esto suena a una obviedad por un motivo fuerte: lo es); y por lo tanto su función de onda tiene una sola componente. Si no mido el electrón, su función de onda viene dada por la ec. (2.4), con dos componentes.

Para finalizar, notemos que puesto en estos términos, el resultado está fundamentado. En términos de la experiencia humana, sabemos que el electrón *debe pasar por una de las dos rendijas*. Sin embargo, el experimento no es consistente con la visión humana de que existe una partícula, con masa en reposo que es el electrón, que esta partícula no se puede dividir y que por lo tanto debe pasar por una u otra de las dos rendijas. El experimento nos indica que lo relevante no es el electrón, sino su función de onda. La física cuántica no está en la experiencia humana.

2.2. El llamado experimento del gato de Schrödinger

El llamado experimento del gato de Schrödinger, es un juego mental que busca explicar de un modo gráfico el llamado colapso de la función de onda. Es una historia que es conocida, trascendiendo el ámbito científico. No solo se escucha en expresiones de divulgación científica, sino en libros, series y películas que no pretenden tener rigurosidad científica. Es por ello que vale la pena comentarlo y desmitificarlo un poco.

La idea es simple. Se coloca un gato vivo, debajo de una caja y dentro de la caja, además del gato, hay un dispositivo que con una probabilidad del cincuenta por ciento durante el tiempo que dura el experimento, activa un mecanismo que libera un veneno que mataría al gato. La idea es que solo al final del experimento podemos levantar la caja y comprobar si el gato está vivo o muerto. Como la probabilidad de que el gato muera es del cincuenta por ciento, decimos que antes de levantar la caja, el gato se encuentra en un estado “cuántico” cuya función de onda es mitad vivo, mitad muerto. Al levantar la caja, “colapso” la función de onda del gato, haciendo que o bien esté vivo o bien muerto.

En el caso de la doble rendija, al medir el electrón y determinar que pasa por una

de las dos rendijas alteramos su función de onda, lo cual determina que desaparezca el patrón de interferencia. Si no realizo ninguna medida sobre las rendijas, decimos que el flujo de probabilidades proveniente de cada rendija es igual. Análogamente, mientras no mida al gato (me cuesta creer que tenga que estar escribiendo esto), su probabilidad de estar vivo o muerto, es la misma. Cuando levanto la caja y por lo tanto lo mido, es equivalente a determinar por cuál de las dos rendijas pasa el electrón y por lo tanto, o bien está vivo o bien está muerto.

Esto no es más que una historia, con cierta popularidad, para ejemplificar la idea de colapso de la función de onda. Contiene el equívoco de pensar en un sistema clásico (que es un gato), como un sistema cuántico. Veamos algunas de las deficiencias físicas de la historia. En primer lugar, dentro de la caja debe haber aire y el gato debe respirar mientras esté vivo. Luego, sin alterar el resultado del experimento podemos monitorear en cada instante si el gato respira. No necesitamos levantar la caja para saber si está vivo. De hecho, la caja puede ser transparente y no cambiaría el resultado del experimento.

Si aún les quedan dudas sobre la falsedad de la historia como un sistema cuántico real, volvamos sobre el experimento. La idea es que existe una sustancia radioactiva, que tiene una probabilidad de un cincuenta por ciento en decaer. Si decae, activa un mecanismo que libera un veneno que mata al gato. La sustancia radioactiva puede decaer en cualquier momento o simplemente no decaer, con lo cual el gato no muere. Ahora bien, si decae, se libera el veneno, el gato lo aspira, el veneno se mezcla con su sangre al respirar, la sangre envenenada (otra vez, me cuesta creer que tenga que estar escribiendo esto) circula por el gato y lo mata. La muerte del gato no es instantánea, desde que aspira el veneno hasta que muere, pasan unos segundos. Imaginemos que se levanta la caja en el instante exacto en que el gato acaba de aspirar el veneno. El gato aún está vivo, pero en pocos segundos morirá: al levantar la caja estaba vivo y a pesar de ser observado vivo, muere de todos modos unos segundos después. Esto es, al acto de ser observado no alteró su situación. Su función de onda al ser observado vivo, no colapsó en "vivo". El equívoco de la historia es pensar en un sistema clásico, como cuántico.

CAPÍTULO 3

Sistemas cuánticos simples

Introducción

En el Capítulo 1, discutimos los postulados de la Mecánica Ondulatoria y en particular, la ecuación de Schrödinger. En este capítulo emplearemos estos elementos para abordar la resolución de algunos problemas físicos simples. A lo largo del capítulo, notaremos que aún los problemas que en Mecánica Clásica son triviales, en Mecánica Cuántica poseen dificultades. Luego, el término “simple” del título del capítulo debe interpretarse como un calificativo relativo al de los problemas que siguen a este capítulo.

Quizá el problema mecánico más simple, es el de una partícula libre. En este capítulo comenzaremos analizando el problema de la partícula libre y luego avanzaremos sobre otro tipo de problemas, en los que expondremos un método de resolución en cierta forma sistemático. Veremos que el tratamiento que hacemos de la partícula libre y de otros problemas, parece emplear un método de trabajo conceptualmente diferente. En realidad no es así, sino que en algún caso recurriremos a ciertas simplificaciones y en otros no.

3.1. Partícula libre

Una partícula libre es una partícula que no está sometida a ninguna fuerza. En términos de la ecuación de Schrödinger, para la partícula libre tenemos:

$$V(\mathbf{r}) = 0, \quad \forall \mathbf{r}.$$

Escribimos entonces la ecuación de Schrödinger para este problema. Dado que el potencial no depende del tiempo, podemos usar la ecuación estacionaria de Schrödinger (ec. 1.25):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r}),$$

donde ya reemplazamos $V(\mathbf{r})$ por cero. Es conveniente dividir esta expresión por $\phi(\mathbf{r})$,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2\phi(\mathbf{r})}{\phi(\mathbf{r})} = E. \quad (3.1)$$

Proponemos nuevamente una solución separable de la forma,

$$\phi(\mathbf{r}) = X(x)Y(y)Z(z),$$

con lo que tenemos,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X(x)}{dx^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Y(y)}\frac{d^2Y(y)}{dy^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Z(z)}\frac{d^2Z(z)}{dz^2} = E, \quad (3.2)$$

de este modo, tenemos tres funciones independientes, una de x , otra de y y la última de z , tal que sumadas dan una constante. Para que esto se cumpla, cada una de las funciones debe ser igual a una constante,

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X(x)}{dx^2} &= C_x, \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Y(y)}\frac{d^2Y(y)}{dy^2} &= C_y, \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Z(z)}\frac{d^2Z(z)}{dz^2} &= C_z, \end{aligned} \quad (3.3)$$

con $C_x + C_y + C_z = E$. Nota menor: las constantes de separación C_i , tienen unidades de energía y la energía es un escalar. Es por ello, que no empleamos la letra "E", sino la "C", pues sería un abuso de notación dar la idea de componentes cartesianas de una magnitud escalar.

Tanto E como las constantes C_i deben ser mayores que cero. Se puede demostrar este punto por el absurdo. Si suponemos que una de las constantes C_i es menor que cero, tomemos C_x , la solución de la ec. (3.3), sería una onda evanescente ($e^{-\alpha x}$), el resultado dependería de la elección del origen de coordenadas, lo cual es absurdo, pues una partícula libre es invariante traslacional. El absurdo proviene de suponer que la constante C_x es menor que cero.

Luego y por conveniencia, definimos,

$$k_i^2 = \frac{2mC_i}{\hbar^2},$$

y reescribimos las ecs. (3.3), como,

$$\begin{aligned}\frac{d^2 X(x)}{dx^2} + k_x^2 X(x) &= 0, \\ \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} + k_y^2 Y(y) &= 0, \\ \frac{d^2 Z(z)}{dz^2} + k_z^2 Z(z) &= 0.\end{aligned}\tag{3.4}$$

Estas son ecuaciones conocidas y el conjunto de soluciones se pueden escribir como,

$$\begin{aligned}X(x) &= A_x e^{ik_x x} + B_x e^{-ik_x x}, \\ Y(y) &= A_y e^{ik_y y} + B_y e^{-ik_y y}, \\ Z(z) &= A_z e^{ik_z z} + B_z e^{-ik_z z}.\end{aligned}\tag{3.5}$$

Consideremos la coordenada x . El término $e^{ik_x x}$ (una vez que le sumamos la parte temporal), representa una partícula moviéndose hacia la derecha y $e^{-ik_x x}$ cuando la partícula se mueve hacia la izquierda del eje x . Esto es así, si suponemos que $k_x > 0$. Dado que la partícula se mueve o bien hacia la derecha o bien hacia la izquierda, o bien $A_x = 0$ ó $B_x = 0$. En cualquier caso, podemos escribir,

$$\phi(\mathbf{r}) = X(x)Y(y)Z(z) = A e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},\tag{3.6}$$

donde A es una constante a determinar, $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ y $\mathbf{r} = (x, y, z)$ (las componentes cartesianas de los dos vectores pueden tomar cualquier valor). Más adelante, en este mismo capítulo, escribiremos nuevamente esta solución como la suma de dos términos, como se muestra en las ecs. (3.5). Haremos esto por una razón algo sutil, que discutiremos más tarde.

Hemos obtenido como resultado para la función de onda de una partícula libre, una onda plana. Debemos notar que la cantidad \mathbf{k} es el número de onda y $\hbar\mathbf{k}$ es el impulso de la partícula. El impulso de la partícula está perfectamente determinado en el valor $\hbar\mathbf{k}$; mientras que tratándose de una onda plana, la posición está completamente indeterminada. De este modo, no existe ninguna contradicción con el Principio de Indeterminación de Heisenberg, $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$, pues si bien $\Delta p = 0$, tenemos que $\Delta x \rightarrow \infty$.

Notemos que,

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{2m(C_x + C_y + C_z)}{\hbar^2} = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad (3.7)$$

de este modo,

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (3.8)$$

Encontramos que la energía de una partícula libre es simplemente la energía cinética de la misma, que es el resultado que esperamos encontrar. Recordemos que la energía E provino de la constante de separación al deducir la ecuación estacionaria. De este modo, como E es constante, también lo es $\hbar k^2$. *La función de onda es una función de la posición y del tiempo. Lo que define al estado cuántico de una partícula libre es su cantidad de movimiento, $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$. Notemos que la energía de la partícula, dada por la ec. (3.8), depende del módulo de la cantidad de movimiento, pero no de su dirección y sentido. Luego, dado que para un determinado valor de $|\mathbf{p}|$ existen infinitas posibles direcciones, la degeneración de una partícula libre es infinita.*

Ahora bien, la ec. (3.6), es la solución de la ecuación de Schrödinger para una partícula libre. Si recordamos los postulados de la Mecánica Ondulatoria, vemos que debemos pedirle a la función de onda que sea de cuadrado integrable. Para la función de onda que obtuvimos, tenemos,

$$\int_{R^3} dV \phi^*(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) = |A|^2 \int_{R^3} dV e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = |A|^2 \int_{R^3} dV 1 \rightarrow \infty, \quad (3.9)$$

como la función de onda $\phi(\mathbf{r})$ de la ec. (3.6), no es de cuadrado integrable, no representa un estado físico. No es el único problema que tiene esta expresión. Para ver ello, incluyamos la parte temporal:

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = A e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}, \quad (3.10)$$

donde $\omega = E/\hbar$. Consideremos ahora la fase del exponencial de esta expresión:

$$\alpha = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t.$$

Tomamos ahora los puntos de fase constante, $\alpha = \text{constante}$, y derivamos respecto del tiempo,

$$\frac{d\alpha}{dt} = 0 = \mathbf{k} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} - \omega = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{fase} - \omega,$$

⁷Nota menor: el hecho de que E es constante solo nos da información del módulo de la cantidad de movimiento. El vector $\hbar \mathbf{k}$ es constante pues son constantes C_x , C_y y C_z de las ecs. (3.3).

donde v_{fase} es la velocidad de fase. Recordando que $\hbar\mathbf{k} = \mathbf{p}$, $E = p^2/2m$ y que $p = mv_{clas}$ (donde v_{clas} es la velocidad de traslación clásica) tenemos,

$$|v_{fase}| = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{p^2}{2mp} = \frac{p}{2m} = \frac{v_{clas}}{2}.$$

La velocidad que podemos asociar a la función de onda es la velocidad de fase y esta no coincide con la velocidad de traslación clásica, v_{clas} ; lo cual no nos permite interpretarla.

Resumamos las dos objeciones que les hacemos a la expresión de la onda plana:

- No es de cuadrado integrable.
- Su velocidad no coincide con la velocidad de traslación clásica.

Para resolver este problema, recordamos que la ecuación de Schrödinger es lineal y homogénea, por lo cual la suma de soluciones es también solución. Notemos que la cantidad que define al estado cuántico de una partícula libre es su cantidad de movimiento.

3.1.1. Paquete de ondas

Recordemos que la solución de la ecuación de Schrödinger para una partícula libre está dada por la ec. (3.10), pero que esta solución por no ser de cuadrado integrable no se puede interpretar como un estado físico. Recurrimos a una superposición infinita de soluciones de la forma (3.10), construyendo entonces un paquete de ondas,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{K^3} d\mathbf{k} g(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega(k)t)}, \quad (3.11)$$

donde $g(\mathbf{k})$ es una función de peso, que debe ser de cuadrado integrable y discutiremos enseguida. Notemos que la frecuencia angular ω , es una función del número de onda: para una partícula libre tenemos, $\omega(k) = \hbar k^2 / (2m)$.

Para poder construir el paquete de ondas debemos dar alguna información. En particular, debemos saber la función de onda en el instante inicial. Además, debemos pedir que esa función de onda sea de cuadrado integrable. Lo que haremos, en realidad, es ver cómo cambia con el tiempo esa función.

Sea $\psi(\mathbf{r}, 0)$ la función de onda en el instante inicial, que supondremos normalizada. Podemos escribir,

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{K^3} d\mathbf{k} g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (3.12)$$

Esto se ve como una transformada de Fourier. Haciendo la transformada inversa, tenemos,

$$g(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{R^3} d\mathbf{r} \psi(\mathbf{r}, 0) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (3.13)$$

Calculamos ahora,

$$\int_{K^3} d\mathbf{k} g^*(\mathbf{k}) g(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{K^3} d\mathbf{k} \int_{R^3} d\mathbf{r} \int_{R^3} d\mathbf{r}' \psi^*(\mathbf{r}', 0) \psi(\mathbf{r}, 0) e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}, \quad (3.14)$$

pero,

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int_{K^3} d\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Reemplazando, tenemos,

$$\int_{K^3} d\mathbf{k} g^*(\mathbf{k}) g(\mathbf{k}) = \int_{R^3} d\mathbf{r} \int_{R^3} d\mathbf{r}' \psi^*(\mathbf{r}', 0) \psi(\mathbf{r}, 0) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int_{R^3} d\mathbf{r} |\psi(\mathbf{r}, 0)|^2 = 1, \quad (3.15)$$

ya que por hipótesis la función $\psi(\mathbf{r}, 0)$ está normalizada. Tenemos entonces que,

$$\int_{K^3} d\mathbf{k} |g(\mathbf{k})|^2 = 1. \quad (3.16)$$

Mostraremos ahora que la función $\psi(\mathbf{r}, t)$ de la ec. (3.11), está normalizada. *Ya que esta función resulta de una suma infinita de soluciones de la ecuación de Schrödinger para la partícula libre, el paquete de ondas representa una partícula libre.* Si demostramos que está normalizada, habremos resuelto uno de los puntos de nuestro problema. Calculemos la norma de $\psi(\mathbf{r}, t)$:

$$\begin{aligned} \int_{R^3} d\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{R^3} d\mathbf{r} \int_{K^3} d\mathbf{k} g^*(\mathbf{k}) e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega(\mathbf{k})t)} \\ &\times \int_{K^3} d\mathbf{k}' g(\mathbf{k}') e^{i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r} - \omega(\mathbf{k}')t)} \\ &= \int_{K^3} d\mathbf{k} \int_{K^3} d\mathbf{k}' g^*(\mathbf{k}) g(\mathbf{k}') e^{-i(\omega(\mathbf{k}') - \omega(\mathbf{k}))t} \\ &\times \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{R^3} d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} \\ &= \int_{K^3} d\mathbf{k} \int_{K^3} d\mathbf{k}' g^*(\mathbf{k}) g(\mathbf{k}') e^{-i(\omega(\mathbf{k}') - \omega(\mathbf{k}))t} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \\ &= \int_{K^3} d\mathbf{k} |g(\mathbf{k})|^2 = 1, \end{aligned} \quad (3.17)$$

donde usamos que,

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

junto con la ec. (3.16). De esta manera, demostramos que la función de onda $\psi(\mathbf{r}, t)$, se encuentra correctamente normalizada. Debemos notar que esta normalización resulta

de la hipótesis inicial de que la función de onda $\psi(\mathbf{r}, 0)$ está normalizada. En la próxima subsección fundamentamos mejor este concepto.

Resta aún comparar la velocidad del paquete de ondas con la velocidad de traslación clásica, v_{clas} . Para ello, recordamos del Electromagnetismo la velocidad de grupo, v_g , que es la velocidad con que se mueve el paquete de ondas:

$$v_g = \frac{d\omega(k)}{dk}. \quad (3.18)$$

Como $\omega(k) = \hbar k^2/2m$, tenemos,

$$v_g = \frac{2\hbar k}{2m} = \frac{p}{m} = \frac{mv_{clas}}{m} = v_{clas}. \quad (3.19)$$

De esta manera, la velocidad con la que se mueve el paquete de ondas es igual a la velocidad de traslación clásica. Con este punto, hemos resuelto las dos objeciones que formulamos sobre la onda plana.

Existe un punto que es algo sutil. De la lectura de estas líneas, se puede creer que uno *construye* un paquete de ondas. En realidad no es así. *Partimos de un paquete de ondas en el instante inicial $\psi(\mathbf{r}, 0)$, que está normalizado y afirmamos que representa una partícula libre y lo que en realidad hacemos es mostrar cómo este paquete de ondas evoluciona con el tiempo.*

3.1.2. Sobre las funciones de onda en el continuo

Para un potencial que no depende del tiempo, la Ecuación Estacionaria de Schrödinger dada por la ec. (1.25), junto a las condiciones de contorno del problema; nos ofrecen un problema matemático, cuya solución son las posibles funciones de onda y sus energías. Más adelante mostraremos que dependiendo del problema físico, la energía puede tomar valores discretos o continuos. Claro, por razones históricas uno espera que la energía esté “cuantificada”, esto es, que tome valores discretos. Pero también puede tomar valores continuos como en el caso de una partícula libre. En forma intuitiva, cuando el resultado es que la energía es discreta, decimos que las funciones de onda pertenecen “al discreto”, mientras que cuando los valores de la energía son continuos, decimos que las funciones de onda pertenecen “al continuo”.

Un problema típico del continuo, es el de la partícula libre. La solución física del problema cuántico de la partícula libre es el paquete de ondas. Es conveniente reescribir su expresión en este punto. Trabajaremos en los términos más generales, en tres dimensiones.

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{K^3} d\mathbf{k} g(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega(k)t)}. \quad (3.20)$$

Definimos ahora unas funciones nuevas, de la forma,

$$v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (3.21)$$

Donde es fácil comprobar que,

$$\int_{R^3} d\mathbf{r} v_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}). \quad (3.22)$$

Reemplazando ahora en la ec. (3.20), podemos escribir,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int_{K^3} d\mathbf{k} g(\mathbf{k}) v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-iE_{\mathbf{k}}t/\hbar}. \quad (3.23)$$

En esta expresión hemos reemplazado $\omega(k) = E_k/\hbar$. Así escrita, esta expresión es sugestiva. Recordemos nuestra expresión para la función de onda mezcla dada por la ec. (1.32), que corresponde al discreto,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N c_i \phi_i(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t}, \quad (3.24)$$

con,

$$\int_{R^3} d\mathbf{r} \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}) = \delta_{i,j}. \quad (3.25)$$

De la comparación de estas ecuaciones, notamos que se podrían obtener las ecs. (3.20) y (3.22), tomando las ecs. (3.24) y (3.25), y haciendo los siguientes reemplazos (y viceversa),

$$\begin{aligned} i &\leftrightarrow \mathbf{k}, \\ \sum_{i=1}^N &\leftrightarrow \int_{K^3}, \\ \delta_{i,j} &\leftrightarrow \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}). \end{aligned}$$

De esta manera, vemos que la función $v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, juega un papel análogo a las funciones de onda $\phi_i(\mathbf{r})$. Sin embargo, a diferencia de esta última, la función $v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ no representa

a una función de onda, pues no es de cuadrado integrable. A veces se señala en forma errónea que las funciones $v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ son de “normalización delta”, haciendo alusión a la ec. (3.22). Notemos que la unidad de la delta de Dirac resulta, $[\delta(a)] = 1/[a]$; lo cual indica que las unidades de $v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ tampoco son los de una función de onda.

Aclarado lo que las funciones $v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ *no son*, debemos explicar qué son estas funciones y cuál es su utilidad. Las funciones $v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ forman una base para construir el paquete de ondas. Cuando tenemos un problema físico particular en donde tenemos partículas en el continuo (partículas libres), trabajar con el paquete de ondas es muy complicado. Pero el uso de $v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ es mucho más simple. Luego, empleamos $v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ y si somos capaces de obtener un resultado genérico para cualquier valor de \mathbf{k} , entonces usando este resultado, realizamos la integral dada por la ec. (3.23).

Un conjunto interesante de problemas físicos, es aquel en que una partícula es arrojada al continuo. Por ejemplo, la ionización de un átomo, en que se desprende un electrón, originalmente ligado al átomo. Para tratar el problemas de la partícula que salta al continuo debemos emplear la expresión (3.21), *integrando* sobre los estados del continuo, pesando cada término $v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, con una función de peso $g(\mathbf{k})$ (ver ec. 3.23).

En lo que sigue de este capítulo, emplearemos la función $v_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, para dar cuenta de una partícula libre. Estos serán resultados aproximados. El carácter de la aproximación no está en el uso de estas funciones, sino en que una vez que lo resolvamos para estas funciones, deberíamos seguir adelante para dar cuenta del paquete de ondas. Este análisis es básicamente el *análisis de Fourier*: se estudia la respuesta de un sistema a ondas armónicas (que son las que tienen definida la frecuencia) y luego se integra el resultado completo.

3.2. Potencial constante a trozos

Comenzamos discutiendo el potencial más simple que a uno se le ocurre, que es la ausencia de potencial o partícula libre. El siguiente paso en dificultad, es el de un potencial constante a trozos. Dado que al igual que en mecánica clásica, el potencial está definido a menos de una constante, un potencial constante en todo el espacio es el problema de la partícula libre.

En la Fig. (3.1), vemos un ejemplo de un potencial constante a trozos. La expresión

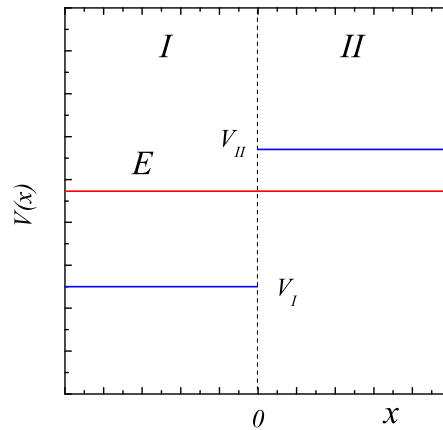


Figura 3.1: *En esta figura vemos un ejemplo de un potencial constante a trozos. Notamos que la energía E de la partícula puede ser mayor o menor al potencial, por lo cual diferenciamos dos regiones, con las letras I e II .*

analítica de este potencial está dado por,

$$V(x) = \begin{cases} V_I & \text{si } x < 0, \\ V_{II} & \text{si } x \geq 0. \end{cases} \quad (3.26)$$

Este potencial *no* es constante, sino que depende de x . Sin embargo, dentro de las regiones I ó II , el potencial es constante. En la Fig. (3.1), trazamos en forma arbitraria una línea para indicar la energía de la partícula, E . Hasta no resolver la ecuación de Schrödinger, no sabemos cuál es el valor de la energía. Sin embargo, sí podemos afirmar que la energía es mayor (región I) o menor (región II), que el potencial. Nos adelantamos a escribir que solo las energías del discreto toman valores determinados por la solución de la ecuación de Schrödinger. Pasemos a resolver la ecuación de Schrödinger para cada una de estas dos regiones. Si conocemos la solución en cada una de estas dos regiones, luego podemos vincular estas soluciones empleando las condiciones de contorno discutidas en la Sec. 1.4, y de este modo conocer la función de onda en todo el espacio. Comenzamos escribiendo la ecuación estacionaria de Schrödinger, que por conveniencia escribimos

como en la ec. (1.42),

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \varphi(x) = 0. \quad (3.27)$$

Reemplazamos ahora $V(x)$ por su valor según la expresión (3.26). Para ello, le agregamos a la función de onda un subíndice para indicar a qué región corresponde,

$$\frac{d^2\varphi_I(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V_I] \varphi_I(x) = 0. \quad (3.28)$$

$$\frac{d^2\varphi_{II}(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} [V_{II} - E] \varphi_{II}(x) = 0. \quad (3.29)$$

Notamos que los factores que multiplican a la función de onda son constantes y en el modo en que fueron escritas, son mayores que cero, pues $E > V_I$ y $E < V_{II}$. Esto nos permite escribir,

$$\frac{d^2\varphi_I(x)}{dx^2} + k^2 \varphi_I(x) = 0, \quad \text{con } k^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2} [E - V_I]; \quad (3.30)$$

$$\frac{d^2\varphi_{II}(x)}{dx^2} - \kappa^2 \varphi_{II}(x) = 0, \quad \text{con } \kappa^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2} [V_{II} - E]. \quad (3.31)$$

Estas ecuaciones son conocidas y sus soluciones se pueden escribir como,

$$\varphi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{ó} \quad \varphi_I(x) = \tilde{A} \text{sen}(kx) + \tilde{B} \text{cos}(kx); \quad (3.32)$$

$$\varphi_{II}(x) = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x} \quad \text{ó} \quad \varphi_{II}(x) = \tilde{C} \text{senh}(\kappa x) + \tilde{D} \text{cosh}(\kappa x). \quad (3.33)$$

El uso de los exponenciales o las funciones trigonométricas (o hiperbólicas) es equivalente y se emplea una u otra solución de acuerdo con la conveniencia del problema.

Vemos que si $E > V$, la solución es una onda plana; mientras que si $E < V$, tenemos exponenciales crecientes o decrecientes. Veremos ahora dos ejemplos de aplicación. Para ello, debemos recordar en primer lugar, lo discutido sobre las propiedades de la función de onda y de su derivada (Sec. 1.4).

3.3. Ejemplos de potenciales constantes a trozos

Discutiremos ahora algunos ejemplos de potenciales constantes a trozos.

3.3.1. Pozo infinito de potencial

En la Fig. 3.2, mostramos un pozo infinito de potencial. Analíticamente, podemos

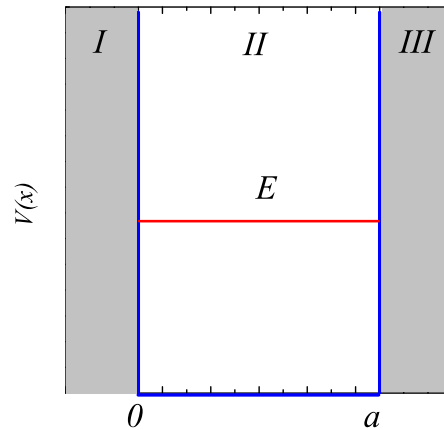


Figura 3.2: En esta figura mostramos un pozo infinito de potencial. La partícula sólo puede moverse dentro de la zona designada como II, que comienza en $x = 0$ y termina en $x = a$. En la zona II, el potencial es cero. Las regiones I e III, están marcadas en gris, pues en esa región no se puede encontrar la partícula y la función de onda en esas regiones es cero.

escribir este potencial como,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 \leq x \leq a, \\ \rightarrow \infty & \text{si } x < 0 \text{ ó } x > a. \end{cases} \quad (3.34)$$

De este modo, $V(x) \rightarrow \infty$, en las regiones I y III. Como en estas regiones $E < V$, debemos emplear la ec. (3.31), con $\kappa \rightarrow \infty$; por lo tanto, para que la función de onda no diverja, de las soluciones dadas en la ec. (3.33), debemos quedarnos con el exponencial decreciente para la región I ($x < 0$): $e^{\kappa x}$ (imponiendo que $C = 0$ para evitar la divergencia). Análogamente, nos quedamos con $e^{-\kappa x}$, para la región III. En ambos casos, la función de onda se hace cero, pues $\kappa \rightarrow \infty$. Tenemos entonces,

$$\varphi_I(x) = \varphi_{III}(x) = 0. \quad (3.35)$$

Para la región II , elegimos la solución de la forma,

$$\varphi_{II}(x) = \tilde{A} \operatorname{sen}(kx) + \tilde{B} \operatorname{cos}(kx). \quad (3.36)$$

Debemos pedir que,

$$\varphi_{II}(0) = \varphi_{II}(a) = 0,$$

por la continuidad de la función de onda. Como se trata de un potencial infinito, solo podemos pedir la continuidad de la función onda (ver Sec. 1.4). De la condición $\varphi_{II}(0) = 0$, tenemos que $\tilde{B} = 0$. Y de la condición $\varphi_{II}(a) = 0$, debemos pedir que,

$$ka = n\pi, \quad \text{con } n = 1, 2, 3, \dots$$

Ya que $V = 0$, recordemos que,

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E,$$

con lo cual,

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} n^2. \quad (3.37)$$

De este modo, los niveles de energía son discretos. La función de onda resulta,

$$\varphi_{II}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{a} x\right), \quad (3.38)$$

donde el factor $\sqrt{2/a}$, es el factor de normalización de la función de onda.

Repetiremos ahora el cálculo de este mismo problema, pero corriendo en $a/2$ el origen del eje x , con el fin de que el potencial sea simétrico o par. En la forma en que escribimos el potencial en la ec. (3.34), vemos que el potencial no es par. Las funciones de onda que obtuvimos no tienen la paridad definida: notemos que $\varphi_{II}(x)$ toma valores diferentes de cero, mientras que si reemplazamos $x \rightarrow -x$, nos vamos a la región I , donde $\varphi_I(x) = 0$, $\forall x \in I$.

Calculamos entonces el mismo problema, pero con otro origen para el eje x , como se muestra en la Fig. 3.3, con lo cual ahora el potencial es par. Es conveniente escribir al potencial en forma explícita nuevamente,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } -a/2 \leq x \leq a/2, \\ \rightarrow \infty & \text{si } x < -a/2 \text{ ó } x > a/2. \end{cases} \quad (3.39)$$

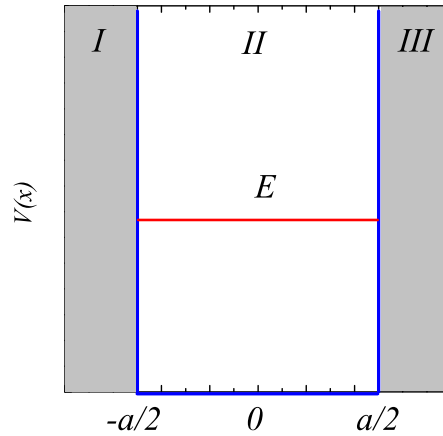


Figura 3.3: Igual que la Fig. (3.2), solo que el origen del eje x se encuentra desplazado, de modo que la región en la que el potencial es cero comienza en $x = -a/2$ y termina en $x = a/2$.

Notemos que en la Fig. 3.3, hemos redefinido el dominio de las regiones I , II y III . Prestando atención a estos nuevos dominios, valen las ecs. (3.35) y (3.36). Ahora, debemos pedir que,

$$\varphi_{II}(-a/2) = \varphi_{II}(a/2) = 0,$$

empleando que la función seno es impar y la función coseno es par, escribimos,

$$\begin{aligned} \varphi_{II}(-a/2) &= -\tilde{A} \operatorname{sen}(ka/2) + \tilde{B} \operatorname{cos}(ka/2) = 0, \\ \varphi_{II}(a/2) &= \tilde{A} \operatorname{sen}(ka/2) + \tilde{B} \operatorname{cos}(ka/2) = 0. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Es interesante notar que las incógnitas son \tilde{A} , \tilde{B} y k , donde la tercera ecuación es la condición de normalización. Sin embargo, el sistema que mostramos en las ecs. (3.40), es un sistema homogéneo, cuyo determinante es no nulo. Descartando la solución trivial ($\tilde{A} = \tilde{B} = 0$), debemos trabajar con dos familias de soluciones:

- $\tilde{A} \neq 0, \tilde{B} = 0$ ó
- $\tilde{A} = 0, \tilde{B} \neq 0$.

Para el primer caso, tenemos,

$$\text{sen}(ka/2) = 0 \Rightarrow \frac{ka}{2} = \ell\pi, \quad \ell = 1, 2, 3\dots$$

Mientras que para el segundo caso,

$$\text{cos}(ka/2) = 0 \Rightarrow \frac{ka}{2} = \left(\ell - \frac{1}{2}\right)\pi, \quad \ell = 1, 2, 3\dots$$

Notemos que se pueden reescribir estas expresiones de un modo más compacto. Para el primer caso,

$$\frac{ka}{2} = \ell\pi \Rightarrow ka = 2\ell\pi = n\pi, \quad n = \text{número natural par.}$$

Para el segundo caso,

$$\frac{ka}{2} = \left(\ell - \frac{1}{2}\right)\pi \Rightarrow ka = (2\ell - 1)\pi = n\pi, \quad n = \text{número natural impar.}$$

En resumen, tenemos,

- $\tilde{A} \neq 0, \tilde{B} = 0, ka = n\pi, \text{ con } n \text{ par.}$
- $\tilde{A} = 0, \tilde{B} \neq 0, ka = n\pi, \text{ con } n \text{ impar.}$

De este modo, para ámbos casos, podemos escribir la energía como,

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} n^2,$$

lo cual no debe ser ninguna sorpresa, pues el valor de la energía no puede depender del origen de las coordenadas. Notamos que el valor más bajo de la energía se tiene para $n = 1$.

Para las funciones de onda, tenemos para el primer caso,

$$\varphi_n^I(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen}\left(\frac{n\pi}{a} x\right), \quad n \text{ par}$$

Finalmente, para el segundo caso,

$$\varphi_n^P(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{cos}\left(\frac{n\pi}{a} x\right), \quad n \text{ impar}$$

donde reemplazamos el subíndice II por n , para dar cuenta del estado. Además, hemos agregado un superíndice I ó P , que indican la paridad de la función. Al haber corrido

el origen del sistema de coordenadas, el potencial es par y las funciones de onda o bien son pares o bien son impares. Vemos que el menor valor de la energía se obtiene para $n = 1$, cuya función de onda es,

$$\varphi_1^P(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi}{a} x\right).$$

Para concluir el análisis de este problema, en la Fig. 3.4, mostramos los primeros tres

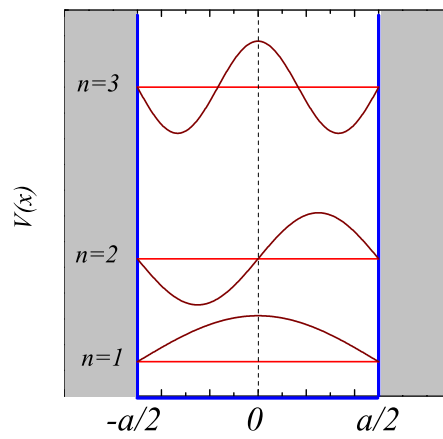


Figura 3.4: Mostramos en escala los primeros tres niveles de energía por medio de líneas rojas horizontales. Sobre cada línea, se grafica la función de onda correspondiente, para un instante dado. Notamos que las funciones con $n = 1$ y 3 son pares; mientras que para $n = 2$ la función es impar.

niveles de energía y sus funciones de onda para un instante dado. Vemos que a medida que consideramos niveles más altos, la separación entre los niveles se incrementa. Sobre la función de onda, vemos que todas tienen la paridad definida, como se describe en la figura.

3.3.2. Potencial escalón

En la Fig. 3.5, mostramos un potencial escalón. Supondremos que tenemos una partícula que viene desde la izquierda y encuentra el cambio abrupto en el potencial.

Diferenciamos dos situaciones según el valor de la energía de la partícula: *i.* que la energía E sea menor que la del escalón y *ii.* cuando la energía es mayor que el escalón, indicada por medio de E' , en la figura. Notemos que cuando $E < V_0$, el resultado clásico para este problema nos dice que la partícula choca contra el escalón de potencial y rebota en forma instantánea. Antes de seguir adelante, escribamos en forma explícita el potencial,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq 0, \\ V_0 & \text{si } x > 0. \end{cases} \quad (3.41)$$

Como la partícula que viene desde la izquierda es una partícula libre, su energía puede ser

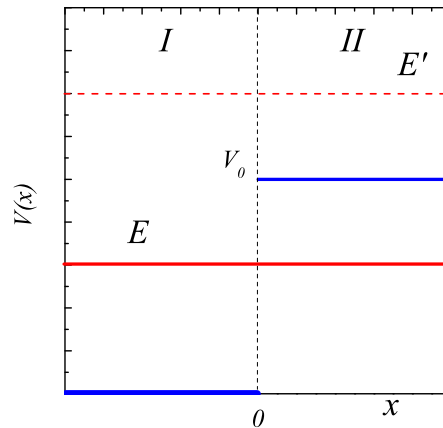


Figura 3.5: Aquí mostramos un potencial escalón, donde el potencial es cero para los $x < 0$ y vale $V_0 = \text{const.}$ para los $x \geq 0$. Notamos que la partícula viene de la izquierda y su energía puede ser o bien menor o bien mayor que V_0 .

cualquier valor positivo. En este problema, lo que nos interesa calcular es el coeficiente de reflexión y de transmisión. La definición de estos coeficientes resulta del flujo de probabilidades (ver Subsec. 1.3.1),

$$J_x(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^*(x, t) \frac{d\psi(x, t)}{dx} - \frac{d\psi^*(x, t)}{dx} \psi(x, t) \right). \quad (3.42)$$

Notemos que si tenemos estados puros, $\psi(x, t) = \varphi(x)e^{-i\omega t}$, el flujo de probabilidades no depende del tiempo y se puede escribir como,

$$J_x(x) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\varphi^*(x) \frac{d\varphi(x)}{dx} - \frac{d\varphi^*(x)}{dx} \varphi(x) \right). \quad (3.43)$$

Los coeficientes de reflexión y transmisión, resultan,

$$R = \frac{|J_{ref}(x)|}{|J_{inc}(x)|} \quad \text{y} \quad T = \frac{|J_{tra}(x)|}{|J_{inc}(x)|}, \quad \text{con} \quad R + T = 1, \quad (3.44)$$

donde $J_{inc}(x)$, $J_{ref}(x)$ y $J_{tra}(x)$, representan a los flujos de probabilidades incidente, reflejado y transmitido, respectivamente. Ya que la probabilidad se conserva, el flujo reflejado más el flujo transmitido debe ser igual a uno.

[i.] Comencemos cuando la energía E es menor que la del escalón ($E < V_0$). Como vemos en la Fig. 3.5, diferenciamos dos regiones, marcadas como I y II , en la figura. Escribimos la solución general para cada región como,

$$\varphi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (3.45)$$

$$\varphi_{II}(x) = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}, \quad (3.46)$$

con,

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad \text{y} \quad \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E). \quad (3.47)$$

En las ecs. (3.45) y (3.46), el término proporcional a A representa la partícula incidente, el proporcional a B representa la reflexión y aquellos de la región II representan la transmisión. Sin embargo, debemos poner $D = 0$, pues de lo contrario la función diverge. Pedimos ahora que la función de onda y su derivada, sean continuas en el origen:

$$\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \quad \text{y} \quad \frac{d\varphi_I}{dx}|_{x=0} = \frac{d\varphi_{II}}{dx}|_{x=0}. \quad (3.48)$$

Recordando que $D = 0$, la forma explícita de estas ecuaciones es,

$$A + B = C, \quad (3.49)$$

$$ikA - ikB = -\kappa C. \quad (3.50)$$

Tenemos dos ecuaciones y tres incógnitas (A , B y C). Como A está vinculada con el flujo incidente, escribimos las otras dos en función de ésta:

$$\frac{B}{A} = \frac{ik + \kappa}{ik - \kappa} \quad \text{y} \quad \frac{C}{A} = \frac{2ik}{ik - \kappa}. \quad (3.51)$$

Calculamos ahora mediante la expresión (3.43), los diferentes flujos, con lo que tenemos,

$$\begin{aligned} J_{inc}(x) &= \frac{\hbar k}{2mi} |A|^2, \\ J_{ref}(x) &= -\frac{\hbar k}{2mi} |B|^2, \\ J_{tra}(x) &= 0. \end{aligned} \quad (3.52)$$

De este modo, encontramos que,

$$R = 1 \quad \text{y} \quad T = 0. \quad (3.53)$$

Esto nos dice que no podemos tener la partícula en el semi-eje positivo de las x . En la Fig. 3.6, graficamos la parte real e imaginaria de la suma de las funciones de onda incidente y reflejada, junto a la función de onda transmitida. A los efectos de poder hacer estas figuras, fijamos arbitrariamente $A = 1$. Vemos que la función de onda en la región II no es nula. Se puede pensar que existe algún grado de contradicción entre el hecho de que la función de onda es no nula y que el coeficiente de transmisión es cero. En realidad, la probabilidad de encontrar la partícula no es la función de onda al cuadrado, sino la función de onda al cuadrado multiplicada por un elemento de distancia. Ese elemento de distancia por el Principio de Indeterminación, tiene asociado una incertidumbre en la cantidad de movimiento y por lo tanto en la energía cinética. De modo que si medimos la partícula en la región II , el Principio de Indeterminación no nos permite afirmar que su energía es menor a la del escalón. Si medimos la partícula en la región II y la incertidumbre en su energía nos permite pensar que su energía es mayor a $V_0 - E$, entonces no existe ninguna contradicción.

Debemos notar que estamos mostrando la parte estacionaria de la función de onda, $\varphi(x)$ y por lo tanto, no cambian con el tiempo. Resultaría trivial mostrar la función de onda $\psi(x, t) = \varphi(x)e^{-i\omega t}$, para diferentes instantes. Mostramos la Fig. 3.6, con el fin de visualizar la continuidad de la función de onda y de su derivada. También para mostrar el trozo de onda evanescente en la región II .

Notemos que en la Fig. 3.6, mostramos en la región I , la suma de las funciones de onda incidente y reflejada. En la Fig. 3.7, mostramos las ondas incidente y reflejadas en forma individual. Vemos que existe un desfase entre ambas ondas. Este desfase no tiene mayor contenido físico que el de la exigencia de que la función de onda y su derivada sean continuas. Notemos que a los efectos de la realizar la figura, elegimos

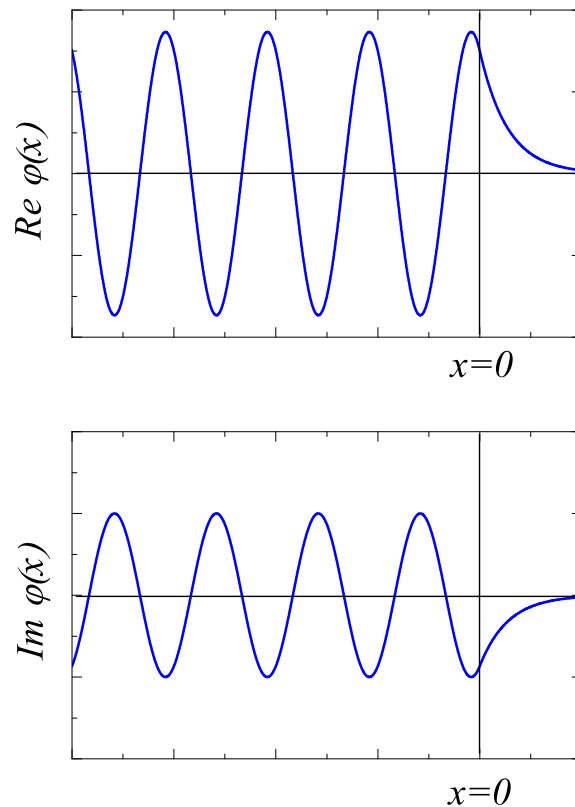


Figura 3.6: Mostramos las partes real e imaginaria de la función de onda $\varphi(x)$, en unidades arbitrarias. Notemos que el potencial escalón comienza en $x = 0$ y que la parte correspondiente a los $x < 0$ es la suma de las ondas incidente y reflejada.

$A = 0$, por lo tanto,

$$\varphi_{inc}(x) = \cos(kx) + i \sin(kx),$$

con lo cual, $Re(\varphi_{inc}(0)) = 1$ e $Im(\varphi_{inc}(0)) = 0$. Sin embargo, la función de onda está definida a menos de una fase, con lo cual podemos sustituir,

$$A \rightarrow Ae^{i\alpha},$$

con $\alpha = \text{constante}$. En ese caso, los valores de $\varphi_{inc}(0)$, serían diferentes y debería modificar los valores de B y C , pero la física del proceso sigue siendo la misma.

[ii.] Supongamos ahora que la energía E' es mayor que el escalón ($E' > V_0$). Repetimos los pasos de la situación anterior. Como vemos en la Fig. 3.5, diferenciamos dos

regiones, marcadas como I y II , y escribimos la solución general para cada región como,

$$\varphi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (3.54)$$

$$\varphi_{II}(x) = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}, \quad (3.55)$$

como en ambas regiones la energía es mayor que el potencial, la dependencia funcional de las funciones de onda es la misma. Sin embargo, los números de onda (k y k'), son diferentes:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E' \quad \text{y} \quad k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E' - V_0). \quad (3.56)$$

En las ecs. (3.54) y (3.55), el término proporcional a A representa la partícula incidente, el proporcional a B representa la reflexión y aquellos de la región II representan la transmisión. Imponemos la condición $D = 0$, pues este término representa una partícula moviéndose *hacia la izquierda*, lo cual ya está contemplado con el término proporcional a B , de la región I . Pedimos ahora que la función de onda y su derivada, sean continuas en el origen:

$$\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \quad \text{y} \quad \left. \frac{d\varphi_I}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\varphi_{II}}{dx} \right|_{x=0}. \quad (3.57)$$

Recordando que $D = 0$, la forma explícita de estas ecuaciones es,

$$A + B = C, \quad (3.58)$$

$$ikA - ikB = ik'C. \quad (3.59)$$

Tenemos dos ecuaciones y tres incógnitas (A , B y C). Como A está vinculada con el flujo incidente, escribimos las otras dos en función de ésta:

$$\frac{B}{A} = \frac{k - k'}{k + k'} \quad \text{y} \quad \frac{C}{A} = \frac{2k}{k + k'}. \quad (3.60)$$

Calculamos ahora mediante la expresión (3.43), los diferentes flujos, con lo que tenemos,

$$\begin{aligned} J_{inc}(x) &= \frac{\hbar k}{2mi} |A|^2, \\ J_{ref}(x) &= -\frac{\hbar k}{2mi} |B|^2, \\ J_{tra}(x) &= -\frac{\hbar k'}{2mi} |C|^2. \end{aligned} \quad (3.61)$$

De este modo, encontramos que,

$$R = \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2 \quad \text{y} \quad T = \frac{4kk'}{(k + k')^2}. \quad (3.62)$$

A partir de estas expresiones, es inmediato verificar que $R + T = 1$. No graficamos las funciones de onda, pues simplemente se trata de ondas sinusoidales. Pero sí vale la pena graficar los coeficientes R y T , como función de la variable adimensional:

$$\gamma \equiv \frac{E'}{V_0}, \quad \text{con} \quad \gamma \in (1, \infty).$$

Esto lo hacemos en la Fig. 3.8. Notamos que cuando $E' \cong V_0$ ($\gamma \cong 1$), tenemos que $R \cong 1$; mientras que cuando $E' \gg V_0$ ($\gamma \gg 1$), entonces que $T \cong 1$. Es fácil calcular el punto en que $R = T$, que resulta para $\gamma \simeq 1,03$.

Una vez resuelto este problema, es trivial resolver el caso en el que la partícula en lugar de “subir” un escalón, debe “bajar” un escalón, como se muestra en la Fig. 3.9. En este caso, ya que por hipótesis la partícula viene desde la izquierda, la partícula se encuentra con el escalón a menor energía, lo cual indica que debemos resolver la situación en que la energía de la partícula es mayor al potencial. Para resolver este problema, tomamos los resultados correspondientes al escalón con $E' > V_0$ y hacemos el reemplazo,

$$V_0 \rightarrow -V_0.$$

Calculamos los coeficientes de reflexión y de transmisión y mostramos los resultados en la Fig. 3.10. En esta figura vemos que el coeficiente de reflexión es muy pequeño. Esto es algo que no nos debe llamar la atención: físicamente si la partícula se refleja, es como si uno corriera hacia un precipicio, al llegar al borde uno saltara hacia el precipicio y rebotara. Clásicamente, la probabilidad de que esto ocurra es nula. Cuánticamente es pequeña, pero no nula. Para explorar un poco más este concepto, en la Fig. 3.10 (panel derecho), mostramos con más detalles el coeficiente de reflexión. Notamos que este coeficiente decrece a medida que aumenta γ . Ya que $\gamma = E'/|V_0|$, pensando que V_0 toma un único valor, el incremento de γ , significa un incremento de la energía. Esto es, cuanto más rápido corramos hacia el precipicio, es menos probable que rebotemos... Ahora bien, vemos que para $\gamma \cong 2$ ($E' \cong 2|V_0|$), tenemos que $R \cong 0,01$, lo que significa que una de cada cien partículas rebota. Sin lugar a dudas este es un efecto puramente cuántico.

3.3.3. Discusión adicional sobre el potencial escalón para $E < V_0$

El problema de la barrera de potencial en el caso en que la energía incidente es menor que la energía de la barrera, es un problema de apariencia sencilla y sin embargo, la experiencia muestra que es conceptualmente difícil. El contenido completo de este punto ya fue discutido. En esta subsección, agregaremos información y trataremos de poner el problema dentro de un contexto más amplio, con el fin de aclararlo un poco más. Estas dificultades, en realidad no son tales, sino que resultan de la tendencia a pensar en los problemas cuánticos en términos clásicos. Esta deficiencia conceptual, lleva inevitablemente a errores.

Si prestamos atención a la cuántica y a las hipótesis del problema, puede omitirse esta subsección sin culpa. En lo que sigue, mostraremos un pequeño zoológico de objeciones y situaciones a veces disconexas, con el fin de tratar de advertir sobre errores conceptuales. El contenido físico de lo que discutiremos en esta subsección, es abordado en casi todos los libros del tema en no más de seis o siete líneas. El objetivo principal de esta subsección no es la física del problema, sino exponer ciertos errores y omisiones en que se suele incurrir y que conducen a falsas contradicciones.

Consideremos la frase, justo después de la ec. (3.53): “Esto nos dice que no podemos tener la partícula en el semi-eje positivo de las x ”. En el marco de la Mecánica Cuántica, esto significa que no podemos *medir* la partícula en esta región. Una vez establecidas las hipótesis del problema, no debería ser necesario repetirlas a cada paso. Sin embargo, para evitar dudas digamos que no se puede medir la posición de la partícula en esta región, con la certeza de que su energía está en un rango menor al de la barrera. Debemos tener en mente al Principio de Indeterminación de Heisenberg, respecto de la posición y el impulso. Dado que el potencial es constante a trozos, es inmediato vincular la incertidumbre en el impulso con la incertidumbre en la energía. Ahora bien, incide una onda plana: conocemos con certeza (incertidumbre cero) la energía, y no podemos decir nada de la posición (incertidumbre infinita). Luego, si afirmamos que la partícula se encuentra en el semi-eje positivo de las x , donde la función de onda es no nula y olvidamos que la condición de certidumbre en la energía ya no vale, claramente crearemos encontrar una contradicción. La contradicción proviene de olvidar que ahora tenemos una incertidumbre en la energía.

Pongamos estas palabras en términos de un cálculo elemental: la función de onda en

la región del semi-eje positivo de las x toma un valor apreciable para un rango de las distancia del orden de $1/\kappa$, esto es,

$$\Delta x \sim \frac{1}{\kappa}.$$

Naturalmente, esta estimación resulta de observar el exponencial de la función de onda. El Principio de Incertidumbre nos dice que,

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar,$$

reemplazando Δx , tenemos,

$$\Delta p \geq \hbar \kappa,$$

con lo cual, la incertidumbre en la energía es,

$$\frac{(\Delta p)^2}{2m} \geq \frac{(\hbar \kappa)^2}{2m} = V_0 - E,$$

donde usamos la ec. (3.47). En resumen, tenemos que,

$$\Delta E \geq V_0 - E,$$

esto significa que la incertidumbre en la energía hace que si medimos la partícula en el semi-eje positivo de las x , no podemos afirmar que su energía es menor que la de la barrera. Una vez más entonces, en nuestro desarrollo de la barrera de potencial, *para una energía menor a la de la barrera* cuánticamente estamos afirmando un valor de la energía y bajo esa hipótesis, esto nos dice que no podemos tener la partícula en el semi-eje positivo de las x . Si *mido* la partícula en el semi-eje positivo de las x , esto nos dice que no podemos tener una energía menor a la de la barrera con certeza. Sobre estas dos posibilidades, en la subsección anterior solo discutimos la primera de ellas y la segunda la acabamos de discutir. El tener la función de onda con un valor no nulo en una región del semi-eje positivo de las x , habilita la segunda posibilidad.

Más adelante discutiremos lo que se da en llamar el *colapso de la función de onda* (ver Sec. 5.1.3). Ya que aún no vimos este punto, desarrollamos esta discusión empleando el Principio de Indeterminación. Aún así, es importante nombrar que el Principio de Indeterminación no es un postulado, sino un resultado. El postulado pertinente a este problema en Mecánica Cuántica, tiene que ver con que *la acción de medir, modifica la función de onda*. Si mido la partícula en el semi-eje positivo de las x , su función de onda

va a ser, a partir de la medida, diferente a la que calculamos. No desarrollaremos este punto, pero es conveniente advertir sobre este tema.

Un tratamiento interesante de este problema se puede encontrar en el libro de Mecánica Cuántica de Messiah, Ref. [10]. Con un tratamiento más riguroso del que mostramos, ahí se trabaja con un paquete de ondas. En ese caso, el tiempo juega un papel importante, mientras que con ondas planas se puede trabajar con ondas estacionarias. Al trabajar con un paquete de ondas, se encuentra que el rebote en la barrera no es instantáneo, sino que tarda un cierto intervalo de tiempo en rebotar. Resulta como si la partícula empleara un cierto tiempo en la región del semi-eje positivo de las x , antes de regresar. En la Mecánica Cuántica abundan estas situaciones contraintuitivas. Sólo se puede afirmar que una partícula se encontraba en un lugar, si es medida en ese lugar. Un buen ejemplo de esto es el de la doble rendija: el electrón es una partícula y debe pasar por una de las dos rendijas. Si medimos por qué rendija pasa, desaparece el patrón de interferencia. Si no lo hacemos, existe un patrón de interferencia. En el caso del potencial escalón, si mido la partícula en la región de los x -positivos, ya no podemos afirmar que su energía es menor a la barrera. Este es un comportamiento puramente cuántico, ya que en términos clásicos la acción de la medida no afecta al objeto observado.

Luego de todo esto, alguien aún puede preguntar: "si dijimos que el módulo al cuadrado de la función de onda por un elemento de longitud (o volumen), es la probabilidad de encontrar la partícula en un entorno del elemento de longitud, y de la figura veo que tengo un valor no nulo de la función de onda para los x -positivos, ¿por qué no podemos encontrar la partícula en esa región?" Quien aún considera esta como una pregunta válida, le sugiero que haga una pausa y calcule dicha probabilidad.

.....

Quienes intentaron calcular dicha probabilidad, debieron encontrarse con que la función de onda no es de cuadrado integrable y por lo tanto, la interpretación de que $|\psi(x)|^2 dx$ es un diferencial de probabilidad, no es válida. Repasemos este punto. Dada una función de onda de cuadrado integrable, la probabilidad de encontrar la partícula en algún punto x dentro del intervalo (a, b) , es,

$$\mathcal{P}_{(a,b)} = \int_a^b dx |\psi(x)|^2.$$

Esta expresión tiene sentido, sólo si se cumple,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = 1.$$

...y en el caso del potencial escalón, esto no se cumple.

Construyamos lo que se da en llamar un *toy model* (modelo de juguete): realizamos algunas simplificaciones para poner en evidencia un punto. En este *toy model*, tomamos el potencial escalón y para los $x < 0$, pensamos que la partícula está restringida a una longitud L . Además, llamaremos Δa a la longitud para los $x \geq 0$ en los que la función de onda es no nula. La longitud L debe ser mucho mayor que Δa , para que el modelo de cuenta del problema del potencial escalón. Pero debe ser un número finito, para que la función sea de cuadrado integrable. Nuestro objetivo es poder estimar el valor de $\mathcal{P}_{\Delta a}$. Pedimos entonces que,

$$L \gg \Delta a.$$

En este *toy model*, no nos preocupamos mucho por las condiciones de contorno. Buscamos ahora la constante de normalización. Antes de normalizar, sabemos que para los $x < 0$, tenemos una onda plana, para la cual $|\psi(x)|^2 = c_1$, con $c_1 = \text{constante}$. Para los $x \geq 0$, sabemos que la onda evanescente va a cumplir con $|\psi(x)|^2 \leq c_1, \forall x \geq 0$. Ya que normalizaremos la función de onda, en lo que sigue tomaremos $c_1 = 1$ (en unidades arbitrarias), sin pérdida de generalidad. Dado que por construcción Δa es pequeño frente a L , podemos aproximar la constante de normalización \mathcal{C} , por,

$$\mathcal{C} \cong \frac{1}{\sqrt{L + \Delta a}}.$$

Por simplicidad, en lugar de calcular $\mathcal{P}_{\Delta a}$, calcularemos una cota superior para dicha probabilidad. Para ello, pensaremos que para los $x \geq 0$, se cumple también que, $|\psi(x)|^2 = 1$. Llamamos ahora *cota* $\mathcal{P}_{\Delta a}$, a dicha cota, con lo cual tenemos,

$$\text{cota } \mathcal{P}_{\Delta a} = \frac{\Delta a}{L + \Delta a}.$$

La condición $L \gg \Delta a$, implica que $\text{cota } \mathcal{P}_{\Delta a} \approx 0$ y como se trata de una cota superior, tenemos finalmente que,

$$\mathcal{P}_{\Delta a} \approx 0.$$

Como conclusión, un dibujo de una función de onda en una región acotada del espacio, junto con el olvido de que la función de onda no estaba normalizada, nos indujo a creer

que la partícula podía estar en $x > 0$ con $E < V_0$. Usando un *toy model*, encontramos que la normalización de la función de onda induce a pensar que la partícula no puede estar en $x > 0$.

Por medio del *toy model*, solo quisimos mostrar cómo el recordar una hipótesis básica, altera el resultado del problema. La situación física real, es la de un paquete de ondas llegando a la barrera de potencial y reflejándose completamente. Al hacerlo, notamos un retardo en la reflexión, que interpretamos como que la partícula empleó cierto tiempo en la región $x > 0$. Pero si medimos la partícula en esa región, ya no podremos afirmar que su energía era menor que la de la barrera. Los conceptos de que solo podemos afirmar lo que medimos y que el acto de medir altera al objeto observado, son pilares de la Mecánica Cuántica que resultan indispensables para interpretar correctamente este problema.

Antes de terminar esta subsección, es conveniente comentar un fenómeno clásico que posee una formulación matemática muy similar a de la partícula que choca con una barrera con energía menor a la de la barrera. Se trata de una onda electromagnética que choca con un metal ideal. En este caso, dentro del metal existe también una onda evanescente (esto es, el exponencial decreciente). Si el metal no disipa energía, el valor medio del vector de Poynting (que nos da el flujo de energía), es cero sobre la superficie. Esto nos dice que entra tanta energía como la que sale. Es posible medir la onda evanescente. De hecho, si hay disipación, hay un flujo neto de energía entrante y la superficie se calienta. ¿Por qué aquí se puede medir la onda evanescente? Simplemente porque este no es un fenómeno cuántico, no vale el Principio de Indeterminación, las ondas se pueden medir y la medida no altera al objeto observado. No hay que perder de vista las hipótesis de la Mecánica Cuántica. En Mecánica Cuántica la función de onda no puede ser observada. De hecho, su física es invariante ante un cambio de fase, ya que lo que tiene sentido físico es un número (el módulo al cuadrado de la función de onda, multiplicado por un elemento de volumen), que representa una probabilidad. Probabilidad de encontrar una *partícula*, no a una onda. Clásicamente, la partícula rebota sobre la barrera en forma instantánea. En resumen, la discusión de este problema nos permite resaltar que la física clásica de partículas y ondas nos es útil como punto de comparación, pero sería un grave error el creer que un problema cuántico debe comportarse igual que un problema clásico cuando su matemática guarda algunas similitudes.

Como comentario final para esta subsección, vale la pena indicar que en la física cuántica primitiva, se discutía el concepto hoy anacrónico de la “dualidad onda–partícula”. No existe tal dualidad, sino que el comportamiento cuántico es una categoría en sí misma. La teoría cuántica, sin embargo, requiere de la física clásica, ya que el instrumento de medida es un objeto clásico. El acto de medir altera la función de onda como señalamos arriba. La luz se comporta como una onda cuando analizamos su difracción y como una partícula cuando estudiamos el efecto fotoeléctrico. No podemos entender el efecto fotoeléctrico con ondas de luz, ni la difracción con fotones. Lo que subyace es la física cuántica y la variable relevante es qué medimos.

3.3.4. Barrera de potencial: el efecto túnel

En la Fig. 3.11, vemos una barrera de potencial; esto es, potencial cero en todo el espacio, menos sobre un segmento de ancho a , en donde el potencial vale V_0 . La forma analítica de este potencial la podemos escribir como,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \text{ ó } x > 0. \\ V_0 & \text{si } 0 \leq x \leq a. \end{cases} \quad (3.63)$$

Vemos que en la figura dibujamos dos energías: la primera, $E < V_0$, mientras que para la segunda, $E' > V_0$. Nos concentramos solo en el primer caso, pues clásicamente, en ese primer caso esperamos que la partícula no pase la barrera. Veremos que cuánticamente, existe la posibilidad de que la partícula logre atravesar la barrera. Este hecho se conoce como “efecto túnel” y tiene una enorme importancia en astrofísica: la fusión del hidrógeno en una estrella ocurre ya que la barrera de repulsión coulombiana entre los átomos de hidrógeno es superada por efecto túnel.

Vayamos al problema que nos ocupa. En la Fig. 3.11, diferenciamos tres regiones, I , II y III . Las funciones de onda para cada una de esas regiones, se pueden escribir como,

$$\varphi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (3.64)$$

$$\varphi_{II}(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}, \quad (3.65)$$

$$\varphi_{III}(x) = Fe^{ikx}. \quad (3.66)$$

Notemos que en $\varphi_I(x)$, el término proporcional a A , es la partícula incidente, el proporcional a B , la partícula reflejada, el proporcional a F es la partícula transmitida, donde como ya discutimos no tiene sentido incluir un término de una partícula moviéndose hacia la izquierda en esta región. Finalmente, en la región II , debemos incluir tanto al exponencial creciente, como al decreciente, pues como se trata de una región finita en el espacio, un exponencial creciente no implica ninguna divergencia.

Sobre los valores de k y κ , debemos notar que el valor de k es el mismo tanto en la región I , como en la región III . Sus valores son,

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad \text{y} \quad \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E). \quad (3.67)$$

Pedimos ahora que la función de onda y su derivada, sean continuas en el origen y en $x = a$:

$$\begin{aligned} \varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) & \quad \text{y} \quad \frac{d\varphi_I}{dx}|_{x=0} = \frac{d\varphi_{II}}{dx}|_{x=0}, \\ \varphi_{II}(a) = \varphi_{III}(a) & \quad \text{y} \quad \frac{d\varphi_{II}}{dx}|_{x=a} = \frac{d\varphi_{III}}{dx}|_{x=a}. \end{aligned} \quad (3.68)$$

Empleando estas igualdades, junto a de las expresiones (3.64)–(3.66), obtenemos cuatro ecuaciones con cinco incógnitas (A , B , C , D y F). Como en el caso del potencial escalón, expresamos las cuatro constantes B , C , D y F , en función del flujo incidente que está vinculado con A . Desde el punto de vista algebraico, esto es muy laborioso. No mostraremos los detalles de este cálculo, sino que expresaremos directamente el resultado final para los coeficientes de reflexión y de transmisión:

$$R = \frac{V_0^2 \sinh^2(a\kappa)}{V_0^2 \sinh^2(a\kappa) + 4E(V_0 - E)}, \quad (3.69)$$

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \sinh^2(a\kappa) + 4E(V_0 - E)}. \quad (3.70)$$

Introducimos ahora las variables adimensionales,

$$\gamma \equiv \frac{E}{V_0}, \quad (3.71)$$

$$\beta \equiv a \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}. \quad (3.72)$$

Notemos que a partir de estas definiciones, podemos escribir,

$$a\kappa = \beta \sqrt{1 - \gamma}.$$

A partir de estas definiciones, reescribimos los coeficientes como,

$$R = \frac{\sinh^2(\beta \sqrt{1-\gamma})}{\sinh^2(\beta \sqrt{1-\gamma}) + 4\gamma(1-\gamma)}, \quad (3.73)$$

$$T = \frac{4\gamma(1-\gamma)}{\sinh^2(\beta \sqrt{1-\gamma}) + 4\gamma(1-\gamma)}. \quad (3.74)$$

En la Fig. 3.12, graficamos los coeficientes de reflexión y de transmisión en función de γ , para diferentes valores de β . La variable γ , indica la energía de la partícula. Por otra parte, la variable β , es proporcional a:

$$\beta \sim a \sqrt{V_0}.$$

El sentido común nos dice que si la barrera es más ancha o si el potencial es más alto, el coeficiente de transmisión debe ser más pequeño. Esto lo comprobamos en la figura.

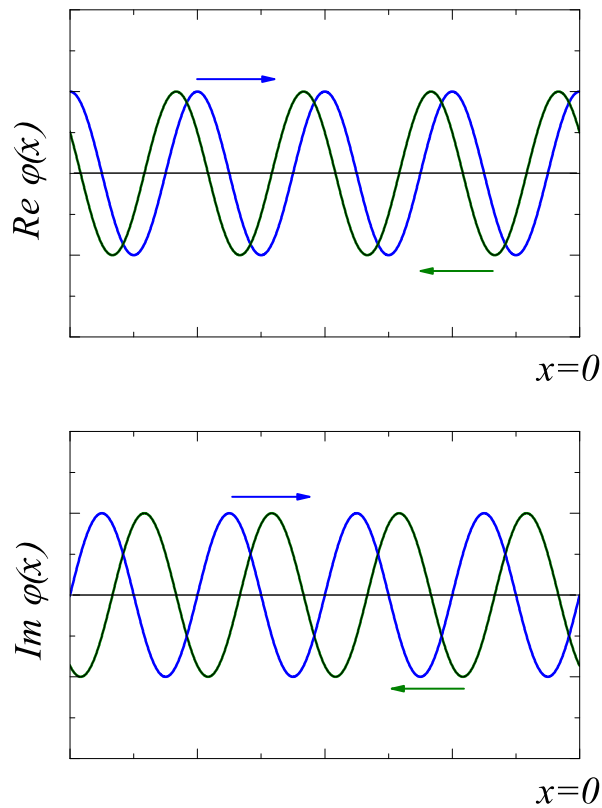


Figura 3.7: En esta figura separamos la parte incidente de la reflejada. Si bien incluimos una flecha para indicar el sentido de la onda, ya que estamos graficando la parte estacionaria de la función de onda, $\varphi(x)$, esta curva no depende del tiempo. Se emplearon unidades arbitrarias, pero la escala del eje y es la misma para los dos paneles y además, es igual al de los paneles de la Fig. 3.6.

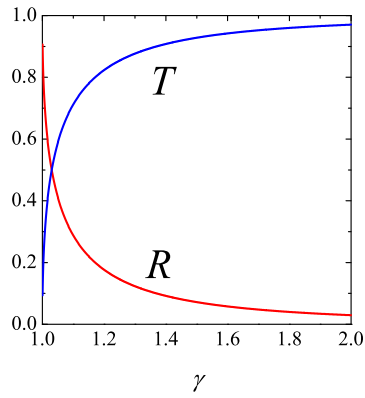


Figura 3.8: Coeficientes de reflexión y de transmisión cuando $E' > V_0$, en función de la variable adimensional $\gamma = E'/V_0$.

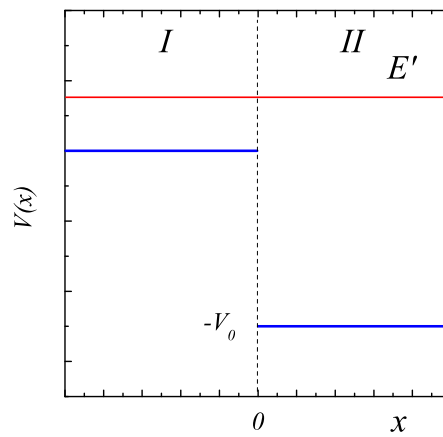


Figura 3.9: Potencial escalón reemplazando $V_0 \rightarrow -V_0$. En este caso, solo podemos tener una energía mayor al potencial.

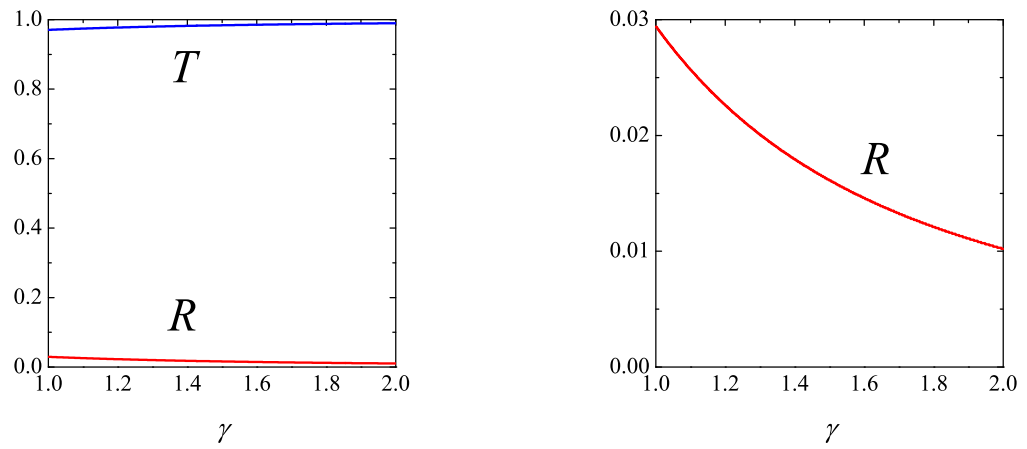


Figura 3.10: *Panel izquierdo: coeficientes de reflexión y de transmisión en las condiciones de la Fig. 3.9. Panel derecho: Detalle del coeficiente de reflexión según las condiciones de la Fig. 3.9.*

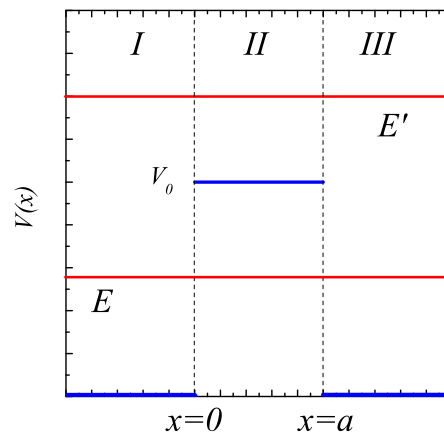


Figura 3.11: *Barrera de potencial. En la figura, mostramos dos posibles valores de la energía de la partícula: E , cuando la energía es menor a la barrera y E' , cuando es mayor.*

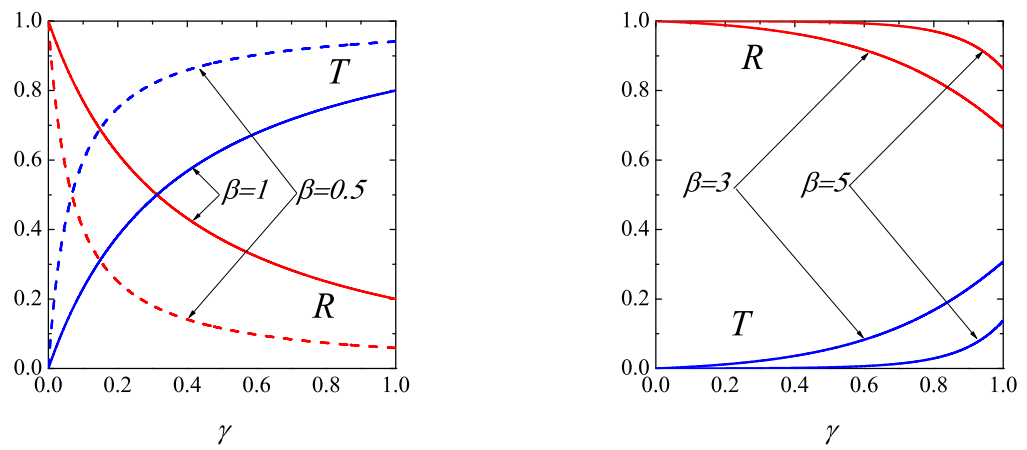


Figura 3.12: Coeficientes de reflexión y de transmisión en función de $\gamma = E/V_0$, para el caso $E < V_0$ y para cuatro valores de la variable beta: $\beta = 0.5$ y 1 , para el panel de la izquierda y $\beta = 3$ y 5 , para el panel de la derecha.

CAPÍTULO 4

El oscilador armónico

Introducción

Un oscilador armónico es un problema muy estudiado tanto en la mecánica clásica, como cuántica. Desde el punto de vista clásico, un oscilador armónico es el problema de una partícula sometida a la acción de una fuerza restitutiva que es directamente proporcional a la distancia que se aparta de un punto, llamado de equilibrio, donde la fuerza es cero. Tanto en mecánica clásica, como en la mecánica cuántica, existen muchas situaciones físicas en las que la fuerza se comporta como una fuerza armónica. Debido a ello, nos interesa resolver el problema. Por otra parte, no podemos dejar de indicar que se trata de un problema que tanto clásica, como cuánticamente, tiene una solución exacta.

Los problemas que admiten una solución exacta, deben ser discutidos. El riesgo, sin embargo, es que se crea que una buena solución, lo es solo si se puede resolver en forma exacta. No es así. De hecho, la mayoría de los problemas deben resolverse en forma aproximada. Sin embargo, el conocer aquellos problemas que pueden resolverse en forma exacta tiene varias ventajas. Supongamos que tenemos un problema algo complejo, pero posee un potencial que para un cierto rango de energías se parece al del oscilador. Si conocemos la solución para el oscilador, tendremos alguna idea de cómo deben ser las soluciones del problema más complejo. Es más, en el Cap. 6, cuando veamos la Teoría de Perturbaciones, veremos un método para construir la solución de un problema complejo, partiendo del resultado exacto de un problema similar.

4.1. Solución de la ecuación de Schrödinger para el oscilador

Estudiamos el problema del oscilador armónico en una dimensión, cuyo potencial viene dado por,

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, \quad (4.1)$$

donde ω es la frecuencia angular, vinculada con la intensidad de la fuerza armónica. Al ver este potencial, lo primero que notamos es que es par. Por lo tanto, las funciones de onda que resultan de resolver la ecuación de Schrödinger para este potencial tienen paridad definida (par o impar).

Escribimos ahora la ecuación de Schrödinger estacionaria para este problema,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \varphi(x) = E \varphi(x). \quad (4.2)$$

Es algo laborioso, pero esta ecuación admite una solución exacta. En lo que sigue, para obtener dicha solución seguiremos un procedimiento que puede verse como forzado, en el sentido de que los cambios y sustituciones que haremos no son evidentes. Simplemente, una vez que se logró resolver el problema, se fueron explorando diferentes caminos para encontrar la solución, hasta encontrar aquel más simple. En primer lugar, realizamos el siguiente cambio de variable,

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad (4.3)$$

de este modo, la coordenada ξ es adimensional. En términos de esta variable, la ec. (4.2), se escribe,

$$\frac{d^2\varphi(\xi)}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2) \varphi(\xi) = 0, \quad (4.4)$$

donde,

$$\lambda \equiv \frac{2E}{\hbar\omega}.$$

Notemos que si $\xi \gg 1$, podemos escribir,

$$\frac{d^2\varphi(\xi)}{d\xi^2} \approx \xi^2 \varphi(\xi), \quad (4.5)$$

que tiene como solución *aproximada*,

$$\varphi(\xi) \approx A e^{-\xi^2/2} + B e^{\xi^2/2}.$$

Para que la función de onda no diverga cuando $|x| \rightarrow \infty$, debemos poner $B = 0$. Esto *sugiere* que debemos buscar una solución de la forma,

$$\varphi(\xi) = \chi(\xi)e^{-\xi^2/2}. \quad (4.6)$$

Al reemplazar esta expresión en la ec. (4.4), tenemos,

$$\frac{d^2\chi}{d\xi^2} - 2\xi\frac{d\chi}{d\xi} + (\lambda - 1)\chi = 0. \quad (4.7)$$

Para resolver esta ecuación, proponemos una serie de la forma,

$$\chi(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j. \quad (4.8)$$

Como se trata de una serie infinita, esta expresión no es un polinomio, sino cualquier función. Reemplazamos ahora esta serie en la ec. (4.7), y encontramos,

$$\sum_{j=0}^{\infty} [(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (\lambda-1)a_j] \xi^j = 0. \quad (4.9)$$

Esto debe cumplirse **para todo valor de ξ** . El único modo en que esto puede suceder es que los coeficientes que multiplican a cada ξ^j , sean todos idénticamente nulos, esto es,

$$(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (\lambda-1)a_j = 0, \quad \forall j. \quad (4.10)$$

Obtenemos entonces la siguiente relación de recurrencia:

$$a_{j+2} = \frac{2j+1-\lambda}{(j+1)(j+2)} a_j. \quad (4.11)$$

En principio, empleando esta relación en la ec. (4.8), encontramos la función $\chi(\xi)$, con la cual encontraríamos finalmente la función de onda ($\varphi(\xi) = \chi(\xi)e^{-\xi^2/2}$). Sin embargo y como hemos señalado ya al menos una vez, el obtener una solución de la ecuación de Schrödinger, no significa que ya tengamos la solución física del problema. Además, debemos asegurarnos de que la misma sea de cuadrado integrable.

Notamos que si $j \gg 1$ tenemos,

$$a_{j+2} \approx \frac{2}{j} a_j,$$

al reemplazar esta expresión en la suma (ec. 4.8), encontramos que,

$$\chi(\xi) \approx e^{\xi^2},$$

con lo cual,

$$\varphi(\xi) = \chi(\xi)e^{-\xi^2/2} \approx e^{\xi^2/2},$$

que no es de cuadrado integrable. Para serlo, debemos cortar la serie dada por la ec. (4.8). La serie se transforma entonces en un polinomio y cualquier polinomio (sin importar el orden), multiplicado por $e^{-\xi^2/2}$, es de cuadrado integrable. Para cortar la serie, pedimos que exista un j_{max} , tal que en la ec. (4.11),

$$2j_{max} + 1 - \lambda = 0. \quad (4.12)$$

Renombramos j_{max} , como,

$$j_{max} \equiv n.$$

Recordando ahora la definición de $\lambda (= 2E/(\hbar\omega))$, podemos escribir,

$$\boxed{E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \text{con } n = 0, 1, \dots} \quad (4.13)$$

De este modo, encontramos que la energía del oscilador está cuantificada, tomando valores discretos. Puede verificarse rápidamente que los niveles de energía están equiespaciados.

Consideremos ahora la función de onda. Debemos notar que la relación de recurrencia dada por la ec. (4.11), no está dada para valores sucesivos de a_j , sino que va de dos, en dos. De este modo, debemos considerar la relación de recurrencia para los valores pares de j y por otra parte, para los impares. Sin embargo, la condición $2j_{max} + 1 - \lambda = 0$, se aplica a un único valor de j . Al resolver el problema, debemos dar como condiciones de contorno los valores de a_0 y a_1 . Estos dos coeficientes, no pueden ser simultáneamente no nulos. Uno de ellos deberá ser nulo y el otro no. Esto determina la paridad de la función de onda. La relación de recurrencia vale para los dos. Supongamos que $a_0 \neq 0$, pero $a_1 = 0$. La relación de recurrencia nos dice que *todos los a_j con j impar, son nulos*. Como es el polinomio lo que determina la paridad de la función de onda, pues el exponencial es par, si las potencias de ξ son pares, el polinomio es una función par. La constante a_0 , se fija por normalización. Resumamos este punto:

- $a_0 \neq 0$ y $a_1 = 0$: la función de onda es par.
- $a_0 = 0$ y $a_1 \neq 0$: la función de onda es impar.

Ya tenemos todos los elementos para encontrar la función de onda. Consideramos las combinaciones de los coeficientes $a_0 \neq 0$ y $a_1 = 0$ ya descritos y encontramos que el polinomio que resulta de la suma, son los polinomios de Hermite:

$$\chi(\xi) = \sum_{j=0}^n a_j \xi^j = H_n(\xi). \quad (4.14)$$

Reemplazando ahora en la función de onda, tenemos finalmente:

$$\varphi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad (4.15)$$

Hemos incluido la constante de normalización, cuya deducción dejamos como ejercicio.

De este modo, hemos podido calcular las energías y las funciones de onda en forma exacta para el oscilador armónico en una dimensión. En la próxima sección, haremos un análisis numérico de estos resultados analíticos. En el caso particular del oscilador armónico, su extensión a tres dimensiones es muy simple. Analizaremos este problema en la Sec. 7.4 del Cap. 7.

4.2. Análisis numérico del oscilador

El paso de un conjunto de expresiones analíticas a su evaluación y análisis numérico, no es trivial. En esta sección, tomaremos como ejemplo los resultados analíticos del oscilador, para ejemplificar cómo analizar numéricamente los mismos. En primer lugar y por conveniencia, sintetizamos las expresiones analíticas que emplearemos. En una dimensión, estudiamos al oscilador armónico, cuyo potencial viene dado por,

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, \quad (4.16)$$

donde ω es la frecuencia angular, vinculada con la intensidad de la fuerza armónica. La solución de la ecuación estacionaria de Schrödinger resulta,

$$\varphi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad (4.17)$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4.18)$$

Con

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x.$$

Para evaluar numéricamente estas expresiones, necesitamos contar con la forma analítica de los polinomios de Hermite. Una alternativa es elegir los valores de n que deseamos calcular y buscar sus expresiones de tablas. Otra opción más general es emplear la expresión:

$$H_n(\xi) = n! \sum_{m=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \frac{(-1)^m}{m!(n-2m)!} (2\xi)^{n-2m}. \quad (4.19)$$

Notemos que en esta expresión el símbolo $\lfloor \cdot \rfloor$, indica el mínimo de la parte entera:

$$\lfloor \frac{n}{2} \rfloor = \begin{cases} n/2 & \text{si } n \text{ es par,} \\ (n-1)/2 & \text{si } n \text{ es impar.} \end{cases} \quad (4.20)$$

Ahora queremos hacer gráficos del potencial, mostrando los niveles de energía; de las funciones de onda para analizar su paridad y de las funciones de onda al cuadrado, para entender dónde es más probable encontrar la partícula. Para ello, debemos darle valores numéricos a m y ω y establecer un rango de variación para la coordenada x . Esto no es algo trivial. Saliendo de la mecánica cuántica, supongamos que tenemos un problema convencional de tiro oblicuo. Imaginemos un cañón que dispara una bala con un determinado ángulo y el problema nos pide que calculemos la velocidad inicial conociendo el alcance, suponiendo que todo ocurre en una superficie plana. Si nos piden que nosotros mismos fijemos el alcance, ¿qué número colocaríamos? Si ponemos 18.000km, sabemos que para esa distancia no podemos ignorar la curvatura de la Tierra. Si colocamos 3mm, sabemos que un cañón tiene un alcance algo mayor. Si ponemos 1.000m, nos parecerá bien. En este caso, poseemos un cierto conocimiento empírico de lo que ocurre y eso nos permite elegir el alcance empleando nuestro sentido común.

Pero, ¿cómo elegir m , ω y el rango de variación de x ?, ya que no tenemos un conocimiento de estas variables basado en nuestra experiencia cotidiana. Bueno, sabemos algo de la fenomenología del átomo de hidrógeno: la partícula involucrada en la emisión de radiación electromagnética es el electrón y la energía necesaria para arrancar el electrón del átomo es de 13,6 eV. Para el oscilador, sabemos que la unidad de energía la expresamos como $\hbar\omega$ (ver ec. 4.18). De este modo, podemos pedir que $\hbar\omega$ tome un valor del orden de 2eV. Pueden ser 0.5eV o 7eV; lo importante es tener una idea del orden de magnitud. Como en el átomo de hidrógeno tenemos un electrón como responsable

de la emisión, podemos tomar la masa del electrón. Demos el valor de varias constantes y fijemos el valor de la masa, ω , y el rango de variación de x . Comencemos con algunas constantes y tengamos especial cuidado en las unidades:

$$\begin{aligned}\hbar &= 6,582119569 \times 10^{-16} \text{ eV}\cdot\text{s}, \\ c &= 299.792.458 \text{ m/s}, \\ m_e &= 0,510998950 \times 10^6 \text{ eV}/c^2.\end{aligned}\quad (4.21)$$

Consideraremos diferentes valores para ω . Notemos que,

$$\text{si } \hbar\omega = 2 \text{ eV} \quad \Rightarrow \quad \omega \cong 3,04 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}, \quad (4.22)$$

(vemos que ω tiene unidades de s^{-1}). Para establecer el rango de variación de x , podemos analizar la amplitud de oscilación clásica, del siguiente modo,

$$\frac{1}{2}m\omega^2 A^2 = E_T,$$

donde A es la amplitud y E_T es la energía total. Naturalmente, estamos diciendo que el $x_{max} = A$, tiene lugar cuando toda la energía, es energía potencial ya que para ese valor de la coordenada x que es el punto de retorno, la velocidad es cero. De esta manera, tenemos,

$$A = \left(\frac{2E_T}{m\omega^2} \right)^{1/2}.$$

Empleando ahora la ec. (4.18) para la energía y reemplazando con la masa del electrón expresada en eV (para lo cual debemos agregar un c^2), tenemos una amplitud dependiente de n , de la forma,

$$A_n = \left(\frac{2\hbar(n + 1/2)c^2}{m_e\omega} \right)^{1/2}. \quad (4.23)$$

Si consideramos el valor de ω , de la ec. (4.22) y $n = 0$, tenemos,

$$A_0 \cong 1,95 \times 10^{-10} \text{ m}.$$

Para $n = 50$,

$$A_{50} \cong 1,96 \times 10^{-9} \text{ m}.$$

Nos conviene emplear una unidad de longitud más adecuada a nuestro problema. Empleemos el nanómetro ($1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$). De este modo,

$$A_0 \cong 0,195 \text{ nm},$$

$$A_{50} \cong 1,96 \text{ nm}.$$

Mientras que para el caso clásico la partícula está restringida a la región $-A \leq x \leq A$, en el caso cuántico la función de onda se extiende un poco más. Sin embargo, el estudio de la amplitud clásica nos permite conocer el orden de magnitud de la variación de x .

Contamos ya con todos los elementos para comenzar con nuestro estudio. Comencemos en la Fig. (4.1), mostrando el potencial y los niveles de energía. El objetivo de esta figura es simplemente ayudar en la comprensión de las figuras siguientes. Notemos que los valores numéricos que se muestran son realistas, en el sentido de que se corresponden con un problema concreto: un electrón sujeto a una fuerza armónica cuya frecuencia angular es $\omega = 2eV/\hbar$. Por medio de líneas horizontales a rayas rojas, mostramos diferentes niveles de energía según la expresión $E_n = h\nu(n + 1/2)$. Notar que $\hbar\omega = h\nu$. Estos niveles de energía están en escala y su separación es de $h\nu$. La intersección del potencial con estos niveles, da el valor de la amplitud clásica A_n , ec. (4.23).

En la Fig. (4.2), analizamos cómo depende el potencial y los niveles de energía para diferentes valores de ω . Vale la pena hacer un repaso del oscilador clásico. Éste resulta de una fuerza restitutiva, del tipo,

$$F_x = -kx.$$

Esta fuerza puede ser la de un resorte. La constante k , debe ser mayor que cero. Cuanto mayor sea la magnitud de k , más “duro” es el resorte. Pensemos que este resorte tiene un extremo fijo y el otro sujeto a una masa m , apoyada sobre una superficie horizontal sin roce. Pensemos además que el resorte no tiene masa. En este caso, empleando la segunda ley de Newton tenemos,

$$F_x = m\ddot{x} = -kx,$$

esto es,

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0.$$

donde $\omega^2 = k/m$. Sabemos que la solución general de esta ecuación es de la forma,

$$x(t) = C_1 \text{sen}(\omega t) + C_2 \text{cos}(\omega t).$$

Pero lo que realmente nos interesa es el potencial que corresponde a esta fuerza. Este potencial está dado por,

$$F_x = -\frac{dV(x)}{dx} \Rightarrow V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2.$$

Quisimos reproducir estos conceptos de física elemental, con el fin de justificar la relación,

$$k = \omega^2 m.$$

En conclusión, a medida que incrementamos el valor de ω , estamos pensando en una fuerza restitutiva de mayor intensidad.

Volvemos a la Fig. (4.2). En cada panel, empleamos la misma escala con el fin de simplificar la comparación entre los diferentes potenciales. Vemos que a medida que incrementamos el valor de ω (o lo que es equivalente, el valor de $h\nu$), aumenta la derivada del potencial (éste se hace más "estrecho") y aumenta también la separación entre los niveles. La separación entre los niveles es $h\nu$, lo cual explica este incremento su separación. Sobre el incremento de la pendiente, la pendiente es la derivada de potencial, que es la fuerza. Luego, este incremento es consistente con lo ya discutido sobre la constante k de la fuerza. *Por medio de este conjunto de paneles, vemos que a medida que incrementamos la fuerza restitutiva, la partícula oscila en una región menor, con una frecuencia más alta y por lo tanto, con mayor energía.*

En la Fig. (4.3), mostramos algunas funciones de onda en función de la posición y en las Figs. (4.4) y (4.5), el módulo al cuadrado de la función de onda. En realidad, nos interesa el módulo al cuadrado de la función de onda, pues es la magnitud asociada con la probabilidad de encontrar la partícula. Aún así, en la Fig. (4.3), graficamos la función de onda con el fin de mostrar la paridad de la misma. Vemos que para los n pares más el cero, la función es par, mientras que para los valores impares de n , la función es impar. Además, vemos que el estado fundamental no corta al eje x . Para los estados excitados, la función de onda corta al eje x , n -veces (el n sigue siendo el número cuántico asociado con la energía).

Consideramos ahora el módulo de la función de onda al cuadrado en las Figs. (4.4) y (4.5). Eso lo hacemos en ocho paneles diferentes, para valores cada vez más grandes de n . Notemos que en estas figuras y por conveniencia, empleamos diferentes escalas para ambos ejes. Antes de abordar el análisis de estas figuras, pensemos en qué sabemos del comportamiento de un oscilador clásico: la situación de menor energía es el caso trivial de que simplemente no oscile (...) Esto es, sujeto la masa al resorte en la posición de equilibrio y no aparto la masa del equilibrio, por lo cual se queda quieta. Si aparto la masa de la posición de equilibrio y la suelto desde el reposo, oscila con la amplitud inicial que le dimos a la masa. Los extremos del movimiento oscilatorio, donde la velocidad es

ceros, son los puntos en que encuentro a la partícula con mayor probabilidad, pues es la región en donde permanece más tiempo. Análogamente, el punto de equilibrio ($x = 0$), es el punto menos probable. Comparamos ahora con el resultado cuántico. Para ello, consideramos los valores extremos de $n = 0$ y 30 :

- $n = 0$. Este es el estado fundamental. Como rige el principio de Indeterminación, no podemos tener la partícula en el origen en reposo. Sin embargo, encuentro que para el estado de menor energía, el punto más probable es $x = 0$, como en el caso clásico.
- $n = 30$. Mientras que el estado fundamental es un estado singular, pues es el de menor energía, $n=30$ es una elección arbitraria. Los valores más grandes de n son difíciles de graficar y confirman la tendencia que observamos. Para este estado de alta energía, está claro que los extremos son los puntos más probables para encontrar la partícula, mientras que $x = 0$ es el punto menos probable; al igual que en el caso clásico.

En el caso de $n \gg 0$, la energía del estado es muy grande comparada con la separación de los niveles ($h\nu$). Cuando no logramos ver la separación de los niveles, es que estamos llegando al límite clásico. Hemos analizado en comparación con el caso clásico al estado fundamental y a un estado de energía alta. Los valores de n pequeños simplemente son resultados cuánticos, sin comparación con el caso clásico.

Antes de terminar, observemos con un poco más de detenimiento a las Figs. (4.4) y (4.5). En estas figuras puede deducirse el valor de la amplitud clásica, observando dónde está la intersección entre el potencial y la energía del nivel. Notemos algo interesante: para valores pequeños de n , el cuadrado de la función de onda claramente excede este punto. Sin embargo, a medida de que crece n , la función de onda cae en forma cada vez más abrupta y ya no sobrepasa la amplitud clásica. Esto muestra nuevamente que los efectos cuánticos son importantes cuando los números cuánticos son pequeños. En nuestro caso, tenemos un único número cuántico que es n y está asociado con la energía.

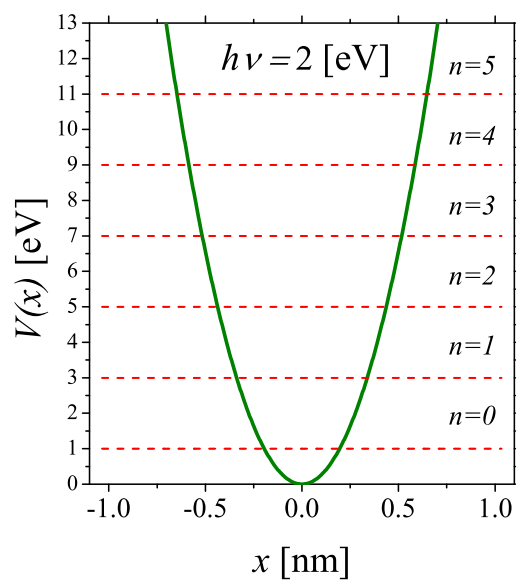


Figura 4.1: Potencial armónico y niveles de energía para un electrón. Mostramos esta figura con el fin de simplificar la interpretación de las figuras que siguen. En verde, vemos el potencial armónico. Es importante señalar que no se trata de una figura indicativa, en que no se establecen unidades, ni el valor de la fuerza armónica. Como se indica en la figura, las unidades del potencial son electrón-volt (eV) y la distancia está dada en nanómetros (nm).

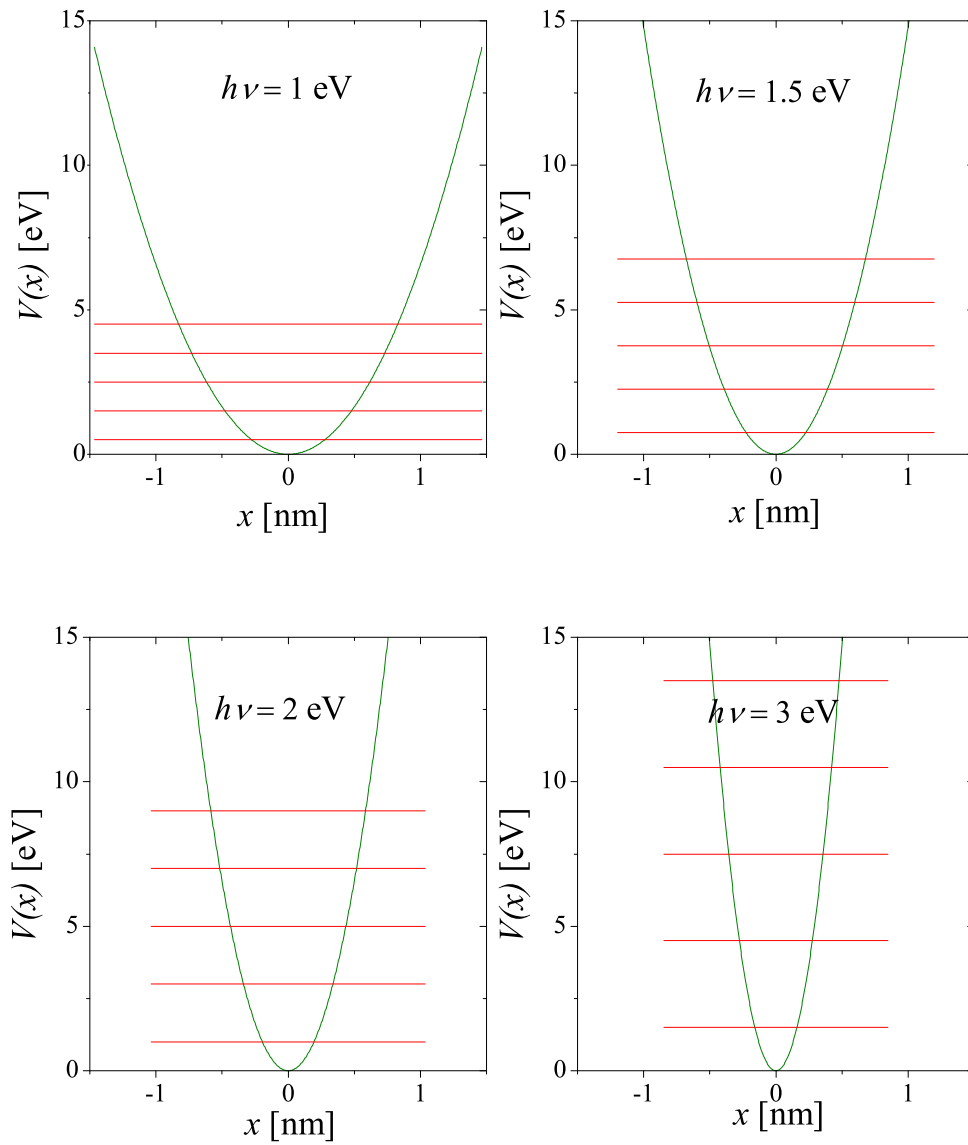


Figura 4.2: Lo mismo que la Fig. (4.1), pero para diferentes valores de $h\nu$. Notar que se usa la misma escala en todos los gráficos.

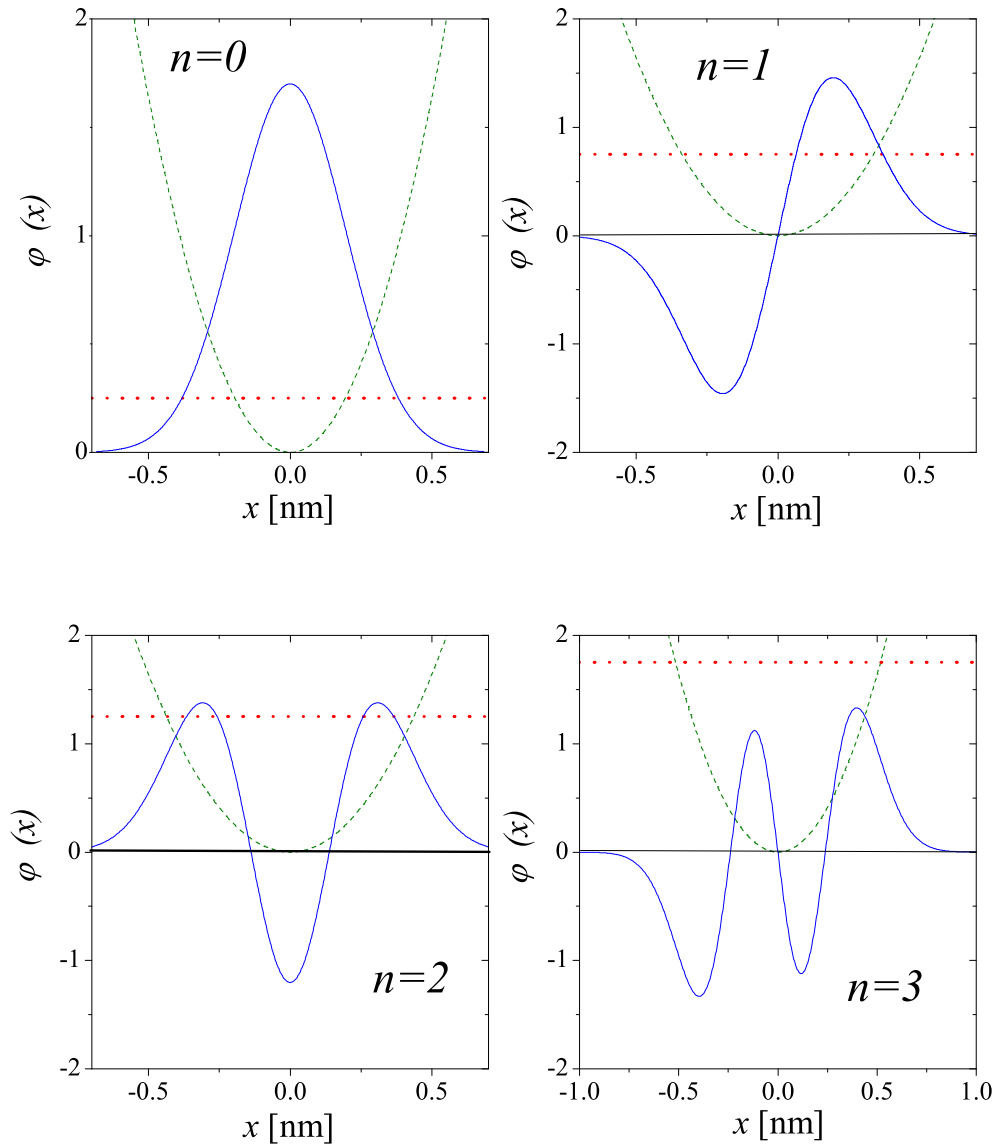


Figura 4.3: Funciones de onda para algunos valores de n , según la ec. (4.17). Consideramos $h\nu = 2\text{eV}$. Sobre la misma figura se superpone el potencial y el nivel de energía correspondiente al valor del n de la función de onda, con el fin de comparar el valor de A_n . En este caso, el valor de la coordenada x del potencial es correcto, pero la escala del eje y para el potencial es sólo indicativa.

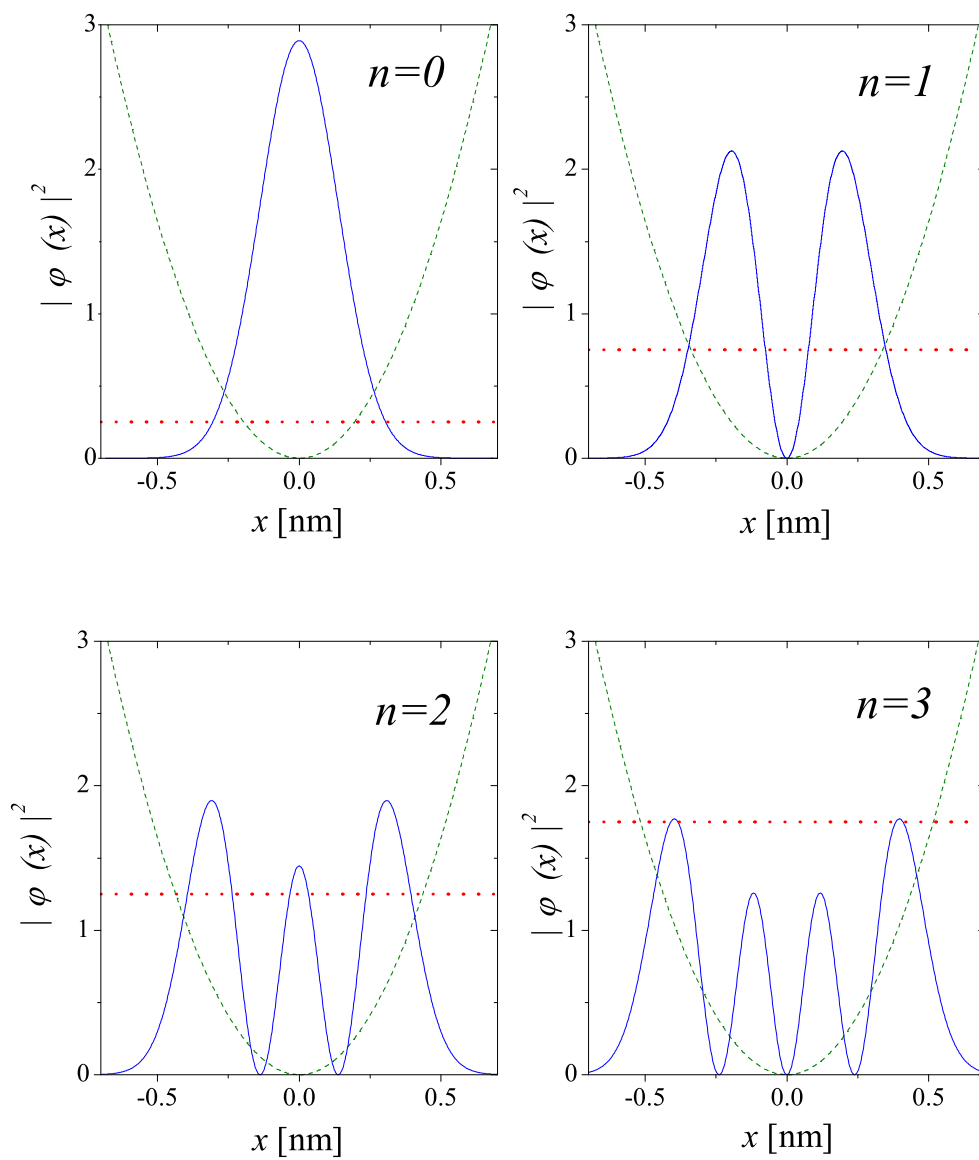


Figura 4.4: Lo mismo que la Fig. (4.3), pero para la función de onda al cuadrado, para $n = 0, 1, 2$ y 3 .

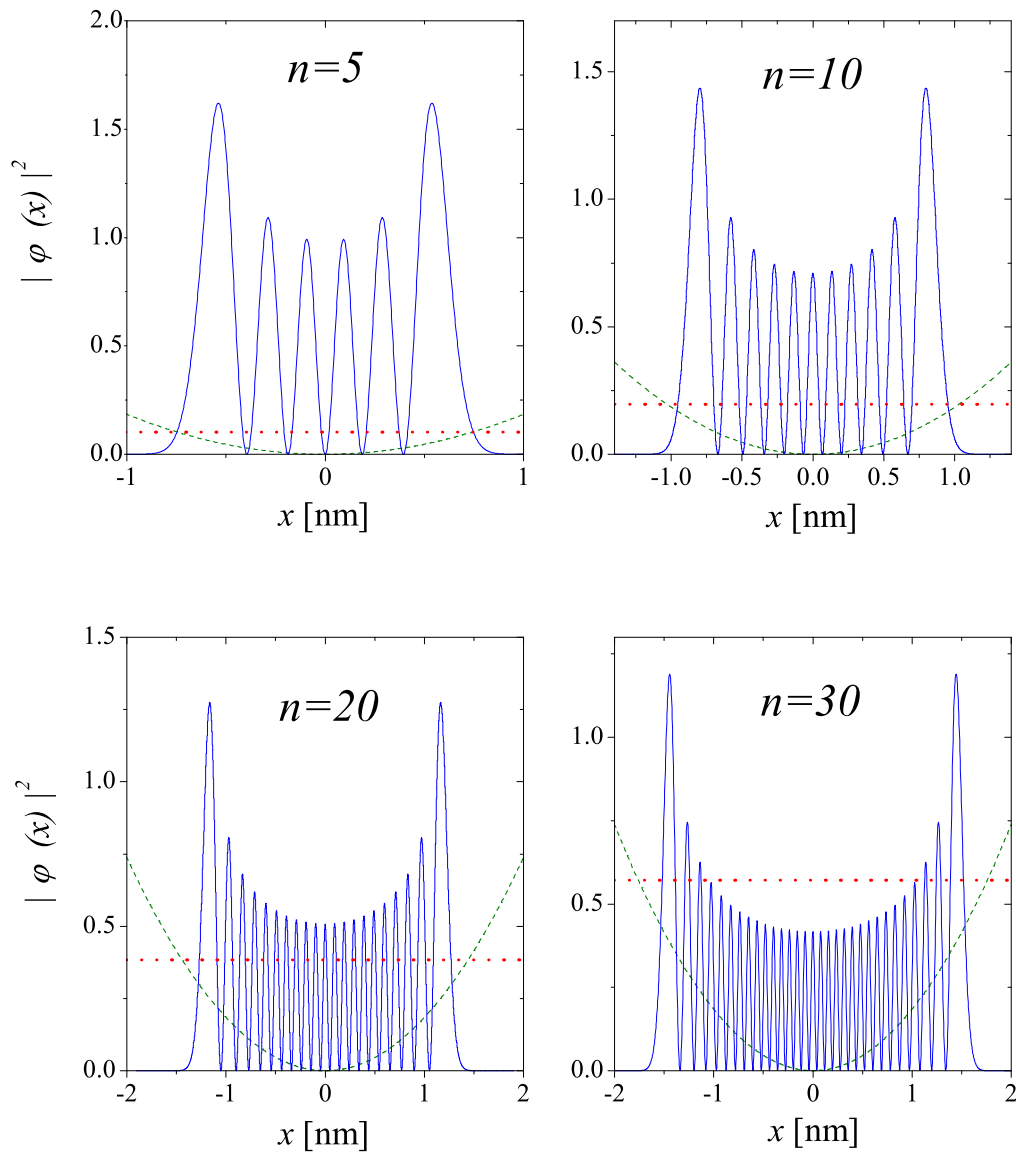


Figura 4.5: Lo mismo que la Fig. (4.3), pero para la función de onda al cuadrado, para $n = 5, 10, 20$ y 30 .

CAPÍTULO 5

Postulados de la mecánica cuántica

Introducción

¿Qué entendemos por *entender*? No se trata ni de un juego de palabras, ni de una pregunta que pretende transformar algo simple, en algo complejo. Es una pregunta objetiva: ¿cuándo decimos que logramos entender un problema físico? Una posible respuesta es afirmar que lo entendemos cuando podemos describir qué ocurre en cada instante no por medio de la observación, sino por medio de un modelo físico que lo describa. Naturalmente, luego la observación debe confirmar lo predicho. En esta respuesta, el uso de la palabra “describir”, no indica el describir con palabras lo que ocurre. En general, lo describiremos con fórmulas, que son otro tipo de lenguaje. Notemos que si bien muchas palabras van más allá de nuestra experiencia (ejemplo: ¿cuál es la experiencia asociada con la palabra “abstracto”?), las palabras en sí, son insuficientes para describir un fenómeno físico. Necesitamos palabras y fórmulas. Ahora bien, operativamente, acordemos que “entendemos” un problema cuando somos capaces (o potencialmente capaces) de describir el fenómeno físico en cada instante.

Richard Feynman, quien desarrolló la Electrodinámica Cuántica y hemos nombrado anteriormente, dijo una vez: “nadie entiende realmente la Mecánica Cuántica”. Es importante describir el contexto en el que Feynman dijo esta frase. Según él mismo relata, leyó en un diario que solo cierto número de personas en el planeta entendían la Teoría de la Relatividad General. Feynman comprendía que la Relatividad General consta de un conjunto de ecuaciones que son complejas, pero que todo aquel que posee conocimientos

matemáticos suficientes y se propone estudiar dichas ecuaciones, terminará inevitablemente comprendiendo la Teoría de la Relatividad. No ocurre lo mismo con la Mecánica Cuántica. No tenemos un conjunto de ecuaciones que nos digan en cada instante qué ocurre. Debemos postular hechos porque es lo que ocurre experimentalmente, pero no sabemos por qué ocurren.

En capítulos previos, vimos el Principio de Incertidumbre de Heisenberg. Según este principio, no podemos conocer la trayectoria de una partícula con una precisión arbitraria. Digamos que esto es contraintuitivo, pues el sentido común nos dice que la partícula debe encontrarse en algún punto en cada instante. La posición en función del tiempo es la trayectoria. Luego, cómo podemos entender que si sabemos que la partícula tiene una posición inicial y otra final, pudo llegar de un punto al otro por infinitas trayectorias (aunque todas ellas muy próximas entre sí). El Principio de Incertidumbre de Heisenberg no es un postulado de la Mecánica Cuántica, sino un resultado. A lo largo de este capítulo, veremos los Postulados de la Mecánica Cuántica. Un postulado es un principio que se admite como cierto sin necesidad de ser demostrado y que sirve como base para otros razonamientos. Los postulados resultan de la observación de la Naturaleza y son válidos en tanto no se encuentre un experimento que los contradiga.

Es importante notar que no existe acuerdo entre la comunidad científica sobre el número de postulados para la Mecánica Cuántica. Diferentes autores, proponen diferentes postulados. Naturalmente, cuantos más postulados propongamos, más simples son los mismos. En cualquier caso, el contenido de cualquier esquema de postulados es el mismo. En algún caso se postulan pocos principios y luego se trabaja mucho para construir el esquema formal de la Mecánica Cuántica o se agregan muchos postulados y el esquema formal es más simple.

En verdad, no existe un orden rígido para presentar los postulados. Mientras que por ejemplo, en la Mecánica Clásica, las leyes de Newton tienen un orden y hablamos de la primera Ley de Newton, etc, en este caso lo importante es solo el contenido del postulado y no su numeración. No todos los autores emplean una sección o capítulo destinado a los postulados de la Mecánica Cuántica, optando por exponer la información a medida de que esta información es requerida. Nuestro enfoque es diferente: presentar los postulados y mostrar cómo esos postulados se emplean en el desarrollo del curso. Esta sección se basa en la discusión dada en los trabajos del libro de C. Cohen-Tannoudji, B. Diu y F.

Laloë [3], el de Daniel Bes [2] y en las notas de Fidel Schaposnik [12].

5.1. Postulados a tiempo fijo

Analizaremos en primer lugar los postulados a tiempo fijo y luego consideraremos la evolución temporal del sistema.

5.1.1. De los estados cuánticos y del principio de superposición

Primer Postulado: El estado de un sistema físico en un instante dado t , está completamente descrito por un vector normado $|\psi\rangle$, que pertenece a un espacio de Hilbert \mathcal{H} .

Como venimos de la discusión de la Mecánica Ondulatoria, este postulado no parece algo nuevo, pero realmente lo es. En la Mecánica Ondulatoria, vimos a la función de onda como la expresión que contiene toda la física que podemos conocer de un sistema. En este postulado, hacemos un poco más abstracta esa misma información. Pero debemos pensar a este postulado como independiente de la Mecánica Ondulatoria. Desde ese punto de vista, el cambio desde la Mecánica Clásica a la Mecánica Cuántica es radical: pasamos de la posición y la cantidad de movimiento como las únicas cantidades que definen al estado mecánico de una partícula, a un vector abstracto de un espacio vectorial.

El vector $|\psi\rangle$, contiene *toda* la información que podemos obtener de una medida. Este vector puede ser multiplicado por una fase arbitraria sin alterar el contenido físico del mismo. Lo mismo ocurre cuando tenemos un vector escrito como una suma de dos vectores, por ejemplo $c_a|\psi_a\rangle + c_b|\psi_b\rangle$. Naturalmente, nos referimos a una fase global que multiplica a esta suma. La fase relativa entre los vectores $|\psi_a\rangle$ y $|\psi_b\rangle$, contiene información física importante y no se puede alterar.

El hecho de que la suma de dos vectores $|\psi_a\rangle$ y $|\psi_b\rangle$, de como resultado (una vez normalizado), un tercer vector que también pertenece al espacio de Hilbert \mathcal{H} , es lo que denominamos como Principio de Superposición. El hecho de que exista un vector de la forma $c_a|\psi_a\rangle + c_b|\psi_b\rangle$, no debe ser interpretado como que dicha partícula tiene una

componente de $|\psi_a\rangle$ y otra componente de $|\psi_b\rangle$; sino que nuestro sistema se encuentra simultáneamente en ambos estados. Este es quizá, el aspecto más sutil de la Mecánica Cuántica. Subyace en la interpretación del experimento de las dos rendijas. Si pensamos al vector $|\psi_a\rangle$ como el paso por una de las rendijas y al vector $|\psi_b\rangle$ como el paso por la otra, estas dos componentes representan a la misma partícula y estas mismas componentes interfieren entre sí.

De este modo, cada estado físico posible de un sistema está representado por un vector $|\psi\rangle$. Si tomamos el conjunto completo de vectores $|\psi\rangle$ linealmente independientes, este conjunto de vectores forman una base posible del espacio de Hilbert \mathcal{H} . Naturalmente, existen infinitas bases posibles para el espacio de Hilbert, en tanto la dimensión del espacio sea mayor a uno. Un espacio vectorial posee las siguientes propiedades:

- Es completo.
- Es separable.
- Está dotado de un producto interno o producto escalar.

El hecho de que sea completo, indica que la suma de dos vectores cualesquiera del espacio, es otro vector que pertenece al mismo espacio. El carácter separable nos dice que un vector siempre se puede escribir como la suma de otros vectores del mismo espacio. Finalmente, el producto escalar da como resultado un número (que puede ser complejo). En el postulado, se escribe que el vector $|\psi\rangle$, es un vector normado. Esto significa que el producto escalar del vector con el vector mismo, debe darme un número finito. Por la interpretación probabilística de los estados $|\psi\rangle$, esta norma debe valer uno.

Sean dos elementos del espacio de Hilbert, $|\psi_1\rangle$ y $|\psi_2\rangle$, indicamos el producto interno entre estos vectores como,

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^* = \lambda, \quad \text{con } \lambda \in \mathbb{C}, \quad (5.1)$$

donde \mathbb{C} representa a los números complejos. Resumamos las propiedades del producto

interno:

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle &= \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle^*, \\
 \langle \lambda_1 \psi_1 | \lambda_2 \psi_2 \rangle &= \lambda_1^* \lambda_2 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle, \\
 \langle (\lambda_1 \psi_1 + \lambda_3 \psi_3) | \psi_2 \rangle &= \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + \lambda_3^* \langle \psi_3 | \psi_2 \rangle, \\
 | \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle | &\leq \sqrt{\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle} \quad (\text{desigualdad de Schwartz}), \\
 \langle \psi | \psi \rangle &= 1 \Leftrightarrow |\psi\rangle \neq 0,
 \end{aligned} \tag{5.2}$$

donde el vector nulo tiene norma cero.

Para construir el producto interno, además del estado $|\psi\rangle$, introducimos la cantidad $\langle\psi|$. Estas cantidades están claramente vinculadas, pero no son idénticas. A $|\psi\rangle$, lo llamaremos “ket” y a $\langle\psi|$ lo llamaremos “bra”⁸. El contenido físico de los ket está contenido en el primer postulado. Discutiremos ahora los bra.

Espacio Dual de Hilbert

Consideremos ahora una aplicación lineal χ , tal que la acción de dicha aplicación sea transformar un vector del espacio de Hilbert en un número complejo:

$$\chi : |\psi\rangle \rightarrow \chi[|\psi\rangle] \in \mathbb{C}. \tag{5.3}$$

El hecho de que χ sea un funcional lineal significa que,

$$\chi[|\psi_1\rangle + \lambda|\psi_2\rangle] = \chi[|\psi_1\rangle] + \lambda\chi[|\psi_2\rangle], \quad \text{con } \lambda \in \mathbb{C}. \tag{5.4}$$

El conjunto de funcionales lineales χ_I, χ_{II}, \dots definidas sobre los estados $|\psi\rangle$ pertenecientes al espacio de Hilbert \mathcal{H} , forman un espacio vectorial \mathcal{H}^* , que se llama el espacio dual del espacio de Hilbert.

De la discusión del producto interno, está claro que los bra ($\langle\psi|$), están en el espacio dual de Hilbert. Luego, como los estados del espacio de Hilbert por hipótesis son normados, a todo ket le corresponde un bra. Sin embargo, el espacio dual de Hilbert contiene aplicaciones lineales definidas sobre los estados $|\psi\rangle$ pertenecientes al espacio de Hilbert, que no poseen un ket. El espacio dual de Hilbert \mathcal{H}^* , es entonces un espacio vectorial que contiene más elementos que el espacio de Hilbert en sí.

Vale la pena enfatizar lo que discutimos:

⁸Esta designación la propuso Paul Dirac y viene de la palabra inglesa “bracket” (corchete). Si escribimos $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$, la primera parte lo llamamos *bra* y la segunda *ket*, *bra-ket*.

- los *ket* $|\psi\rangle$ son vectores del espacio de Hilbert \mathcal{H} .
- los *bra* $\langle\psi|$ son vectores del espacio dual de Hilbert \mathcal{H}^* .

Sobre el complejo conjugado de la función de onda

El primer postulado, nos dice algo central de la Mecánica Cuántica: el vector $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, contiene toda la información que podemos conocer de un sistema. Nos dice también que se trata de un vector normado. Para analizar el siguiente punto, es conveniente escribir la norma de una función de onda de la Mecánica Ondulatoria:

$$\int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) = 1, \quad (5.5)$$

esto es, construimos la norma con $\psi(\mathbf{r}, t)$ y con $\psi^*(\mathbf{r}, t)$. La función $\psi(\mathbf{r}, t)$, es solución de la ecuación de Schrödinger,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}. \quad (5.6)$$

Aún no hemos establecido el vínculo entre el estado $|\psi\rangle$ y la función de onda $\psi(\mathbf{r}, t)$. Lo haremos con rigurosidad un poco más adelante. Sin embargo, nos adelantamos a expresar en forma conceptual ese vínculo. Para ello, pensemos en el vector posición \mathbf{r} . Si tenemos el vector posición, decimos que conocemos la posición de la partícula. Pero, ¿cuál es la posición de la partícula?, para ello debemos explicitar las componentes del vector, por ejemplo: $\mathbf{r} = (x_1, y_1, z_1)$, donde x_1 , y_1 y z_1 , son las componentes cartesianas de \mathbf{r} según un sistema de coordenadas. Análogamente, $|\psi\rangle$ se comporta como el vector abstracto \mathbf{r} , mientras que $\psi(\mathbf{r}, t)$, posee la información explícita como (x_1, y_1, z_1) .

Regresemos a la discusión sobre $\psi(\mathbf{r}, t)$ y $\psi^*(\mathbf{r}, t)$. Comparando la ec. (5.5), con la norma $\langle\psi|\psi\rangle$, nos damos cuenta de que $\psi^*(\mathbf{r}, t)$ representa al bra. Si $\psi(\mathbf{r}, t)$ es una función real, entonces $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r}, t)$. Pero si $\psi(\mathbf{r}, t)$ es una función compleja, entonces la función $\psi^*(\mathbf{r}, t)$ representa un estado diferente a menos que $\psi(\mathbf{r}, t)$ y $\psi^*(\mathbf{r}, t)$ difieran en una fase. Tomemos el conjugado de la ecuación de Schrödinger,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r}, t) = -i\hbar\frac{\partial\psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad (5.7)$$

donde pensamos que el potencial $V(\mathbf{r})$, es real. Por el signo menos a la derecha, el primer impulso al ver esta ecuación sería decir que la función de onda conjugada $\psi^*(\mathbf{r}, t)$, puede

no ser solución de la ecuación de Schrödinger. Sin embargo, si invertimos el sentido del tiempo,

$$t \rightarrow -\tilde{t},$$

tenemos,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*(\mathbf{r}, -\tilde{t}) + V(\mathbf{r}) \psi^*(\mathbf{r}, -\tilde{t}) = i\hbar \frac{\partial \psi^*(\mathbf{r}, -\tilde{t})}{\partial \tilde{t}}, \quad (5.8)$$

luego, $\psi^*(\mathbf{r}, -\tilde{t})$ es la solución de la ecuación de Schrödinger que viaja “atrás en el tiempo”. Esto puede sonar descabellado, pero a nivel microscópico no lo es. Excede a este curso, pero muchos procesos físicos son *invariantes frente a una inversión temporal*. Si vemos una película de agua cayendo sobre una superficie y luego pasamos la película al revés, nos damos cuenta del sentido correcto de tiempo. Pero consideramos la dispersión de dos partículas microscópicas y tomamos una película de este hecho, no seríamos capaces de decir cuál es el orden del tiempo. Para ser más claros, consideremos la solución de la ecuación de Schrödinger para una partícula libre, a pesar de que consideraremos una función no normalizable. Tenemos,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{i(kx - \omega t)}, \quad (5.9)$$

donde esta función representa una partícula moviéndose a la derecha. Tomemos ahora el conjugado de esta función de onda y reemplacemos $t \rightarrow -\tilde{t}$,

$$\psi^*(\mathbf{r}, -\tilde{t}) = e^{i(-kx - \omega \tilde{t})}, \quad (5.10)$$

que ahora representa una partícula moviéndose a la izquierda, lo cual es consistente con nuestra interpretación.

5.1.2. De los observables

Segundo Postulado: A toda cantidad física \mathcal{A} , le corresponde un operador lineal hermítico \hat{A} , que actúa sobre el espacio de Hilbert \mathcal{H} .

$$\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}.$$

Sabemos que las magnitudes físicas pueden ser escalares como la energía o vectoriales, como la cantidad de movimiento. Luego, designamos con \mathcal{A} al valor de una medida, que

puede ser escalar o vectorial. Por medio de $\hat{\mathcal{A}}$ (con el sombrero), representamos a un operador hermítico escalar o vectorial, asociado a ese observable. El operador $\hat{\mathcal{A}}$ actúa sobre un vector del espacio de Hilbert y da como resultado otro vector del mismo espacio.

Lo primero que debemos notar de este postulado y del anterior, es que a diferencia de la Mecánica Clásica, en Mecánica Cuántica el estado de una partícula está descrito por medio de un vector que pertenece al espacio de Hilbert, mientras que los observables están representados por operadores que actúan sobre vectores del espacio de Hilbert. En Mecánica Clásica, los observables están representados siempre por números (escalares o vectoriales). Los números conmutan entre sí. Pero en Mecánica Cuántica los observables están representados por operadores y no siempre los operadores conmutan entre sí. Enseguida desarrollaremos este concepto, sin embargo, ya deberíamos intuir que si un observable está representado por un operador y un segundo observable por un segundo operador que no conmuta con el primero, el orden en que midamos estas cantidades es importante. Por otra parte, en Mecánica Clásica ya que todos los observables son números que conmutan entre sí, podemos medir los observables en cualquier orden.

El hecho de que se trata de un operador lineal, significa que,

$$\hat{\mathcal{A}}(|\psi_1\rangle + \lambda |\psi_2\rangle) = \hat{\mathcal{A}}|\psi_1\rangle + \lambda \hat{\mathcal{A}}|\psi_2\rangle, \quad (5.11)$$

donde λ es una constante. Por otra parte, la acción de dos operadores posee la propiedad asociativa,

$$(\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}})|\psi\rangle = \hat{\mathcal{A}}(\hat{\mathcal{B}}|\psi\rangle).$$

No debemos perder de vista que lo que nos dice el segundo postulado es que todo observable tiene asociado un operador hermítico. Esa implicación es en una sola dirección. Por ejemplo, el operador identidad es hermítico y sin embargo no tiene asociado ningún observable. Vale la pena indicar, sin embargo, que emplearemos operadores que no son hermíticos y son útiles para diferentes cálculos. Pueden existir operadores no hermíticos, pero si no lo son, entonces no tiene a ningún observable asociado.

Algunas definiciones

Es conveniente establecer algunas definiciones en una lista, con el fin de que las mismas sean fáciles de encontrar. En lo que sigue, definiremos el elemento de matriz del operador $\hat{\mathcal{A}}$, entre los estados $|\psi_1\rangle$ y $|\psi_2\rangle$, el valor medio del operador para un estado

cuántico, el adjunto de un operador, la propiedad que define un operador como hermítico y el conmutador entre dos operadores:

- El elemento de matriz del operador $\hat{\mathcal{A}}$, entre los estados $|\psi_1\rangle$ y $|\psi_2\rangle$, está dado por: $\langle\psi_1|\hat{\mathcal{A}}|\psi_2\rangle = \lambda$, con $\lambda \in \mathbb{C}$.
- Si $|\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle = |\psi\rangle$, el elemento de matriz del operador $\hat{\mathcal{A}}$ se denomina *valor medio*, por razones que se explicarán enseguida. Empleamos la notación, $\langle\psi|\hat{\mathcal{A}}|\psi\rangle = \langle\hat{\mathcal{A}}\rangle$.
- Adjunto de un operador. Dado un ket, el bra se obtiene por la operación de conjugación: $|\psi\rangle \xrightarrow{*} \langle\psi|$. El adjunto se define como el operador que resulta de la operación de conjugación de la cantidad $\hat{\mathcal{A}}|\psi\rangle$, esto es: $\hat{\mathcal{A}}|\psi\rangle \xrightarrow{*} \langle\psi|\hat{\mathcal{A}}^\dagger$; donde por medio de la daga indicamos al operador adjunto.
- Un operador es hermítico cuando $\hat{\mathcal{A}}|\psi\rangle \xrightarrow{*} \langle\psi|\hat{\mathcal{A}}^\dagger = \langle\psi|\hat{\mathcal{A}}$. De este modo, un operador hermítico es autoadjunto: $\hat{\mathcal{A}}^\dagger = \hat{\mathcal{A}}$.
- Se define el conmutador entre dos operadores como, $[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}] = \hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}} - \hat{\mathcal{B}}\hat{\mathcal{A}}$. Naturalmente, si los operadores conmutan, su conmutador es cero.
- Cuando dos operadores son *canónicos conjugados*, su conmutador es una constante por la identidad del espacio de los operadores. Demostraremos esta propiedad al final de este capítulo.

Es conveniente repasar estas definiciones en términos de la notación de la Mecánica Ondulatoria. Comencemos por el elemento de matriz,

$$\langle\psi_1|\hat{\mathcal{A}}|\psi_2\rangle = \int d^3r \psi_1^*(\mathbf{r}, t) \hat{\mathcal{A}} \psi_2(\mathbf{r}, t). \quad (5.12)$$

La expresión que define al adjunto de un operador es,

$$\int d^3r \psi_1^*(\mathbf{r}, t) \hat{\mathcal{A}}^\dagger \psi_2(\mathbf{r}, t) = \int d^3r (\hat{\mathcal{A}} \psi_1(\mathbf{r}, t))^* \psi_2(\mathbf{r}, t). \quad (5.13)$$

Mientras que un operador es hermítico cuando cumple con la siguiente expresión:

$$\int d^3r (\hat{\mathcal{A}} \psi_1(\mathbf{r}, t))^* \psi_2(\mathbf{r}, t) = \int d^3r \psi_1^*(\mathbf{r}, t) \hat{\mathcal{A}} \psi_2(\mathbf{r}, t). \quad (5.14)$$

De la comparación de las ecs. (5.13) y (5.14), resulta claro que un operador hermítico es autoadjunto. Luego, en el elemento de matriz $\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle$, el operador puede actuar o bien sobre el ket, o bien sobre el bra, pues el resultado es el mismo.

En el segundo postulado, se escribe que un observable se representa por medio de un operador hermítico. En sentido estricto, lo único que sí debemos postular es que los observables se representan por medio de operadores. El carácter de hermítico se puede demostrar. El valor medio de una cantidad observable, debe ser un número real, ya que no se pueden medir cantidades imaginarias. Debe cumplirse entonces que, $\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{A} \rangle^*$; esto es,

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{A} \psi(\mathbf{r}, t), \\ \langle \hat{A} \rangle^* &= \int d^3r (\psi^*(\mathbf{r}, t))^* (\hat{A} \psi(\mathbf{r}, t))^* \\ &= \int d^3r (\hat{A} \psi(\mathbf{r}, t))^* \psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{A} \psi(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (5.15)$$

usamos que $(\psi^*(\mathbf{r}, t))^* = \psi(\mathbf{r}, t)$. La última línea se cumple solo si el operador es hermítico y demuestra la igualdad $\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{A} \rangle^*$.

Algunas propiedades de los operadores

Consideremos algunas propiedades de los operadores en general, pero colocando el énfasis en los operadores hermíticos. Enumeramos las propiedades:

1. La suma de dos operadores hermíticos, es un operador hermítico.
2. La identidad \hat{I} , es un operador hermítico.
3. Si \hat{F} no es un operador hermítico, $\hat{F} + \hat{F}^\dagger$ y $i(\hat{F} - \hat{F}^\dagger)$, sí lo son.
4. Si \hat{F} y \hat{G} , son dos operadores cualesquiera, entonces $(\hat{F}\hat{G})^\dagger = \hat{G}^\dagger\hat{F}^\dagger$.

Demostración del punto 4. Empleando la definición del adjunto de un operador (ec. 5.13), tenemos,

$$\begin{aligned} \int d^3r \psi_1^*(\mathbf{r}, t) (\hat{F}\hat{G})^\dagger \psi_2(\mathbf{r}, t) &= \int d^3r (\hat{F}\hat{G} \psi_1(\mathbf{r}, t))^* \psi_2(\mathbf{r}, t) \\ &= \int d^3r (\hat{G} \psi_1(\mathbf{r}, t))^* \hat{F}^\dagger \psi_2(\mathbf{r}, t) \\ &= \int d^3r (\psi_1(\mathbf{r}, t))^* \hat{G}^\dagger \hat{F}^\dagger \psi_2(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (5.16)$$

Con lo que queda demostrado. Como corolario de esta demostración resulta que el producto de dos operadores hermíticos es también hermítico si y sólo si, los operadores conmutan: el producto de dos operadores es un tercer operador. Si es hermítico tiene que ser autoadjunto, esto es, $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{A}\hat{B}$. Sabemos que \hat{A} y \hat{B} son hermíticos (por lo tanto $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ y lo mismo para \hat{B}) y conocemos la propiedad $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger = \hat{B}\hat{A}$. Por lo tanto para que el producto de dos operadores hermíticos sea hermítico, éstos deben conmutar entre sí.

Proyectores

Un tipo de operadores particularmente útiles, son los proyectores, que designaremos como $\hat{\mathcal{P}}$. La expresión más simple para un proyector es,

$$\hat{\mathcal{P}} \equiv |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (5.17)$$

Los proyectores actúan indistintamente sobre el espacio de Hilbert \mathcal{H} o sobre el espacio dual de Hilbert \mathcal{H}^* . Consideremos la acción del proyector sobre un estado $|\varphi\rangle$,

$$\hat{\mathcal{P}}|\varphi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\varphi\rangle = (\langle\psi|\varphi\rangle)|\psi\rangle, \quad (5.18)$$

donde la cantidad $(\langle\psi|\varphi\rangle)$ es un número. La acción del proyector es entonces proyectar al vector $|\varphi\rangle$ sobre el vector $|\psi\rangle$. Los proyectores no están limitados a un solo vector. Podemos considerar la proyección sobre un subespacio de estados, en el caso discreto tenemos,

$$\hat{\mathcal{P}} = \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad (5.19)$$

mientras que en el caso continuo, podemos escribir,

$$\hat{\mathcal{P}} = \int d\mu |\psi(\mu)\rangle\langle\psi(\mu)|. \quad (5.20)$$

Si sumamos sobre todo el espacio de Hilbert, proyectar sobre cada elemento de todo el espacio significa mantener al vector proyectado como está, esto es,

$$\hat{\mathcal{P}} = \sum_{\forall i \in \mathcal{H}} |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \mathcal{I}. \quad (5.21)$$

Análogamente, para el caso continuo,

$$\mathcal{I} = \int_{\forall \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3} d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|. \quad (5.22)$$

Finalmente, consideremos al proyector sobre la posición \mathbf{r} ,

$$\hat{\mathcal{P}}_{\mathbf{r}} = |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|. \quad (5.23)$$

La acción de este proyector sobre un estado $|\psi\rangle$, resulta,

$$\hat{\mathcal{P}}_{\mathbf{r}}|\psi\rangle = (\langle\mathbf{r}|\psi\rangle)|\mathbf{r}\rangle. \quad (5.24)$$

La cantidad $\langle\mathbf{r}|\psi\rangle$, es la función de onda de la Mecánica Ondulatoria, $\langle\mathbf{r}|\psi\rangle = \psi(\mathbf{r}, t)$ y de este modo establecemos el vínculo entre la Mecánica Cuántica y la Ondulatoria. Una objeción inmediata es, ¿de dónde sale el tiempo t ? En realidad, los ket del espacio de Hilbert tienen al tiempo como un parámetro, $|\psi\rangle = |\psi\rangle_t$, pero por simplicidad no escribimos el tiempo.

Base diagonal

Aún nos falta analizar un aspecto del segundo postulado. Sabemos que todo observable es representado por un operador hermítico. Si llamamos $\hat{\mathcal{A}}$ a este operador, el postulado también enuncia que transforma un elemento del espacio de Hilbert, en algún otro elemento del mismo espacio,

$$\hat{\mathcal{A}}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}.$$

Ento significa que podemos escribir la acción del operador $\hat{\mathcal{A}}$, como,

$$\hat{\mathcal{A}}|\text{algún elemento de } \mathcal{H}\rangle = (\text{un número})|\text{el mismo u otro elemento de } \mathcal{H}\rangle$$

Asignemos símbolos para cada elemento,

$$\hat{\mathcal{A}}|\psi\rangle = \lambda|\phi\rangle. \quad (5.25)$$

Sabemos que los elementos $|\psi\rangle$, $|\phi\rangle$, ... son vectores del espacio de Hilbert. Siempre podemos recurrir al proceso de ortogonalización de Gram–Schmidt para encontrar una base, $|\varphi_1\rangle$, $|\varphi_2\rangle$, ..., $|\varphi_n\rangle$, donde el operador $\hat{\mathcal{A}}$ cumpla una ecuación de autovalores,

$$\hat{\mathcal{A}}|\varphi_i\rangle = \lambda_i|\varphi_i\rangle, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (5.26)$$

donde n es la dimensión del espacio de Hilbert⁹. Los elementos de la base $\{|\varphi_i\rangle\}$, son ortonormales, esto es,

$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{i,j}.$$

Estos vectores forman una base completa del espacio de Hilbert. Más allá del carácter discreto o continuo de la base, siempre podemos imaginar el construir una matriz, cuyos elementos sean,

$$\mathcal{M}_{i,j} \equiv \langle \varphi_i | \hat{\mathcal{A}} | \varphi_j \rangle = \lambda_j \delta_{i,j}.$$

Como acabamos de demostrar, en la base $\{|\varphi_i\rangle\}$, la matriz del operador $\hat{\mathcal{A}}$, es una matriz diagonal. La forma abreviada para indicar esto, es decir que “el operador $\hat{\mathcal{A}}$ es diagonal en la base $\{|\varphi_i\rangle\}$.”

Llegamos a la ec. (5.26), proponiendo un proceso de ortonormalización a partir de la ec. (5.25). En los hechos, sin embargo, se parte de la ec. (5.26) misma, como un problema de autovectores ($|\varphi_i\rangle$) y autovalores (λ_i). Ahora bien, tomemos un estado arbitrario $|\psi\rangle$. Como la base $\{|\varphi_i\rangle\}$ es completa, siempre podemos escribir,

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n c_i |\varphi_i\rangle. \quad (5.27)$$

Actúo ahora con el operador $\hat{\mathcal{A}}$,

$$\hat{\mathcal{A}}|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n c_i \lambda_i |\varphi_i\rangle. \quad (5.28)$$

Ya que los autovalores λ_i son en general diferentes, vemos que en este caso el operador $\hat{\mathcal{A}}$ no tiene a $|\psi\rangle$ como un autovector. Finalmente, evaluamos el valor medio del operador $\hat{\mathcal{A}}$ respecto de $|\psi\rangle$:

$$\langle \psi | \hat{\mathcal{A}} | \psi \rangle = \sum_{i=1}^n |c_i|^2 \lambda_i, \quad \text{recordemos que } \sum_{i=1}^n |c_i|^2 = 1. \quad (5.29)$$

Los dos primeros postulados nos dan las herramientas formales para trabajar con estados y observables. Los postulados siguientes, nos permiten vincular estas herramientas con la medida de los observables.

Teorema: $[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}] = 0 \Leftrightarrow \hat{\mathcal{A}} \wedge \hat{\mathcal{B}}$ tienen una base común

⁹Eventualmente, $n \rightarrow \infty$. También puede tratarse de una variable continua o una combinación de variables discretas y continuas.

Para demostrar este Teorema, nos limitaremos al caso no degenerado. La demostración para el caso degenerado puede verse en [12]. Demostraremos ahora por ambos sentidos la relación,

$$[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}] = 0 \Leftrightarrow \hat{\mathcal{A}} \wedge \hat{\mathcal{B}} \quad \text{tienen una base común.} \quad (5.30)$$

Dem.: i) $[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}] = 0 \Rightarrow \hat{\mathcal{A}} \wedge \hat{\mathcal{B}}$ tienen una base común.

Tomamos un elemento cualquiera de la base en que $\hat{\mathcal{A}}$ es diagonal, tenemos,

$$\hat{\mathcal{A}}|\varphi_i\rangle = a_i |\varphi_i\rangle,$$

donde a_i es un número. Sobre esta igualdad, actúo con el operador $\hat{\mathcal{B}}$,

$$\hat{\mathcal{B}}\hat{\mathcal{A}}|\varphi_i\rangle = a_i\hat{\mathcal{B}}|\varphi_i\rangle,$$

como los operadores conmutan, podemos escribir,

$$\hat{\mathcal{A}}(\hat{\mathcal{B}}|\varphi_i\rangle) = a_i(\hat{\mathcal{B}}|\varphi_i\rangle).$$

Esta ecuación nos dice que la cantidad entre paréntesis, $(\hat{\mathcal{B}}|\varphi_i\rangle)$, es un autovector del operador $\hat{\mathcal{A}}$, con autovalor a_i . Tenemos entonces,

$$\hat{\mathcal{B}}|\varphi_i\rangle = \text{constante} \times |\varphi_i\rangle.$$

podemos llamar a la constante b_i , con lo que tenemos,

$$\hat{\mathcal{B}}|\varphi_i\rangle = b_i|\varphi_i\rangle,$$

lo cual muestra que si los operadores conmutan, tienen la misma base.

ii) $\hat{\mathcal{A}} \wedge \hat{\mathcal{B}}$ tienen una base común $\Rightarrow [\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}] = 0$.

Si tienen una base común vale que,

$$\hat{\mathcal{A}}|\varphi_i\rangle = a_i|\varphi_i\rangle,$$

$$\hat{\mathcal{B}}|\varphi_i\rangle = b_i|\varphi_i\rangle,$$

ahora multiplico a derecha la primera por $\hat{\mathcal{B}}$ y la segunda por $\hat{\mathcal{A}}$,

$$\hat{\mathcal{B}}\hat{\mathcal{A}}|\varphi_i\rangle = a_i\hat{\mathcal{B}}|\varphi_i\rangle = a_ib_i|\varphi_i\rangle,$$

$$\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}}|\varphi_i\rangle = b_i\hat{\mathcal{A}}|\varphi_i\rangle = a_ib_i|\varphi_i\rangle.$$

Ahora a la segunda ecuación le resto la primera, con lo que tenemos,

$$[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}]|\varphi_i\rangle = 0,$$

lo cual implica que $[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}] = 0$, ya que $|\varphi_i\rangle$ por ser un elemento de la base en que $\hat{\mathcal{A}}$ no puede ser el vector nulo. De este modo, demostramos el Teorema.

5.1.3. Sobre la medida de una cantidad física

Tercer Postulado: del resultado de una única medida. Dado un observable $\hat{\mathcal{A}}$, el valor observado de una única medida sobre un estado físico, solo puede dar como resultado uno de los autovalores del observable $\hat{\mathcal{A}}$.

En el postulado se habla de una única medida sobre un estado físico. El sistema físico puede ser una partícula libre, el electrón de un átomo o un sistema más complejo, como todo un átomo, etc. Del primer postulado, sabemos que representamos al sistema físico por medio de un vector normado del espacio de Hilbert. Algo debemos saber de nuestro sistema y en general, establecemos el estado físico en el instante inicial. Supongamos que nuestro estado, es un estado mezcla, como el de la ec. (5.27). De este modo, lo que tenemos es,

mido $\hat{\mathcal{A}}$ sobre el estado $ \psi\rangle = \sum_{i=1}^n c_i \varphi_i\rangle$ $\xrightarrow{\text{se obtiene}}$ algún λ_j
--

Notemos lo que esto implica. Los valores de λ_i pueden ser muy diferentes entre sí. Si mido la longitud de una mesa, nunca puede ocurrir que podemos obtener un valor de 30cm ó 70cm ó 1m. Una medida en Mecánica Cuántica no se parece al resultado de medir la longitud de una mesa, sino que se parece más al resultado de arrojar un dado: podemos obtener cualquier valor entre 1 y 6. Seguiremos desarrollando este concepto más adelante.

.....

Enseguida, expondremos el cuarto postulado. Antes de ello, daremos algunos elementos y recordaremos otros, con el fin de simplificar la discusión del siguiente postulado.

En primer lugar, cuando hagamos referencia a la función de onda $|\psi\rangle$, nos referiremos a,

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n c_i |\psi_i\rangle, \quad \text{con } \langle\psi|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n |c_i|^2, \quad (5.31)$$

donde las funciones de onda de la base $\{|\psi_j\rangle\}$ son los autovectores del operador Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$,

$$\hat{\mathcal{H}} |\psi_i\rangle = \varepsilon_i |\psi_i\rangle, \quad (5.32)$$

cuyos autovalores son las energías ε_i . En este punto, estamos exponiendo el caso de un espectro discreto y su extensión al caso continuo es inmediata. Si para cada energía ε_i existe un único autovector $|\psi_i\rangle$, decimos que el espectro es *no degenerado*; mientras que si para una energía hay dos o más autovectores, decimos que el espectro está *degenerado*¹⁰. En forma más específica, si a un autovalor le corresponden N estados diferentes, decimos que el orden de la degeneración es N .

Consideremos ahora un observable arbitrario \hat{A} . En la ec. (5.26), mostramos la ecuación de autovalores y autovectores para encontrar una base en la que este operador es diagonal,

$$\hat{A}|\varphi_i\rangle = \lambda_i |\varphi_i\rangle, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Intuimos que el operador Hamiltoniano es un operador privilegiado. Dentro del marco formal de los postulados, aún no hemos llegado a la ecuación de Schrödinger, pero ya vimos esta ecuación para la Mecánica Ondulatoria y sabemos que está vinculada con el Hamiltoniano. Luego, una pregunta válida es si siempre en la base $\{|\psi_j\rangle\}$, en la que el Hamiltoniano es diagonal, también lo es el observable \hat{A} . La respuesta es que esto no ocurre siempre. En la mayoría de los casos, elegimos observables que tienen una base común con el Hamiltoniano y esto lo hacemos por conveniencia.

Cuando se habla de estados degenerados o no degenerados, estamos pensando en la energía como observable y en la base $\{|\psi_j\rangle\}$, en la que el Hamiltoniano es diagonal. Por extensión, si para un autovalor λ_i del observable \hat{A} , existen varios estados $|\varphi_j\rangle$ con el mismo autovalor, hablamos de degeneración.

¹⁰En astrofísica se emplean las palabras *degenerado* y *no degenerado*, con un significado diferente: un sistema se dice no degenerado cuando se pueden dejar de lado los efectos cuánticos; mientras que un sistema degenerado debe tratarse cuánticamente. De hecho, la frontera entre estos dos límites es débil, por lo cual se habla de “sistemas altamente degenerados” o “sistemas débilmente degenerados”, etc.

Cuando lleguemos a los postulados dependientes del tiempo, introduciremos al operador Hamiltoniano como si lo nombráramos por primera vez. En realidad, es el vínculo del operador Hamiltoniano con la evolución temporal lo que debemos postular. En el segundo postulado, decimos que a cada observable le corresponde un operador hermítico. No es una sorpresa el que la energía sea un observable. Se podría hablar de un operador hermítico, cuyo observable es la energía, sin nombrarlo como "Hamiltoniano". Confiemos en que el nombrar en estas líneas el término Hamiltoniano no induzca a cometer algún error.

Cuarto Postulado: de las probabilidades. Distinguimos tres casos y estableceremos las condiciones generales solo en el primer caso, pues su extensión a los otros casos es inmediata:

i. *Estados discretos, no degenerados:* cuando se mide un observable \hat{A} , sobre un estado $|\varphi\rangle = \sum_{j=1}^n c_j |\varphi_j\rangle$, la probabilidad de obtener un autovalor λ_k (con $\hat{A}|\varphi_j\rangle = \lambda_j |\varphi_j\rangle$), es,

$$P_k = |\langle \varphi_k | \varphi \rangle|^2 = |c_k|^2.$$

ii. *Estados discretos, N-degenerados:* cuando se mide un observable \hat{A} , sobre un estado $|\varphi\rangle = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^N c_j^i |\varphi_j^i\rangle$ (el índice de suma i , es sobre los estados degenerados), la probabilidad de obtener un autovalor λ_k , es,

$$P_k = \sum_{i=1}^N |\langle \varphi_k^i | \varphi \rangle|^2 = \sum_{i=1}^N |c_k^i|^2,$$

donde por medio de la notación $\{\varphi_j^i\}$, indicamos el subconjunto de estados que tienen el mismo autovalor λ_j .

iii. *Estados continuos, no degenerados:* cuando se mide un observable \hat{A} , sobre un estado $|\varphi\rangle$, la probabilidad de obtener un valor comprendido entre $\lambda(\nu)$ y $\lambda(\nu + d\nu)$ (con $\hat{A}|\varphi(\nu)\rangle = \lambda(\nu) |\varphi(\nu)\rangle$), es,

$$P_\nu = |\langle \varphi(\nu) | \varphi \rangle|^2 d\nu = |c(\nu)|^2 d\nu.$$

Podrían considerarse varios casos más: estados continuos con espectro degenerado, mezcla de estados continuos y discretos con o sin degeneración, etc. Todos estos casos, sin embargo, resultan de aplicar este postulado en sus diferentes casos y no requieren de extender el mismo postulado.

Analizaremos dos consecuencias importantes del cuarto postulado.

Interferencia cuántica

En primer lugar y pensando en un espectro discreto, no degenerado, consideremos dos estados diferentes $|\varphi_I\rangle$ y $|\varphi_{II}\rangle$, tales que $\langle\varphi_I|\varphi_{II}\rangle = 0$. Medimos la probabilidad de obtener un λ_n cuando el sistema se encuentra en un estado $|\varphi_I\rangle$, obtenemos,

$$P_n^I = |\langle\varphi_n|\varphi_I\rangle|^2,$$

luego, consideramos la probabilidad de obtener un λ_n cuando el sistema se encuentra en un estado $|\varphi_{II}\rangle$,

$$P_n^{II} = |\langle\varphi_n|\varphi_{II}\rangle|^2,$$

pongamos ahora que el sistema se encuentra en un estado,

$$|\varphi\rangle = b_I|\varphi_I\rangle + b_{II}|\varphi_{II}\rangle,$$

donde por normalización, $|b_I|^2 + |b_{II}|^2 = 1$. La probabilidad de obtener un λ_n es,

$$\begin{aligned} P_n &= |\langle\varphi_n|\varphi\rangle|^2 = |b_I\langle\varphi_n|\varphi_I\rangle + b_{II}\langle\varphi_n|\varphi_{II}\rangle|^2 \\ &= |b_I|^2 P_n^I + |b_{II}|^2 P_n^{II} + b_I^* b_{II} \langle\varphi_I|\varphi_n\rangle \langle\varphi_n|\varphi_{II}\rangle + \\ &\quad + b_I b_{II}^* \langle\varphi_n|\varphi_I\rangle \langle\varphi_{II}|\varphi_n\rangle. \end{aligned}$$

Los dos primeros términos de la derecha de esta expresión son los esperados por la estadística aplicada a problemas no cuánticos. Los últimos dos términos son *interferencias cuánticas*. Las interferencias cuánticas juegan un papel importante en muchos problemas físicos. En este punto solo hemos mostrado una posible fuente de interferencias cuánticas.

Valor medio de un observable

Consideremos un conjunto muy grande de sistemas cuánticos, todos en el mismo estado cuántico y sin interacción entre ellos. Asumamos que cada sistema se encuentra en un estado $|\psi\rangle$. Sobre cada sistema, medimos un observable \hat{A} . Experimentalmente, el valor medio del observable se obtiene midiendo el valor de \hat{A} en cada sistema y promediando. Es importante resaltar que mido \hat{A} solo una vez en cada sistema, todos en el mismo estado $|\psi\rangle$. Demos un ejemplo. Sabemos del tercer postulado que al medir solo podemos obtener un autovalor de \hat{A} . Supongamos que se obtiene el autovalor λ_1 tres veces, λ_2 cinco veces y λ_3 dos veces. El valor medio *medido* de \hat{A} , es,

$$\langle \hat{A} \rangle_{exp} = \frac{3\lambda_1 + 5\lambda_2 + 2\lambda_3}{10},$$

donde en el denominador tenemos $N = 10$, que es el número total de medidas. En el valor medio se colocó un subíndice *exp*, para resaltar que este es el valor medio que resulta del experimento. Podemos reescribir esta expresión como,

$$\langle \hat{A} \rangle_{exp} = \frac{3}{10}\lambda_1 + \frac{5}{10}\lambda_2 + \frac{2}{10}\lambda_3,$$

donde el factor $\frac{3}{10}$ es la probabilidad de obtener el valor λ_1 , etc.

Pensemos ahora en el valor medio desde el punto de vista cuántico. Para ello, escribamos al estado $|\psi\rangle$, como,

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\psi_i\rangle,$$

donde los estados $|\psi_i\rangle$, son solución de la ecuación,

$$\hat{A}|\psi_i\rangle = \lambda_i|\psi_i\rangle.$$

En estas condiciones, ya habíamos visto (ec. 5.29), que el valor medio de \hat{A} , resulta,

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_{i=1} |c_i|^2 \lambda_i, \quad (5.33)$$

donde no explicitamos hasta qué valor se debe sumar, pues no queremos que se confunda con el N del ejemplo. En el ejemplo, $N = 10$, mientras que la suma llegaría a tres, pues tenemos λ_1 , λ_2 y λ_3 . En esta expresión, al valor medio le agregamos un subíndice ψ , para recordar que se trata del valor medio calculado empleando el estado.

Del cuarto postulado, tenemos que en el límite para $N \rightarrow \infty$, tenemos,

$$\boxed{\langle \hat{\mathcal{A}} \rangle_{\psi} = \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle_{exp}} \quad (5.34)$$

Este es un resultado importante, pues vincula el resultado experimental de muchas medidas, con el valor calculado cuánticamente. Naturalmente, experimentalmente no podemos cumplir con la condición $N \rightarrow \infty$, pero sabemos que con un $N \gg 1$, si cometemos algún error, éste es muy pequeño.

Algunos autores postulan este resultado. Adoptamos el punto de vista de [3], donde se entiende que la expresión dada por la ec. (5.34), es un corolario del tercer y cuarto postulado.

Quinto Postulado: de la acción de la medida. Si la medida de un observable \hat{A} sobre un estado $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n c_i |\varphi_i\rangle$, da como resultado un autovalor λ_n , inmediatamente después de la medida el estado del sistema será,

$$|\psi\rangle_{después} = \frac{\hat{\mathcal{P}}_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \hat{\mathcal{P}}_n | \psi \rangle}},$$

donde $\hat{\mathcal{P}}_n$ es el proyector sobre el estado con autovalor λ_n . Si se trata de un estado no degenerado, entonces,

$$\hat{\mathcal{P}}_n = |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|,$$

lo cual da como resultado,

$$|\psi\rangle_{después} = |\varphi_n\rangle,$$

mientras que si el estado está N -degenerado, la función de onda antes de medir la escribimos como,

$$|\varphi\rangle = \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^N c_j^i |\varphi_j^i\rangle,$$

mientras que el proyector es,

$$\hat{\mathcal{P}}_n = \sum_{i=1}^N |\varphi_n^i\rangle \langle \varphi_n^i|,$$

de este modo, la función de onda después de la medida resulta,

$$|\varphi\rangle_{después} = \sum_{i=1}^N c_n^i |\varphi_n^i\rangle / \left(\sum_{i=1}^N |c_n^i|^2 \right).$$

Este es sin dudas, el postulado más impactante. Debido a la inclusión del caso degenerado, el postulado resulta un poco largo. Nos limitamos al caso no degenerado y pongamos el postulado en términos simples por medio de un ejemplo. Supongamos que tenemos un espacio de Hilbert de dimensión tres y que nuestra función de onda inicial es una función de onda mezcla, dada por,

$$|\psi\rangle = c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle + c_3|\varphi_3\rangle, \quad (5.35)$$

donde $|\varphi_i\rangle$ ($i = 1, 2, 3$) son los autovectores de un observable \hat{A} ; esto es, $\hat{A}|\varphi_i\rangle = \lambda_i|\varphi_i\rangle$. Efectuamos la medida de \hat{A} y naturalmente podemos obtener alguno de los tres autovalores λ_1 , λ_2 ó λ_3 , por lo que aprendimos del tercer postulado. Supongamos arbitrariamente que obtenemos λ_3 , la función de onda *después* de la medida cambia. La nueva función de onda es ahora,

$$|\psi\rangle = |\varphi_3\rangle.$$

En este caso, preferimos no escribir un subíndice “después”. Se habla de “colapso” de la función de onda. La medida altera profundamente la función de onda. El sistema es alterado radicalmente por la acción de ser observado. En este momento, uno se debe estar preguntando: ¿por qué el autovalor λ_3 ? Pudo ser cualquiera de los tres autovalores y no sabemos *a priori* cuál de los tres vamos a obtener. Pero sí podemos decir con qué probabilidad podremos obtener cada uno. Del cuarto postulado, sabemos que esa probabilidad es,

$$P_i = |c_i|^2,$$

naturalmente vale $P_3 = |c_3|^2$ para el ejemplo y suponiendo valores no nulos para todos los c_i , sabemos también que $|c_3|^2 < 1$, esto es, menor estricto, pues no puede valer 1.

¿Qué ocurre si sobre esta función de onda, medimos nuevamente \hat{A} ? La respuesta es inmediata solo si el operador \hat{A} , conmuta con el Hamiltoniano¹¹. En ese caso, vamos a obtener λ_3 , pero esta vez con probabilidad 1, pues la función de onda tiene una sola componente, que es $|\varphi_3\rangle$. Si sigo midiendo indefinidamente \hat{A} , seguiremos obteniendo siempre el mismo valor.

¹¹Debemos colocar aquí esta advertencia sobre la conmutación con el operador Hamiltoniano, para no inducir a un error en el desarrollo del ejemplo. Solo cuando veamos los postulados que dependen del tiempo lograremos comprender esta restricción.

Hagamos un pequeño paréntesis en esta discusión para pensar en los valores medios. Dado el estado $|\psi\rangle$ de la ec. (5.35), el valor medio de \hat{A} , es,

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = |c_1|^2 \lambda_1 + |c_2|^2 \lambda_2 + |c_3|^2 \lambda_3.$$

Por el tercer postulado sabemos que si realizamos una única medida obtendremos algún λ_i , con una probabilidad $|c_i|^2$, según el cuarto postulado. Por otra parte, el quinto postulado nos dice que después de la medida colapsa la función de onda y a partir de ese instante obtendremos el mismo autovalor. Es por ello que cuando discutimos el valor medio de un operador, hablamos de *un conjunto muy grande de sistemas, todos en el mismo estado cuántico*. Sobre cada sistema, realizamos una única medida.

Volvamos al desarrollo de nuestro ejemplo. En lo que sigue, trabajaremos empleando la siguiente hipótesis:

Hipótesis: consideraremos observables \hat{A} , \hat{B} y \hat{C} , que conmutan con el Hamiltoniano, pero no necesariamente entre sí.

Pensemos que tenemos una función de onda colapsada en $|\varphi_3\rangle$. Ya establecimos que si seguimos midiendo \hat{A} , obtendremos el mismo autovalor. Ahora bien, consideremos un segundo operador \hat{B} , tal que conmuta con \hat{A} . Por el teorema dado por la expresión (5.30), sabemos que los dos operadores tienen la misma base. Luego, para \hat{B} , obtendremos su autovalor b_3 con probabilidad uno. Si luego de medir \hat{B} , medimos \hat{A} nuevamente, solo podremos obtener λ_3 . Es en este caso que por abuso de lenguaje se habla de medidas “simultáneas”. No lo son en el sentido temporal, sino que podemos medir estas dos cantidades, según cualquier orden sin alterar el resultado a partir del colapso de la función de onda.

Medimos ahora un tercer operador, \hat{C} , tal que $[\hat{A}, \hat{C}] \neq 0$. Al medir \hat{C} y por el tercer postulado, solo podemos obtener un autovalor de \hat{C} . Pero por el teorema en la expresión (5.30), sabemos que \hat{A} y \hat{C} **no pueden** tener una base común, pues de tenerla, conmutarían. Luego debemos escribir al estado $|\varphi_3\rangle$ en la base de \hat{C} . Sea,

$$\hat{C}|\phi_i\rangle = \nu_i|\phi_i\rangle,$$

entonces,

$$|\varphi_3\rangle = \tilde{c}_1|\phi_1\rangle + \tilde{c}_2|\phi_2\rangle + \tilde{c}_3|\phi_3\rangle.$$

Medimos ahora \hat{C} y supongamos que obtenemos ν_1 (la probabilidad es $P_1 = |\tilde{c}_1|^2$). Pero

ahora, la función de onda sufrió un nuevo colapso en,

$$|\chi\rangle = |\phi_1\rangle.$$

Obviamente, si seguimos midiendo \hat{C} seguiremos obteniendo ν_1 con probabilidad uno. Pero, ¿qué ocurre si medimos nuevamente \hat{A} ? La función de onda es $|\phi_1\rangle$, que no es un autovector de \hat{A} , por lo cual debemos escribir $|\phi_1\rangle$ en la base de \hat{A} :

$$|\phi_1\rangle = \tilde{c}_1|\varphi_1\rangle + \tilde{c}_2|\varphi_2\rangle + \tilde{c}_3|\varphi_3\rangle, \quad (5.36)$$

donde los coeficientes multiplicativos \tilde{c}_i , en principio deben ser diferentes de los coeficientes c_i de la ec. (5.35). Tenemos nuevamente un estado mezcla respecto de la base del operador \hat{A} . Si medimos nuevamente este observable, se producirá un nuevo colapso del estado. Hagamos un resumen de este ejemplo:

1. Consideramos un observable \hat{A} , tal que $[\hat{A}, \hat{\mathcal{H}}] = 0$, donde $\hat{\mathcal{H}}$ es el Hamiltoniano del sistema. Consideramos un espacio de Hilbert de dimensión tres y que cualquier otro observable conmuta también con el Hamiltoniano.
2. Escribimos la base de \hat{A} , como $\{|\varphi_i\rangle\}$. Partimos de un estado inicial mezcla $|\psi\rangle$, de la forma,

$$|\psi\rangle = c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle + c_3|\varphi_3\rangle.$$

3. Se mide \hat{A} , obteniendo como resultado λ_3 y el estado colapsó en,

$$|\psi\rangle = |\varphi_3\rangle,$$

donde la probabilidad de obtener este valor fue $P_3 = |c_3|^2$.

4. Se mide nuevamente \hat{A} , obteniendo como resultado λ_3 , esta vez con probabilidad uno.
5. Se mide ahora otro observable \hat{B} , tal que $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ y se obtiene b_3 , que es el autovalor de \hat{B} correspondiente al estado $|\varphi_3\rangle$, con probabilidad uno.
6. Se mide ahora un tercer observable \hat{C} , tal que $[\hat{A}, \hat{C}] \neq 0$. El primer paso es expresar $|\varphi_3\rangle$ como una combinación lineal de autovectores de \hat{C} :

$$|\varphi_3\rangle = \tilde{c}_1|\phi_1\rangle + \tilde{c}_2|\phi_2\rangle + \tilde{c}_3|\phi_3\rangle.$$

7. Al medir \hat{C} , se obtiene ν_1 , y la función de onda colapsa en $|\phi_1\rangle$.
8. Si medimos nuevamente \hat{A} , debemos escribir $|\phi_1\rangle$ en función de los vectores de la base del operador que voy a usar para medir,

$$|\phi_1\rangle = \tilde{c}_1|\varphi_1\rangle + \tilde{c}_2|\varphi_2\rangle + \tilde{c}_3|\varphi_3\rangle,$$

pudiendo ahora obtener nuevamente alguno de los tres posibles valores para este observable.

Recordemos que cuando discutimos el segundo postulado, dijimos que la medida de una cantidad física desde el punto de vista cuántico, se parecía a tirar un dado: solo puede obtenerse uno de los seis números. Los números son 1, 2, 3, 4, 5 y 6. El valor medio de estos números es,

$$\frac{1 + 2 + 3 + 4 + 5 + 6}{6} = 3,5.$$

Está claro, más allá de su valor medio, que no podemos arrojar el dado y obtener 3,5. Digamos que arrojamos el dado y obtenemos el número 5. Cuando el segundo postulado nos dice que se puede obtener solo algún autovalor del observable, no debería asombrarnos tanto, pues es similar a lo que ocurre cuando arrojamos un dado, tiro una moneda, etc. Pero el quinto postulado nos dice que la función de onda colapsa en el autovector correspondiente al autovalor obtenido. ¡Es como si al arrojar el dado y obtener 5, el resto de las caras del dado desaparecen y solo queda la cara con el número 5!

Muchas veces se ha nombrado el hecho de que en Mecánica Cuántica el acto de medir altera al objeto observado. Eso se enuncia como algo conceptual y enseguida se muestra el Principio de Incertidumbre de Heisenberg entre la posición y la cantidad de movimiento para decir que cuánticamente no podemos conocer la trayectoria. Llegamos entonces al enunciado analítico de tal afirmación: al medir un observable colapsa la función de onda y eso cambia nuestros cálculos.

5.2. Postulados dependientes del tiempo

Sea $|\psi\rangle_1$ un estado y \hat{A}_1 un operador asociado a cierto observable. Consideramos ahora una transformación \hat{U}_{21} que transforma al estado $|\psi\rangle_1$ en otro estado $|\psi\rangle_2$, tal que

el operador \hat{U}_{21} no altere la norma, de este modo tenemos,

$$\boxed{|\psi\rangle_2 = \hat{U}_{21}|\psi\rangle_1} \quad (5.37)$$

Del hecho de que el operador no altera la norma del estado, resulta,

$${}_1\langle\psi|\psi\rangle_1 = {}_2\langle\psi|\psi\rangle_2 = {}_1\langle\psi|\hat{U}_{21}^\dagger\hat{U}_{21}|\psi\rangle_1, \quad (5.38)$$

lo cual implica que,

$$\hat{U}_{21}^\dagger\hat{U}_{21} = \hat{I}. \quad (5.39)$$

Los operadores que mantienen la norma se denominan *operadores unitarios*. Notamos que el adjunto del operador por el operador mismo, nos da la identidad; lo cual nos dice que la inversa del operador es su adjunto. Por otra parte, si \hat{U}_{21} no es la identidad, entonces \hat{U}_{21} no es hermítico ya que no es autoadjunto.

Buscamos ahora un operador \hat{A}_2 tal que al actuar sobre $|\psi\rangle_2$, nos de el mismo resultado que \hat{A}_1 actuando sobre $|\psi\rangle_1$, esto es, debemos pedir que,

$${}_1\langle\psi|\hat{A}_1|\psi\rangle_1 = {}_2\langle\psi|\hat{A}_2|\psi\rangle_2, \quad (5.40)$$

pero de la ec. (5.37), tenemos,

$${}_1\langle\psi|\hat{A}_1|\psi\rangle_1 = {}_2\langle\psi|\hat{A}_2|\psi\rangle_2 = {}_1\langle\psi|\hat{U}_{21}^\dagger\hat{A}_2\hat{U}_{21}|\psi\rangle_1, \quad (5.41)$$

tenemos entonces,

$$\hat{A}_1 = \hat{U}_{21}^\dagger\hat{A}_2\hat{U}_{21}, \quad (5.42)$$

como $\hat{U}_{21}^\dagger = \hat{U}_{21}^{-1}$, multiplicando la igualdad a derecha por \hat{U}_{21}^\dagger y a izquierda por \hat{U}_{21} , tenemos,

$$\boxed{\hat{A}_2 = \hat{U}_{21}\hat{A}_1\hat{U}_{21}^\dagger} \quad (5.43)$$

Las ecs. (5.37) y (5.43), nos dicen que dado cualquier operador unitario, podemos encontrar otro **esquema**, que represente la misma física. Esto es, que arroje el mismo valor para los observables.

Sexto postulado: sobre el espacio de Hilbert. El espacio de Hilbert \mathcal{H} de los estados de un sistema cuántico en un instante t , arbitrario, es idéntico al de los estados del sistema en un instante inicial t_0 .

Esto nos dice que el espacio de Hilbert \mathcal{H} , no depende del tiempo. Para aclarar las ideas, pensemos en el espacio convencional R^3 , donde definimos un sistema de ejes coordenados cuyos versores son \hat{i} , \hat{j} y \hat{k} . Eventualmente, estos versores puede rotar o trasladarse, con lo cual podemos pensar a esos versores como dependientes del tiempo, esto es, $\hat{i}(t)$, $\hat{j}(t)$ y $\hat{k}(t)$; sin embargo, el espacio R^3 sigue siendo el mismo. Del mismo modo, de la Mecánica Ondulatoria sabemos que las funciones de onda dependen del tiempo y son las funciones de onda (al igual que los versores para R^3), lo que determina al espacio de Hilbert. Nuevamente, entonces, este postulado nos dice que el espacio de Hilbert \mathcal{H} , no depende del tiempo.

Al comienzo de la sección de los Postulados dependientes del tiempo, expusimos la noción de “esquema”. Construimos un conjunto de estados y operadores asociados con observables, que constituyen nuestro primer esquema. A partir de ese esquema, por medio de un operador unitario, pueden encontrarse infinitos esquemas que representen la misma física; esto es, que al evaluar un observable se encuentre el mismo valor, más allá del esquema.

Antes de dar el siguiente postulado, vale la pena designar dos esquemas que nos son útiles. El primero, es el llamado *esquema de Schrödinger*, en el que los estados dependen del tiempo, pero los operadores asociados con observables, no. El segundo, es el *esquema de Heisenberg*, en el que los estados no dependen del tiempo, pero si dependen los operadores asociados con observables. Es conveniente visualizar mejor estos esquemas:

- *esquema de Schrödinger*: $|\psi\rangle_S = |\psi(t)\rangle_S$; pero, $\hat{O}_S \neq f(t)$,
- *esquema de Heisenberg*: $|\psi\rangle_H \neq g(t)$; pero, $\hat{O}_H = \hat{O}_H(t)$,

donde agregamos los subíndices S y H (Schrödinger y Heisenberg, respectivamente), para señalar el esquema en el que se está trabajando. Esto lo hacemos solo cuando discutimos diferentes esquemas.

Séptimo postulado: sobre la evolución temporal en el esquema de Heisenberg: Sea un intervalo de tiempo $\Delta t = t - t_0$, durante el cual no se hacen medidas.

- i) El estado $|\psi\rangle_H$ del sistema es el mismo durante todo el intervalo.
- ii) Si el sistema está aislado, hay invarianza frente a traslaciones en el tiempo y un

operador $\hat{O}_H(t)$ asociado con un observable, evoluciona en el tiempo según la fórmula,

$$\hat{O}_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}(t_0)(t-t_0)} \hat{O}_H(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}(t_0)(t-t_0)}.$$

Al operador $\hat{\mathcal{H}}$, generador de las traslaciones infinitesimales en el tiempo, lo llamaremos Hamiltoniano del sistema y al observable asociado lo llamaremos energía.

Notablemente, recién ahora introducimos al Hamiltoniano, como el operador responsable de las traslaciones temporales (ó evolución temporal). Existe una pregunta práctica que debemos formular: ¿cómo se trabaja cuando tenemos un operador en un exponencial? Una alternativa es hacer un desarrollo en serie del exponencial, actuar con el operador, tratar de encontrar un término general y sumar la serie. Otra alternativa es tomar la expresión del postulado y derivarla respecto del tiempo. La cuenta es sencilla y conduce rápidamente a,

$$\frac{d\hat{O}_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}(t_0), \hat{O}_H(t)]. \quad (5.44)$$

Si el operador $\hat{O}_H(t)$ es el Hamiltoniano mismo, ya que cualquier operador conmuta consigo mismo, encontramos que el Hamiltoniano no depende del tiempo. El resultado no debe sorprendernos, pues sabemos que en un sistema aislado la energía es una constante de movimiento. Como el Hamiltoniano no depende del tiempo, tiene la misma expresión tanto en el esquema de Heisenberg, como en el de Schrödinger. Luego, a partir de ahora, escribiremos al Hamiltoniano como $\hat{\mathcal{H}}$ (recordemos que no depende del tiempo). Por conveniencia, reescribimos la ec. (5.44), como,

$$\boxed{\frac{d\hat{O}_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{O}_H(t)]} \quad (5.45)$$

Análogamente, cualquier otro operador que conmuta con el Hamiltoniano es independiente del tiempo y por lo tanto, es una constante de movimiento.

5.3. Evolución temporal

El primer paso es buscar un operador unitario $\hat{U}(t)$, que vincule los esquemas de Schrödinger y Heisenberg,

$$\hat{O}_S(t) = \hat{U}(t)\hat{O}_H(t)\hat{U}^\dagger(t), \quad (5.46)$$

pero en el esquema de Schrödinger debe valer que los operadores no dependen del tiempo, por lo tanto debe verificarse que,

$$\hat{O}_S(t) = \hat{O}_S(t_0).$$

Proponemos para $\hat{U}(t)$, el valor,

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}. \quad (5.47)$$

Empleando ahora el séptimo postulado,

$$\begin{aligned} \hat{O}_S(t) &= \hat{U}(t)\hat{O}_H(t)\hat{U}^\dagger(t) \\ &= \hat{U}(t)e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}\hat{O}_H(t_0)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}\hat{U}^\dagger(t) \\ &= \hat{U}(t_0)\hat{O}_H(t_0)\hat{U}^\dagger(t_0) \\ &= \hat{O}_S(t_0). \end{aligned} \quad (5.48)$$

De este modo, comprobamos que el operador $\hat{U}(t)$, dado por la ec. (5.47), es el operador unitario que vincula ambos esquemas. Luego, la relación entre los estados, es,

$$|\psi(t)\rangle_S = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi\rangle_H. \quad (5.49)$$

Derivamos esta expresión respecto del tiempo, con lo que obtenemos,

$$\frac{d|\psi(t)\rangle_S}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi\rangle_H\right), \quad (5.50)$$

pero el término entre paréntesis de la derecha es justamente $|\psi(t)\rangle_S$, con lo cual podemos escribir,

$$\frac{d|\psi(t)\rangle_S}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle_S, \quad (5.51)$$

que es la ecuación de Schrödinger, que no necesitamos postular. Algunos autores prefieren postular la ecuación de Schrödinger y encontrar posteriormente las propiedades de invarianza de las traslaciones en el tiempo.

5.4. Valor medio y autovalores

En la ec. (5.40) mostramos que el valor medio de un operador es independiente del esquema. En particular,

$$\langle\hat{O}_H\rangle = \langle\hat{O}_S\rangle. \quad (5.52)$$

Mostraremos ahora que los autovalores son también independientes del esquema. Partimos del esquema de Schrödinger,

$$\hat{O}_S |\psi(t)\rangle_S = \lambda |\psi(t)\rangle_S. \quad (5.53)$$

En esta ecuación, empleamos las ecs. (5.46) y (5.49), para reemplazar el operador y el estado por sus correspondientes en el esquema de Heisenberg,

$$\hat{U}(t)\hat{O}_H(t)\hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t) |\psi\rangle_H = \lambda \hat{U}(t) |\psi\rangle_H, \quad (5.54)$$

multiplicamos por la izquierda por $\hat{U}^\dagger(t)$, recordando que $\hat{U}^\dagger(t)\hat{U}(t) = \hat{U}(t)\hat{U}^\dagger(t) = \hat{I}$, tenemos finalmente,

$$\hat{O}_H(t) |\psi\rangle_H = \lambda |\psi\rangle_H. \quad (5.55)$$

Lo cual demuestra que el autovalor es independiente del esquema empleado.

5.5. Relaciones de incertidumbre de Heisenberg

En el Capítulo 1 empleamos el principio de incertidumbre de Heisenberg. En la forma en que lo empleamos, puede haber parecido un postulado, pero no lo es. Se trata de un resultado a partir de los postulados expuestos. Veremos enseguida que surge una relación de incertidumbre cada vez que dos operadores asociados con observables, no conmutan. Consideremos dos operadores hermíticos \hat{A} y \hat{B} cualesquiera, tales que no conmutan entre sí. Podemos escribir,

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}. \quad (5.56)$$

Empleando la propiedad $(\hat{F}\hat{G})^\dagger = \hat{G}^\dagger\hat{F}^\dagger$ (ver Subsec. 5.1.2), puede demostrarse que \hat{C} es hermítico. Comencemos la demostración del principio de Incertidumbre de Heisenberg. En primer lugar, sabemos que el valor medio de cualquier observable viene dado por,

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle, \quad (5.57)$$

y la incertidumbre asociada con ese valor medio resulta,

$$\Delta A = \sqrt{\langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 | \psi \rangle}. \quad (5.58)$$

Por conveniencia, llamamos ahora,

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{A}} &\equiv \hat{\mathcal{A}} - \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle, \\ \tilde{\mathcal{B}} &\equiv \hat{\mathcal{B}} - \langle \hat{\mathcal{B}} \rangle.\end{aligned}\quad (5.59)$$

De este modo, podemos escribir,

$$\begin{aligned}(\Delta\mathcal{A})^2 (\Delta\mathcal{B})^2 &= \langle \psi | \tilde{\mathcal{A}}^2 | \psi \rangle \langle \psi | \tilde{\mathcal{B}}^2 | \psi \rangle \\ &= (\langle \psi | \tilde{\mathcal{A}}^\dagger) (\tilde{\mathcal{A}} | \psi \rangle) (\langle \psi | \tilde{\mathcal{B}}^\dagger) (\tilde{\mathcal{B}} | \psi \rangle).\end{aligned}\quad (5.60)$$

Para evitar dudas, sabemos que la acción de un operador sobre un vector del espacio de Hilbert, es otro vector del espacio de Hilbert. Luego, definimos,

$$\begin{aligned}|\psi_{\mathcal{A}}\rangle &\equiv \tilde{\mathcal{A}}|\psi\rangle, \\ |\psi_{\mathcal{B}}\rangle &\equiv \tilde{\mathcal{B}}|\psi\rangle.\end{aligned}\quad (5.61)$$

Reescribimos la ec. (5.60), como,

$$(\Delta\mathcal{A})^2 (\Delta\mathcal{B})^2 = \langle \psi_{\mathcal{A}} | \psi_{\mathcal{A}} \rangle \langle \psi_{\mathcal{B}} | \psi_{\mathcal{B}} \rangle.\quad (5.62)$$

Empleamos ahora la desigualdad de Schwartz (ver Subsec. 5.6.2), que nos dice que,

$$\langle \psi_{\mathcal{A}} | \psi_{\mathcal{A}} \rangle \langle \psi_{\mathcal{B}} | \psi_{\mathcal{B}} \rangle \geq |\langle \psi_{\mathcal{A}} | \psi_{\mathcal{B}} \rangle|^2,\quad (5.63)$$

de este modo, tenemos,

$$(\Delta\mathcal{A})^2 (\Delta\mathcal{B})^2 \geq |\langle \psi_{\mathcal{A}} | \psi_{\mathcal{B}} \rangle|^2 = |\langle \psi | \tilde{\mathcal{A}}\tilde{\mathcal{B}} | \psi \rangle|^2,\quad (5.64)$$

donde hemos omitido el dagado de los operadores, pues al ser hermíticos son autoadjuntos. Escribimos ahora la siguiente identidad:

$$\tilde{\mathcal{A}}\tilde{\mathcal{B}} = \frac{\tilde{\mathcal{A}}\tilde{\mathcal{B}} + \tilde{\mathcal{B}}\tilde{\mathcal{A}}}{2} + \frac{\tilde{\mathcal{A}}\tilde{\mathcal{B}} - \tilde{\mathcal{B}}\tilde{\mathcal{A}}}{2}.\quad (5.65)$$

En la derecha de esta expresión, el segundo numerador es el conmutador $[\tilde{\mathcal{A}}, \tilde{\mathcal{B}}]$. El primer numerador, se denomina “anticonmutador”:

$$\{\tilde{\mathcal{A}}, \tilde{\mathcal{B}}\} \equiv \tilde{\mathcal{A}}\tilde{\mathcal{B}} + \tilde{\mathcal{B}}\tilde{\mathcal{A}}.\quad (5.66)$$

Empleando nuevamente la propiedad $(\hat{\mathcal{F}}\hat{\mathcal{G}})^\dagger = \hat{\mathcal{G}}^\dagger\hat{\mathcal{F}}^\dagger$, se puede ver que el anticonmutador $\{\tilde{\mathcal{A}}, \tilde{\mathcal{B}}\}$, es un operador hermítico: por lo tanto, su valor medio es real.

Sobre el término que contiene al conmutador, usando las definiciones dadas por las ecs. (5.59), es simple demostrar que,

$$[\tilde{\mathcal{A}}, \tilde{\mathcal{B}}] = [\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}], \quad (5.67)$$

y dado que el conmutador $[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}] = i\hat{\mathcal{C}}$, con $\hat{\mathcal{C}}$ hermítico, entonces el valor medio del conmutador $[\tilde{\mathcal{A}}, \tilde{\mathcal{B}}]$, es imaginario puro.

Con el fin de ser reemplazado en la ec. (5.64), usando la expresión (5.65), junto a las definiciones de conmutadores y anticonmutadores, escribimos,

$$|\langle \psi | \tilde{\mathcal{A}}\tilde{\mathcal{B}} | \psi \rangle|^2 = \left| \langle \psi | \left(\frac{1}{2}\{\tilde{\mathcal{A}}, \tilde{\mathcal{B}}\} + \frac{1}{2}[\tilde{\mathcal{A}}, \tilde{\mathcal{B}}] \right) | \psi \rangle \right|^2. \quad (5.68)$$

Llamemos,

$$\begin{aligned} \langle \psi | \frac{1}{2}\{\tilde{\mathcal{A}}, \tilde{\mathcal{B}}\} | \psi \rangle &\equiv \alpha, \\ \langle \psi | \frac{1}{2}[\tilde{\mathcal{A}}, \tilde{\mathcal{B}}] | \psi \rangle &\equiv i\beta, \end{aligned} \quad (5.69)$$

con $\alpha, \beta \in \text{Re}$, (recordemos que un elemento de matriz es un número). De este modo,

$$|\langle \psi | \tilde{\mathcal{A}}\tilde{\mathcal{B}} | \psi \rangle|^2 = |\alpha + i\beta|^2 = \alpha^2 + \beta^2. \quad (5.70)$$

Reemplazando en la ec. (5.64), tenemos finalmente,

$$\boxed{(\Delta\mathcal{A})^2 (\Delta\mathcal{B})^2 \geq \frac{1}{4}\langle \psi | \{\tilde{\mathcal{A}}, \tilde{\mathcal{B}}\} | \psi \rangle^2 + \frac{1}{4}\langle \psi | \hat{\mathcal{C}} | \psi \rangle^2} \quad (5.71)$$

La cantidad $\langle \psi | \{\tilde{\mathcal{A}}, \tilde{\mathcal{B}}\} | \psi \rangle$, es real; por lo tanto, su cuadrado es positivo. Luego, podemos ignorar este término sin alterar la desigualdad. Además, para operadores canónicos conjuntados vale que $\hat{\mathcal{C}} = \hbar\hat{\mathcal{I}}$. De este modo, tenemos,

$$\boxed{\Delta\mathcal{A} \Delta\mathcal{B} \geq \frac{\hbar}{2}} \quad (5.72)$$

Como comentario final para esta sección, la expresión (5.71) es una igualdad, cuando lo es la desigualdad de Schwartz, esto es, cuando los vectores $|\psi_{\mathcal{A}}\rangle$ y $|\psi_{\mathcal{B}}\rangle$ son paralelos:

$$|\psi_{\mathcal{A}}\rangle = c|\psi_{\mathcal{B}}\rangle,$$

con $c = \text{constante}$. Debemos notar que esta última expresión **no** implica que los operadores tengan una base común. De tenerla, conmutarían y podrían medirse ambos con precisión arbitraria. El tener una base común, implica una relación similar para todos los elementos de la base y esta relación sólo es válida para un elemento particular.

5.6. Corolarios

En esta sección mostraremos algunos resultados que se obtienen a partir de los postulados que mostramos en este capítulo. Muchas de estas propiedades se encuentran extensamente discutidas en [13].

5.6.1. Ortogonalidad de los estados cuánticos

Consideremos un operador hermítico $\hat{\mathcal{A}}$ y dos estados cualesquiera, $|\psi_\alpha\rangle$ y $|\psi_\beta\rangle$, tales que,

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{A}}|\psi_\alpha\rangle &= a_\alpha |\psi_\alpha\rangle, \\ \hat{\mathcal{A}}|\psi_\beta\rangle &= a_\beta |\psi_\beta\rangle,\end{aligned}\tag{5.73}$$

donde pedimos que $a_\alpha \neq a_\beta$. Como el operador $\hat{\mathcal{A}}$ es hermítico, $a_\alpha, a_\beta \in \text{Re}$. Tomamos ahora el complejo conjugado de la segunda ecuación,

$$\begin{aligned}\langle\psi_\beta|\hat{\mathcal{A}}|\psi_\alpha\rangle &= a_\alpha \langle\psi_\beta|\psi_\alpha\rangle, \\ \langle\psi_\beta|\hat{\mathcal{A}}|\psi_\alpha\rangle &= a_\beta \langle\psi_\beta|\psi_\alpha\rangle.\end{aligned}\tag{5.74}$$

Ahora se multiplica por la izquierda la primera ecuación por $\langle\psi_\beta|$ y la segunda por derecha por $|\psi_\alpha\rangle$:

$$\begin{aligned}\langle\psi_\beta|\hat{\mathcal{A}}|\psi_\alpha\rangle &= a_\alpha \langle\psi_\beta|\psi_\alpha\rangle, \\ \langle\psi_\beta|\hat{\mathcal{A}}|\psi_\alpha\rangle &= a_\beta \langle\psi_\beta|\psi_\alpha\rangle.\end{aligned}\tag{5.75}$$

Al restarle a la primera ecuación, la segunda, obtenemos,

$$(a_\alpha - a_\beta) \langle\psi_\beta|\psi_\alpha\rangle = 0.\tag{5.76}$$

Ya que supusimos que $a_\alpha \neq a_\beta$, debemos tener que,

$$\langle \psi_\beta | \psi_\alpha \rangle = 0. \quad (5.77)$$

Lo cual demuestra la ortogonalidad de los estados cuánticos.

En el caso de que para un mismo autovalor existan diferentes estados cuánticos, debemos considerar el subespacio de estados con el mismo autovalor y recurrir al proceso de ortogonalización de Gram–Schmidt.

5.6.2. Demostración de la desigualdad de Schwartz

Recordemos la desigualdad de Schwartz, que reescribimos como,

$$\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle \geq |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2. \quad (5.78)$$

De la expresión misma de la desigualdad, notamos que los vectores no se encuentran necesariamente normalizados. Para demostrar esta propiedad, construimos un ket, de la siguiente forma,

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle - \frac{\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle}{\langle \psi_2 | \psi_2 \rangle} |\psi_2\rangle. \quad (5.79)$$

Sabemos que para cualquier vector vale que,

$$\langle \psi | \psi \rangle \geq 0, \quad (5.80)$$

donde la igualdad vale para el vector nulo. Desarrollamos ahora este producto,

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle + \frac{|\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2}{\langle \psi_2 | \psi_2 \rangle} - 2 \frac{|\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2}{\langle \psi_2 | \psi_2 \rangle} \geq 0, \quad (5.81)$$

de este modo,

$$\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle \geq \frac{|\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2}{\langle \psi_2 | \psi_2 \rangle}, \quad (5.82)$$

multiplicando ahora la desigualdad por $\langle \psi_2 | \psi_2 \rangle$, encontramos la desigualdad de Schwartz.

5.6.3. Operadores canónicos conjugados

No haremos un desarrollo muy profundo de este punto, simplemente lo nombraremos.

Dados los operadores \hat{X} y $\hat{P}_{x,i}$, vemos que:

- Actuando sobre una función $f(x)$, tenemos que $\hat{X}f(x) = xf(x)$ y $\hat{P}_x f(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} f(x)$.
- Actuando sobre una función $g(k)$, tenemos que $\hat{X}g(p) = -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp} g(p)$ y $\hat{P}_x g(p) = pg(p)$.

Por cumplir con esta simetría, se dice que los operadores \hat{X} y \hat{P}_x son canónicos conjugados y su conmutador es una constante, como veremos en la próxima subsección.

5.6.4. Cálculo del conmutador $[\hat{X}, \hat{P}_x]$

Para calcular el conmutador $[\hat{X}, \hat{P}_x]$, hacemos actuar dicho operador sobre una función $f(x)$ arbitraria:

$$\begin{aligned} [\hat{X}, \hat{P}_x]f(x) &= x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} f(x) - \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (x f(x)) \\ &= \frac{\hbar}{i} (x f'(x) - f(x) - x f'(x)) \\ &= i\hbar f(x), \end{aligned} \tag{5.83}$$

donde usamos que $\hat{P}_x = (\hbar/i) d/dx$. De este modo, simplificando la función $f(x)$ en ámbos términos, tenemos,

$$[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar. \tag{5.84}$$

Este conmutador puede calcularse también usando el segundo ítem de la subsección 5.6.3, obteniendo el mismo resultado. Reemplazando este conmutador en la ec. (5.71) y despreciando nuevamente el anticonmutador, tenemos,

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{5.85}$$

De esta manera, demostramos la relación de Incertidumbre de Heisenberg más conocida, que de hecho discutimos desde el primer capítulo.

5.6.5. Teorema de Ehrenfest: evolución temporal del valor medio

En esta subsección discutiremos cómo es la evolución temporal del valor medio de un operador. Para ello y por conveniencia, reproducimos en primer lugar un conjunto de

expresiones ya vistas:

$$\frac{d\hat{O}_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{O}_H(t)], \quad (5.86)$$

$$\hat{O}_S(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}t} \hat{O}_H(t) e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}t}, \quad (5.87)$$

$$|\psi\rangle_H = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}t} |\psi\rangle_S, \quad (5.88)$$

$${}_H\langle\psi| = {}_S\langle\psi| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}t}. \quad (5.89)$$

Tomamos la ec. (5.86) y calculamos su valor medio,

$${}_H\langle\psi| \frac{d\hat{O}_H(t)}{dt} |\psi\rangle_H = {}_H\langle\psi| \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{O}_H(t)] |\psi\rangle_H. \quad (5.90)$$

Analicemos cada lado de la igualdad separadamente. En primer lugar, notamos que como los estados en el esquema de Heisenberg no dependen del tiempo, podemos introducir los estados dentro de la derivada temporal:

$${}_H\langle\psi| \frac{d\hat{O}_H(t)}{dt} |\psi\rangle_H = \frac{d}{dt} ({}_H\langle\psi| \hat{O}_H(t) |\psi\rangle_H) = \frac{d\langle\hat{O}_H\rangle}{dt}. \quad (5.91)$$

Por la ec. (5.52) (ó ec. 5.40), sabemos que $\langle\hat{O}_H\rangle = \langle\hat{O}_S\rangle$, de modo que,

$${}_H\langle\psi| \frac{d\hat{O}_H(t)}{dt} |\psi\rangle_H = \frac{d\langle\hat{O}_S\rangle}{dt}. \quad (5.92)$$

Más allá de la notación, es importante recordar que estamos considerando la variación respecto del tiempo del *valor medio* del operador, donde además del operador aparece el estado. En el esquema de Schrödinger el operador no depende del tiempo, pero el estado sí; por lo cual el valor medio del operador eventualmente puede depender del tiempo.

Tomemos ahora el lado derecho de la igualdad (5.90),

$${}_H\langle\psi| [\hat{\mathcal{H}}, \hat{O}_H(t)] |\psi\rangle_H = {}_H\langle\psi| \hat{\mathcal{H}} \hat{O}_H(t) |\psi\rangle_H - {}_H\langle\psi| \hat{O}_H(t) \hat{\mathcal{H}} |\psi\rangle_H. \quad (5.93)$$

Empleando las ecs. (5.87)-(5.89), junto con $[\hat{\mathcal{H}}, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}t}] = [\hat{\mathcal{H}}, e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}t}] = 0$, obtenemos,

$${}_H\langle\psi| [\hat{\mathcal{H}}, \hat{O}_H(t)] |\psi\rangle_H = {}_S\langle\psi| [\hat{\mathcal{H}}, \hat{O}_S] |\psi\rangle_S. \quad (5.94)$$

De las ecs. (5.92) y (5.94), obtenemos finalmente,

$$\boxed{\frac{d\langle\hat{O}_S\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle[\hat{\mathcal{H}}, \hat{O}_S]\rangle} \quad (5.95)$$

Este resultado es conocido como Teorema de Ehrenfest, donde el operador y el estado están en el esquema de Schrödinger. Recordemos aquel teorema en la Subsección 5.1.2, que nos decía que dos operadores conmutan sí y solo sí tienen una base común. De este modo, si $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{O}_S] = 0$, el operador \hat{O}_S tiene una base común con el Hamiltoniano y su valor medio es independiente del tiempo, como vimos en la Sección 1.6. Por otra parte, si $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{O}_S] \neq 0$ y además, su valor medio es no nulo, entonces el valor medio $\langle \hat{O}_S \rangle$ varía con el tiempo y la ecuación que rige este cambio es la ec. (5.95).

5.6.6. El límite clásico

Esta subsección muestra de un modo simple, el límite clásico para algunas magnitudes físicas. El objetivo es simplemente dar dos ejemplos de este límite con el fin de mostrar cómo a partir del formalismo cuántico, puede llegarse a los resultados conocidos de la mecánica clásica.

Trabajaremos en una dimensión en el esquema de Schrödinger. Denotaremos como \hat{X} y \hat{P} los operadores posición y cantidad de movimiento, respectivamente. Recordemos además que $\hat{P} = (\hbar/i) d/dx$. Además, consideraremos un Hamiltoniano de la forma,

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{X}).$$

Primer ejemplo: evolución con el tiempo del operador \hat{X} .

Tomamos la ec. (5.95) para \hat{X} ,

$$\frac{d\langle \hat{X} \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{\mathcal{H}}, \hat{X}] \rangle,$$

vemos que,

$$\left[\frac{\hat{P}^2}{2m}, \hat{X} \right] = \frac{1}{2m} \left(\hat{P}[\hat{P}, \hat{X}] + [\hat{P}, \hat{X}]\hat{P} \right) = -\frac{1}{2m} \hat{P}i\hbar,$$

ya que $[\hat{P}, \hat{X}] = -i\hbar$. Reemplazando, obtenemos,

$$\langle \hat{P} \rangle = m \frac{d\langle \hat{X} \rangle}{dt},$$

de este modo, el valor medio del impulso es igual a la masa por el valor medio de la velocidad, coincidiendo con el resultado clásico.

Segundo ejemplo: evolución con el tiempo del operador \hat{P} .

Tomamos la ec. (5.95) para \hat{P} ,

$$\frac{d\langle\hat{P}\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle[\hat{\mathcal{H}}, \hat{P}]\rangle = \frac{i}{\hbar} \langle[V(\hat{X}), \hat{P}]\rangle,$$

para evaluar $[V(\hat{X}), \hat{P}]$, vemos su acción sobre una función de onda genérica, $\psi(x)$, recordando que $\hat{P} = (\hbar/i) d/dx$:

$$[V(\hat{X}), \hat{P}]\psi(x) = V(\hat{X})\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi(x)}{dx} - \frac{\hbar}{i}\frac{d(V(\hat{X})\psi(x))}{dx} = -\frac{\hbar}{i}\frac{dV(\hat{X})}{dx}\psi(x),$$

eliminando ahora la función de onda,

$$[V(\hat{X}), \hat{P}] = -\frac{\hbar}{i}\frac{dV(\hat{X})}{dx},$$

obtenemos finalmente,

$$\frac{d\langle\hat{P}\rangle}{dt} = -\left\langle\frac{dV(\hat{X})}{dx}\right\rangle,$$

que es la expresión clásica de la Segunda Ley de Newton.

CAPÍTULO 6

Teoría de perturbaciones independiente del tiempo

Introducción

El punto de partida para resolver un problema físico en Mecánica Cuántica, es proponer un Hamiltoniano que lo represente, junto a sus condiciones iniciales y de contorno con el fin de resolver la ecuación de Schrödinger. Cuando escribimos 'Hamiltoniano' nos referimos naturalmente al potencial que colocamos en la ecuación de Schrödinger, ya que la parte de la energía cinética es común a todos los problemas. Nuestro problema entonces, es el de resolver la ecuación de Schrödinger, que es una ecuación diferencial en derivadas parciales a segundo orden en la posición y a primer orden en el tiempo. En primer lugar, consideraremos potenciales independientes del tiempo, con lo cual solo debemos resolver la ecuación de Schrödinger estacionaria. Aún así, para ciertos potenciales de interés físico, no conocemos una solución a esta ecuación.

Existen diferentes estrategias para abordar este problema. La más inmediata que a uno se le ocurre, es resolver la ecuación de Schrödinger en forma numérica. No vamos a abordar esa alternativa, sino que buscaremos alguna forma aproximada de encontrar en forma analítica una solución para la ecuación de Schrödinger. En este capítulo, estudiaremos la llamada Teoría de Perturbaciones independiente del tiempo. Veremos enseguida por qué se denomina Teoría de Perturbaciones. El carácter de independiente del tiempo, se debe a que todos los Hamiltonianos con los que trabajaremos son independientes del

tiempo. Los resultados que se obtienen a partir de la Teoría de Perturbaciones están tan arraigados en los modelos físicos, que a veces uno se olvida de que provienen de una aproximación.

6.1. Sistema no degenerado

En primer lugar, vamos a plantear el problema. Dado un Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ independiente del tiempo, buscamos encontrar sus autovalores y autovectores. Esto es,

$$\hat{\mathcal{H}}|N\rangle = E_N|N\rangle, \quad (6.1)$$

sin embargo, al tratar de resolver esta ecuación, nos damos cuenta de que no somos capaces de hacerlo. Para seguir adelante, se abren varias alternativas. Aquí nos concentramos solo en una de ellas. La idea es la siguiente: observamos que existe un problema cuyo potencial es similar al del Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$, pero del que conocemos la solución exacta. A este segundo Hamiltoniano lo vamos a llamar $\hat{\mathcal{H}}_0$. De este modo, conocemos la solución del problema,

$$\hat{\mathcal{H}}_0|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle, \quad (6.2)$$

esto es, sabemos los valores de ε_n y de $|n\rangle$. Notemos que los índices N y n , numeran los estados cuánticos y estos estados no son necesariamente discretos. Vamos a usar estos índices discretos por simplicidad, pero nuestro tratamiento es válido tanto para estados discretos, como continuos.

Es conveniente enfatizar que son muy pocos los problemas que conocemos en forma exacta. Sin embargo, como empleamos esos problemas para tratar de entender aquellos que no podemos resolver, está claro que debemos estudiarlos con detenimiento. Solo si entendemos acabadamente esos problemas, seremos capaces de emplearlos adecuadamente para resolver un problema aún más complejo. Cuando en el párrafo de arriba hablamos de un potencial "similar" entre $\hat{\mathcal{H}}$ y $\hat{\mathcal{H}}_0$, estamos empleado un concepto subjetivo. Antes de seguir adelante, debemos explicar un poco mejor este punto. Podemos simplificar la respuesta, afirmando que los potenciales son similares cuando el espectro E_N difiere poco del de ε_n , lo cual es verdad. Pero encontramos la respuesta a este interrogante subjetivo, solo después de haber resuelto el problema. Analicemos qué condiciones debe cumplir un potencial para ser similar a otro.

Para avanzar con este interrogante, escribamos la ecuación de Schrödinger para $\hat{\mathcal{H}}$ y $\hat{\mathcal{H}}_0$,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_N(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi_N(\mathbf{r}) = E_N\psi_N(\mathbf{r}), \quad (6.3)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi_n(\mathbf{r}) + V_0(\mathbf{r})\phi_n(\mathbf{r}) = \varepsilon_n\phi_n(\mathbf{r}), \quad (6.4)$$

naturalmente, $\langle \mathbf{r}|N\rangle \equiv \psi_N(\mathbf{r})$ y $\langle \mathbf{r}|n\rangle \equiv \phi_n(\mathbf{r})$. Reescribamos la ec. (6.3), de la siguiente manera,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_N(\mathbf{r}) + [V_0(\mathbf{r}) + (V(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r}))]\psi_N(\mathbf{r}) = E_N\psi_N(\mathbf{r}). \quad (6.5)$$

Ahora llamamos, $\mathcal{V}(\mathbf{r}) \equiv V(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r})$, con lo que tenemos,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_N(\mathbf{r}) + (V_0(\mathbf{r}) + \mathcal{V}(\mathbf{r}))\psi_N(\mathbf{r}) = E_N\psi_N(\mathbf{r}). \quad (6.6)$$

Si $V(\mathbf{r})$ y $V_0(\mathbf{r})$ en lugar de ser similares, son iguales, entonces $\mathcal{V}(\mathbf{r}) = 0$ y las ecs. (6.3) y (6.4) serían idénticas. La ventaja de trabajar con potenciales, es que son funciones escalares y siempre se pueden graficar. Si graficamos $V(\mathbf{r})$ y $V_0(\mathbf{r})$ y vemos que son similares, estamos en el camino correcto.

Pensemos en los problemas que podemos resolver en forma exacta. En primer lugar, están los potenciales constantes a trozos. También el problema del oscilador armónico. El más interesante quizá sea el potencial coulombiano, que aún no hemos resuelto. Se harán varios problemas de aplicación de Teoría de Perturbaciones para potenciales constantes a trozos en los Trabajos Prácticos. El pozo de potencial que representa un oscilador armónico, es un pozo de potencial simétrico (recordemos que es un potencial par), derivable en todo punto. Si uno tiene un pozo de potencial, aproximadamente simétrico, es probable que logre ajustar algún potencial de oscilador para que se aproxime al potencial en cuestión. De este modo, dado el $V(\mathbf{r})$, encontramos el $V_0(\mathbf{r})$ adecuado para nuestro problema.

Consideremos ahora un átomo de hidrógeno. ¿Qué es para nosotros un átomo de hidrógeno? Es un sistema ligado, formado por un protón y un electrón. El sistema se encuentra ligado por la acción de la interacción eléctrica atractiva entre el protón y el electrón. Dos cargas eléctricas, experimentan sólo la interacción Coulombiana, cuando están en reposo. Cuando están en movimiento (como es el caso del átomo de hidrógeno), existen también fuerzas magnéticas. Pero del hecho de tratarse de un sistema ligado,

sabemos que el término dominante de la interacción es la interacción Coulombiana. Afortunadamente, sabemos resolver el problema de la ecuación de Schrödinger para el potencial Coulombiano, que será nuestro $V_0(\mathbf{r})$ cuando hagamos correcciones al átomo de hidrógeno. Si por la acción de algún potencial el átomo de hidrógeno pierde su integridad, ya no podemos usar Teoría de Perturbaciones. Podremos incluir en forma perturbativa los efectos de campos magnéticos originados en el mismo átomo o externos, o campos eléctricos externos, en tanto sean pequeños frente al potencial Coulombiano.

En resumen, el desafío más importante para que el método de la Teoría de Perturbaciones sea eficaz, es ser capaz de proponer adecuadamente un Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_0$.

Vayamos a la Teoría de Perturbaciones en sí. Como dijimos, queremos resolver el problema del Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$, encontramos otro $\hat{\mathcal{H}}_0$ del que sabemos la solución exacta y es similar a $\hat{\mathcal{H}}$. Nos conviene escribir,

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \lambda \hat{\mathcal{V}}. \quad (6.7)$$

En los párrafos de arriba ya hemos definido al potencial que se corresponde con el operador potencial $\hat{\mathcal{V}}$, que es la parte perturbativa¹². A este operador lo hemos multiplicado por una constante adimensional λ , con el único fin de contar el orden perturbativo. El resultado final va a ser independiente de esta constante. Ahora bien, queremos resolver la ec. (6.1) y conocemos el resultado de la ec. (6.2). Por conveniencia, repetimos estas ecuaciones:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}|N\rangle &= E_N|N\rangle, \\ \hat{\mathcal{H}}_0|n\rangle &= \varepsilon_n|n\rangle. \end{aligned}$$

Ahora proponemos una solución de la siguiente forma:

$$E_N = \varepsilon_n + \lambda E_N^{(1)} + \lambda^2 E_N^{(2)} + \dots \quad (6.8)$$

$$|N\rangle = |n\rangle + \lambda |N^{(1)}\rangle + \lambda^2 |N^{(2)}\rangle + \dots \quad (6.9)$$

Esto es, estamos proponiendo para E_N y $|N\rangle$, la solución de $\hat{\mathcal{H}}_0$ más correcciones que son potencias crecientes de λ , el orden perturbativo. Cuando se resuelve este tipo de problemas, se parte de la solución conocida de λ^0 (esto es, el problema dado por la

¹²Por ejemplo, si trabajamos con el átomo de hidrógeno, el potencial Coulombiano está contenido en $\hat{\mathcal{H}}_0$.

ec. (6.2)). Para evitar confusiones, $\lambda^0 = 1$, $\lambda^1 = \lambda$ (el superíndice es la potencia). Con esta solución, calculamos el orden λ^1 . Necesitamos el resultado de λ^0 y λ^1 para encontrar la solución al orden λ^2 . Aún no nos resulta evidente, pero ya en este punto está claro que estamos, imponiendo al usar las ecs. (6.8) y (6.9), que aproximamos el espacio de Hilbert de $\hat{\mathcal{H}}$, por el de $\hat{\mathcal{H}}_0$. Discutiremos este punto más adelante.

Reemplazamos ahora las ecs. (6.8) y (6.9) en la ec. (6.1), usando para $\hat{\mathcal{H}}$ la ec. (6.7) tenemos,

$$(\hat{\mathcal{H}}_0 + \lambda\hat{\mathcal{V}})(|n\rangle + \lambda|N^{(1)}\rangle + \lambda^2|N^{(2)}\rangle + \dots) = (\varepsilon_n + \lambda E_N^{(1)} + \lambda^2 E_N^{(2)} + \dots) (|n\rangle + \lambda|N^{(1)}\rangle + \lambda^2|N^{(2)}\rangle + \dots).$$

Realizamos todos los productos y colectamos las potencias de λ en orden creciente:

$$\lambda^0 : \quad \hat{\mathcal{H}}_0|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle, \quad (6.10)$$

$$\lambda^1 : \quad \hat{\mathcal{H}}_0|N^{(1)}\rangle + \hat{\mathcal{V}}|n\rangle = \varepsilon_n|N^{(1)}\rangle + E_N^{(1)}|n\rangle, \quad (6.11)$$

$$\lambda^2 : \quad \hat{\mathcal{H}}_0|N^{(2)}\rangle + \hat{\mathcal{V}}|N^{(1)}\rangle = \varepsilon_n|N^{(2)}\rangle + E_N^{(1)}|N^{(1)}\rangle + E_N^{(2)}|n\rangle. \quad (6.12)$$

Mostramos las expresiones hasta el orden λ^2 . Es evidente cómo construir los órdenes siguientes. La expresión para el orden λ^0 es simplemente la ec. (6.2). Consideremos ahora el orden λ^1 , dado por la ec. (6.11),

6.1.1. Primera corrección a la energía

Multiplicamos a izquierda la ec. (6.11) por $\langle n|$,

$$\langle n|\hat{\mathcal{H}}_0|N^{(1)}\rangle + \langle n|\hat{\mathcal{V}}|n\rangle = \varepsilon_n\langle n|N^{(1)}\rangle + E_N^{(1)}\langle n|n\rangle, \quad (6.13)$$

pero como $\hat{\mathcal{H}}_0$ es hermítico, lo podemos hacer actuar sobre la izquierda (i.e. $\langle n|\hat{\mathcal{H}}_0 = \varepsilon_n\langle n|$), obteniendo,

$$\varepsilon_n\langle n|N^{(1)}\rangle + \langle n|\hat{\mathcal{V}}|n\rangle = \varepsilon_n\langle n|N^{(1)}\rangle + E_N^{(1)}\langle n|n\rangle, \quad (6.14)$$

cancelamos los términos iguales, usamos que $\langle n|n\rangle = 1$ y obtenemos finalmente la primera corrección a la energía:

$$\boxed{E_N^{(1)} = \langle n|\hat{\mathcal{V}}|n\rangle} \quad (6.15)$$

De este modo, la primera corrección a la energía resulta del valor medio de la perturbación $\hat{\mathcal{V}}$, evaluado con la función de onda del Hamiltoniano sin perturbar $\hat{\mathcal{H}}_0$. A primer orden en teoría de perturbaciones la energía resulta entonces,

$$E_N \cong \varepsilon_n + \langle n | \hat{\mathcal{V}} | n \rangle \quad (6.16)$$

6.1.2. Primera corrección a la función de onda

Multiplicamos a izquierda la ec. (6.11) por $\langle m |$, con $m \neq n$,

$$\langle m | \hat{\mathcal{H}}_0 | N^{(1)} \rangle + \langle m | \hat{\mathcal{V}} | n \rangle = \varepsilon_n \langle m | N^{(1)} \rangle + E_N^{(1)} \langle m | n \rangle, \quad (6.17)$$

nuevamente, como $\hat{\mathcal{H}}_0$ es hermítico, lo podemos hacer actuar sobre la izquierda (i.e. $\langle m | \hat{\mathcal{H}}_0 = \varepsilon_m \langle m |$), obteniendo,

$$\varepsilon_m \langle m | N^{(1)} \rangle + \langle m | \hat{\mathcal{V}} | n \rangle = \varepsilon_n \langle m | N^{(1)} \rangle, \quad (6.18)$$

donde empleamos también la ortonormalidad de la base de $\hat{\mathcal{H}}_0$, esto es, $\langle m | n \rangle = \delta_{m,n}$. Esto nos permite escribir la relación:

$$\langle m | N^{(1)} \rangle = \frac{\langle m | \hat{\mathcal{V}} | n \rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_m}, \quad m \neq n. \quad (6.19)$$

Notemos que podemos escribir esta expresión sólo si $\varepsilon_n \neq \varepsilon_m$, esto es, para el caso de estados no degenerados. De este modo, nuestro método en este punto es solo aplicable para sistemas no degenerados. Hasta ahora no resulta claro qué interés tiene esta cantidad. Para ello, escribamos al operador identidad del espacio de Hilbert correspondiente a $\hat{\mathcal{H}}_0$,

$$\hat{\mathcal{I}} = \sum_m |m\rangle \langle m|. \quad (6.20)$$

Aplicamos esta identidad a la igualdad $|N^{(1)}\rangle = \hat{\mathcal{I}}|N^{(1)}\rangle$ y separamos la suma sobre m en dos partes: $m = n$ y $m \neq n$:

$$|N^{(1)}\rangle = |n\rangle \langle n | N^{(1)} \rangle + \sum_{m \neq n} |m\rangle \langle m | N^{(1)} \rangle. \quad (6.21)$$

Usamos que $\langle n | N^{(1)} \rangle = 0$; este resultado lo demostramos más abajo. Por otra parte, de la ec. (6.19), sabemos cuánto vale la cantidad $\langle m | N^{(1)} \rangle$. De este modo, tenemos,

$$|N^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m | \hat{\mathcal{V}} | n \rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} |m\rangle. \quad (6.22)$$

Reemplazando ahora esta expresión en la ec. (6.9), tenemos,

$$|N\rangle \cong |n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle m|\hat{V}|n\rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} |m\rangle. \quad (6.23)$$

Sin embargo, como sabemos que $\langle n|n\rangle = 1$, vemos que la función de onda no está normalizada. Multiplicamos la función de onda por una constante de normalización \mathcal{N} y tenemos finalmente,

$$|N\rangle \cong \mathcal{N} \left(|n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle m|\hat{V}|n\rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} |m\rangle \right) \quad (6.24)$$

La constante de normalización se calcula trivialmente usando la ortonormalidad de los estados $|j\rangle$, $\forall j$; a partir de la condición $\langle N|N\rangle = 1$,

$$\mathcal{N} = \left(1 + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m|\hat{V}|n\rangle|^2}{(\varepsilon_n - \varepsilon_m)^2} \right)^{-1/2}. \quad (6.25)$$

Ahora bien, pensemos un poco en nuestro resultado de la ec. (6.24). No debemos perder de vista que se trata de una solución para el caso no degenerado. Uno de los puntos más relevantes de este resultado es que esta función de onda es una combinación lineal de funciones de onda del espacio de Hilbert del Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_0$. Como sabemos, es el Hamiltoniano la cantidad que determina el espacio de Hilbert. Los Hamiltonianos $\hat{\mathcal{H}}$ y $\hat{\mathcal{H}}_0$ son diferentes y en el caso de resolver en forma exacta el problema de $\hat{\mathcal{H}}$, esperaríamos un espacio de Hilbert diferente del de $\hat{\mathcal{H}}_0$. De este modo, la aproximación más fuerte de la Teoría de Perturbaciones es que el espacio de Hilbert para los estados de $\hat{\mathcal{H}}$ sigue siendo el de $\hat{\mathcal{H}}_0$. Aún si vamos a orden infinito en el desarrollo perturbativo, seguiremos teniendo un resultado aproximado, pues Hamiltonianos diferentes suponen espacios de Hilbert diferentes y este no es el caso para la Teoría de Perturbaciones.

El permanecer en el mismo espacio de Hilbert está implícito desde el punto de partida de la ec. (6.11). Sólo si resolvemos la ecuación de Schrödinger podemos encontrar una función de onda diferente a las del Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_0$. Como dijimos al comienzo, en Teoría de Perturbaciones se comienza con el orden cero, luego se corrige al orden uno con el resultado del orden cero y así se construyen los órdenes superiores.

Vale la pena hacer un comentario adicional sobre este punto. Imaginemos una nube de electrones en una red cristalina de un metal. Por la acción de un campo eléctrico estos

electrones se mueven. Naturalmente estamos describiendo la conducción eléctrica y el movimiento de un electrón es un problema cuántico. Digamos que podemos encontrar un modelo para describir el movimiento de un electrón en el campo medio que produce la red cristalina, que será nuestro $\hat{\mathcal{H}}_0$ y describimos la interacción entre los electrones como una perturbación. A muy bajas temperaturas, los electrones se acoplan entre sí y forman un sistema cuasi-ligado que se denomina par de Cooper. Como nuestro espacio de Hilbert correspondiente al Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_0$ se refiere a un electrón en un campo medio, no contiene estados ligados del electrón con otro electrón y no importa el orden perturbativo, pues no podremos predecir los pares de Cooper. Luego esto muestra que la Teoría de Perturbaciones es útil sólo cuando los espacios de Hilbert correspondientes a $\hat{\mathcal{H}}$ y $\hat{\mathcal{H}}_0$, son similares.

6.1.3. Segunda corrección a la energía

Multiplicamos nuevamente a izquierda la ec. (6.12) por $\langle n|$,

$$\langle n|\hat{\mathcal{H}}_0|N^{(2)}\rangle + \langle n|\hat{\mathcal{V}}|N^{(1)}\rangle = \varepsilon_n \langle n|N^{(2)}\rangle + E_N^{(1)} \langle n|N^{(1)}\rangle + E_N^{(2)} \langle n|n\rangle, \quad (6.26)$$

como vimos antes, ya que $\hat{\mathcal{H}}_0$ es hermítico, lo podemos hacer actuar sobre la izquierda (i.e. $\langle n|\hat{\mathcal{H}}_0 = \varepsilon_n \langle n|$), obteniendo,

$$\varepsilon_n \langle n|N^{(2)}\rangle + \langle n|\hat{\mathcal{V}}|N^{(1)}\rangle = \varepsilon_n \langle n|N^{(2)}\rangle + E_N^{(1)} \langle n|N^{(1)}\rangle + E_N^{(2)} \langle n|n\rangle, \quad (6.27)$$

los primeros términos a la izquierda de la igualdad se cancelan entre sí, empleamos la normalización $\langle n|n\rangle = 1$, junto con la propiedad $\langle n|N^{(1)}\rangle = 0$ (aún no demostrada), con lo cual obtenemos la siguiente expresión:

$$E_N^{(2)} = \langle n|\hat{\mathcal{V}}|N^{(1)}\rangle, \quad (6.28)$$

reemplazando finalmente la expresión para $|N^{(1)}\rangle$, obtenida en ec. (6.22)

$$E_N^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle n|\hat{\mathcal{V}}|m\rangle \langle m|\hat{\mathcal{V}}|n\rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \quad (6.29)$$

Podemos resumir nuestro resultado para la energía como,

$$E_N \cong \varepsilon_n + \langle n | \hat{V} | n \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n | \hat{V} | m \rangle|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \quad (6.30)$$

Nos quedaremos con estos órdenes perturbativos, pues son los que se emplean con frecuencia. De hecho, los órdenes superiores presentan dificultades sobre las que los textos habituales no nos advierten. En la próxima subsección daremos algunos elementos de este último punto.

6.1.4. Evaluación de $\langle n | N^{(1)} \rangle$

En este punto, justificamos que $\langle n | N^{(1)} \rangle = 0$, según el desarrollo expuesto en Ref. [3]. Para ello, comenzamos escribiendo la función de onda en el primer orden perturbativo, sin especificar el valor de $|N^{(1)}\rangle$:

$$|N\rangle \cong |n\rangle + \lambda |N^{(1)}\rangle. \quad (6.31)$$

Sabemos que $\langle n | n \rangle = 1$ y que la función de onda $|N\rangle$ está definida a menos de una fase. Calculamos ahora la norma al cuadrado de $|N\rangle$ a primer orden en λ , de este modo, tenemos,

$$\langle N | N \rangle = \langle n | n \rangle + \lambda (\langle n | N^{(1)} \rangle + \langle N^{(1)} | n \rangle) + \mathcal{O}(\lambda^2), \quad (6.32)$$

donde $\mathcal{O}(\lambda^2)$ indica el término de orden λ^2 que no consideraremos. Pedimos que al orden λ^1 , $\langle N | N \rangle = 1$, con lo cual

$$\langle n | N^{(1)} \rangle + \langle N^{(1)} | n \rangle = 0,$$

pero como podemos elegir la fase de la función de onda, siempre podemos pedir que $\langle n | N^{(1)} \rangle$ sea real, con lo cual,

$$\langle n | N^{(1)} \rangle = \langle N^{(1)} | n \rangle,$$

por lo tanto, $\langle n | N^{(1)} \rangle = 0$, que es lo que queríamos demostrar.

Vale la pena indicar que $\langle n | N^{(2)} \rangle \neq 0$ (ver por ejemplo [3]). Debido a esto, el cálculo de órdenes perturbativos superiores requiere de técnicas de cálculo algo más elaboradas que la expuestas para la primera y segunda corrección a la energía.

Hablamos al comienzo de esta subsección de “justificación” en lugar de demostración. Al leer este desarrollo y compararlo con lo expuesto sobre renormalizar la función de onda desarrollado en las ecs. (6.24)–(6.25), algo parece no funcionar bien. En realidad existen dos ‘escuelas’ en teoría de perturbaciones. Una que dice que no debemos renormalizar la función de onda, pues los términos de orden superior corrigen la norma, y la otra dice que sí debemos hacerlo. La afirmación de la primera es correcta y en ese espíritu se desarrolla esta subsección. Sin embargo, eso es válido solo cuando vamos a orden infinito. Cuando truncamos el desarrollo en un orden inferior, no nos queda otra alternativa más que renormalizar.

6.2. Sistema degenerado

Para el caso degenerado, nos limitaremos a evaluar solo la corrección a la energía a primer orden de perturbación.

En general, se expone en primer lugar la Teoría de Perturbaciones para el caso no degenerado y luego para el caso degenerado. Esto puede llevar a un cierto grado de confusión conceptual. En Teoría de Perturbaciones para el caso no degenerado si miramos la expresión para la corrección a la función de onda dada en la ec. (6.22) o la corrección a la energía a segundo orden ec. (6.29), vemos que para corregir el nivel cuántico caracterizado por el número n , *sumamos* sobre el resto de los estados cuánticos. Esto es algo intrínsecamente cuántico: lo que ocurre en un nivel cuántico es afectado por el resto de los niveles. Esta es una situación posible de la Mecánica Cuántica, pero eso no significa que la corrección solo funciona así: la corrección a la energía a primer orden ($E_N^{(1)} = \langle n | \hat{\mathcal{V}} | n \rangle$), es una corrección que se hace sobre el mismo nivel.

Lo que expondremos sobre Teoría de Perturbaciones para el caso degenerado, se refiere a un único nivel cuántico. Debemos ser claros sobre la potencial fuente de confusión: para el caso no degenerado, *suma* implica varios niveles de energía, *ausencia de suma* ($E_N^{(1)} = \langle n | \hat{\mathcal{V}} | n \rangle$), corrección sin salirnos del nivel cuántico que deseamos corregir. Para el caso degenerado, tendremos sumas, pero todo está limitado a un único nivel.

La Teoría de Perturbaciones para el caso degenerado es más difícil de implementar. Partimos de un sistema que tiene al menos un nivel de energía con al menos dos funciones

de onda diferentes y ortonormales. Naturalmente, este nivel de energía y funciones de onda corresponden al Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_0$. La solución que obtenemos en un nivel, en general no nos es útil para otro nivel. Luego, debemos elegir el nivel que deseamos corregir y trabajar sobre ese nivel. En ese nivel, habrá tantas funciones de onda independientes como el orden de la degeneración. Para seguir adelante, recordemos el punto en que el caso no degenerado fallaba si intentábamos usarlo para el caso degenerado. Esto ocurre en la ec. (6.18), que reescribimos ahora por conveniencia como,

$$\langle j | \hat{\mathcal{V}} | i \rangle = (\varepsilon_i - \varepsilon_j) \langle j | N^{(1)} \rangle, \quad (6.33)$$

donde i y j representan dos estados cuánticos del mismo nivel n . Notemos que para llegar a la ec. (6.18) (ó la ec. (6.33)), multiplicamos a izquierda por $\langle m |$ (ó $\langle j |$), donde la única condición para el estado m (j) es que sea un estado cuántico ortogonal a n (i). A partir de ahora, nos concentramos solo en el caso degenerado. Estamos entonces en el nivel energético n , que suponemos D -veces degenerado y existe un conjunto de estados cuánticos $|k\rangle$, con $k = 1, 2, \dots, D$. Todos estos estados tienen la misma energía ε_n . De este modo, en la ec. (6.33), tenemos,

$$\varepsilon_i = \varepsilon_j = \varepsilon_n,$$

esto es, el lado derecho de la ec. (6.33) es cero. Sobre $\langle j | N^{(1)} \rangle$, es el producto interno entre un estado cuántico y una componente de otro estado cuántico: necesariamente toma un valor finito (eventualmente puede valer cero), con lo cual no tenemos dudas sobre que el lado derecho es cero. De este modo, tenemos problemas a menos que $\langle j | \hat{\mathcal{V}} | i \rangle = 0$. Si esto no ocurre, algo funciona mal.

¿Cómo podemos estar seguros de que $\langle j | \hat{\mathcal{V}} | i \rangle = 0$? Si el operador $\hat{\mathcal{V}}$ es diagonal en la base del Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_0$, entonces $\langle j | \hat{\mathcal{V}} | i \rangle = v_i \langle j | i \rangle = v_i \delta_{i,j} = 0$, pues $i \neq j$. Si ocurre esto, dejamos de tener la potencial inconsistencia en la ec. (6.33). Por simplicidad, llamemos $|k\rangle$ al conjunto de estados que forman la base de estados cuya energía es ε_n . Se abren tres posibilidades:

- *El operador $\hat{\mathcal{V}}$ es diagonal en la base $|k\rangle$.* En ese caso, podemos calcular la corrección a la energía como $E_i^{(1)} = \langle i | \hat{\mathcal{V}} | i \rangle$, para cada i de la base $|k\rangle$.
- *El operador $\hat{\mathcal{V}}$ es no diagonal en la base $|k\rangle$, pero podemos encontrar fácilmente otra base $|\tilde{k}\rangle$, en que sí lo es.* En ese caso, hacemos primero un cambio de base y

calculamos entonces la corrección a la energía como $E_i^{(1)} = \langle \tilde{i} | \hat{\mathcal{V}} | \tilde{i} \rangle$, para cada \tilde{i} de la base $|\tilde{k}\rangle$.

- *El operador $\hat{\mathcal{V}}$ es no diagonal en la base $|k\rangle$ y no podemos encontrar fácilmente otra base $|\tilde{k}\rangle$, en que sí lo es.* En ese caso, debemos implementar un proceso de diagonalización para encontrar la base $|\tilde{k}\rangle$ en la que el operador $\hat{\mathcal{V}}$ es diagonal.

Para los dos primeros casos, ya llegamos al resultado final, que es la expresión que debemos usar para corregir la energía. Trabajaremos entonces sobre la tercera opción. Recordemos que estamos en un nivel n , cuya energía al orden λ^0 , es ε_n y que el nivel tiene una degeneración D , esto es, tenemos un conjunto de D estados ortonormales $|k\rangle$, todos con la misma energía ε_n al orden cero de la perturbación, como acabamos de mencionar.

Proponemos ahora un cambio de base, como sigue,

$$|\alpha\rangle = \sum_{k=1}^D C_{\alpha,k} |k\rangle, \quad (6.34)$$

donde junto al estado $|\alpha\rangle$, tenemos otros estados $|\beta\rangle, |\gamma\rangle, \dots$, hasta completar D estados. Los estados $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, \dots$, los vamos a construir enseguida para que cumplan con la condición,

$$\langle \beta | \hat{\mathcal{V}} | \alpha \rangle = \delta_{\beta,\alpha} v_\alpha.$$

Para que se cumpla esta condición, debemos resolver el conjunto de D ecuaciones acopladas:

$$\sum_{k=1}^D \langle j | \hat{\mathcal{V}} | k \rangle C_{\alpha,k} = E_\alpha^{(1)} C_{\alpha,j}, \quad (6.35)$$

esto es, escribimos esta ecuación para α , luego para β, \dots , hasta llegar al estado número D . Este es un sistema autovalores $E_\alpha^{(1)}$, y autovectores $|\alpha\rangle$ de los cuales calculamos sus coeficientes $C_{\alpha,k}$.

En resumen, los tres puntos de arriba son en realidad un mismo punto: encontrar una combinación lineal de elementos de la base de $\hat{\mathcal{H}}_0$ tal que en esa base, el operador de perturbación sea diagonal. Los autovalores del operador de perturbación en la base diagonal, son las correcciones a la energía del nivel n , para cada uno de los estados degenerados. Una perturbación puede romper la degeneración del estado en forma total o parcial. Esto es, si tenemos D estados degenerados, podemos terminar con D niveles

no degenerados y con simplemente una degeneración menor. Finalmente, una vez que encontramos la base en la que el operador de perturbación es diagonal, podemos trabajar en esa base siguiendo las mismas prescripciones que la de Teoría de Perturbaciones para el caso no degenerado y encontrar así la corrección a la función de onda. Es importante notar que la base en que $\hat{\mathcal{V}}$ es diagonal no tiene ninguna corrección perturbativa. Si bien nombramos el procedimiento para seguir adelante con la Teoría de Perturbaciones, su desarrollo explícito excede el objetivo de este escrito.

Solo por medio de un ejemplo, se puede entender realmente el método. Remitimos al lector a la Subsección 12.3.2 para encontrar un ejemplo desarrollado de la teoría de perturbaciones para el caso degenerado.

6.3. Sobre la aplicabilidad de la Teoría de Perturbaciones

La Teoría de Perturbaciones es un método para encontrar en forma aproximada la energía y las funciones de onda de un Hamiltoniano cuya solución exacta no se puede encontrar. Como todo método aproximado, se deben establecer las condiciones de su aplicabilidad. Las condiciones son simples. El punto de partida es confiar en que el espacio de Hilbert del Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ es similar al del de $\hat{\mathcal{H}}_0$. Eso resulta de consideraciones físicas para cada problema particular. En general, dado un Hamiltoniano la elección de $\hat{\mathcal{H}}_0$ va a parecer obvia. En cualquier caso, se debe discutir cada problema físico particular.

Una vez conocido $\hat{\mathcal{H}}_0$, el método es aplicable si:

$$|\langle n|\hat{\mathcal{V}}|n\rangle| \ll |\varepsilon_n|, \quad (6.36)$$

$$|\langle m|\hat{\mathcal{V}}|n\rangle| \ll |\varepsilon_n - \varepsilon_m|. \quad (6.37)$$

La condición (6.36) asegura la aplicabilidad del método para corregir la energía, mientras que la (6.37) lo hace para la función de onda. Recordemos que $E_n^{(1)} = \langle n|\hat{\mathcal{V}}|n\rangle$ y que el factor multiplicativo de los kets en la suma de la primera corrección a la función de onda es $\langle m|\hat{\mathcal{V}}|n\rangle/(\varepsilon_n - \varepsilon_m)$.

Un punto clave para comprender la física detrás de la Teoría de Perturbaciones es el siguiente. Si valen las condiciones (6.36) y (6.37), entonces es suficiente llegar a

primer orden en la perturbación. Eventualmente, si el primer orden es nulo, calculamos el segundo orden. Pero las condiciones mencionadas indican que una corrección de orden superior debe ser necesariamente muy pequeña. Discutamos este punto con un ejemplo matemático:

Consideremos la serie geométrica,

$$g(x) = \frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + x^3 + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} x^j,$$

con,

$$|x| < 1.$$

Consideremos ahora la suma de los primeros n -términos,

$$S_n(x) = 1 + x + x^2 + \dots + x^n.$$

Esta expresión se puede sumar en forma analítica, obteniendo,

$$S_n(x) = \frac{1 - x^{n+1}}{1 - x}.$$

La pregunta es, ¿qué valor de n debemos colocar para que $S_n(x) \cong g(x)$?

La respuesta a esa pregunta, depende del valor de x . El lector debe advertir en este punto que existe un paralelismo entre este análisis y la Teoría de Perturbaciones, donde x juega el papel de la interacción perturbativa y n es el orden de la perturbación. Consideremos algunos valores de x , cumpliendo con la condición $|x| < 1$:

- $x = 0,01$: con $n = 1$ ya tenemos una buena convergencia, ya que $g(0,01) = 1,0101$, mientras que $S_1(0,01) = 1,01$.
- $x = 0,99$: con $n = 1$ tenemos $g(0,99) = 100$, mientras que $S_1(0,99) = 1,99$, lo cual se ve muy mal. Debemos llegar a $n = 1000$ para lograr cierta convergencia, $S_{1000}(0,99) = 99,9957$.
- $x = 0,2$: con $n = 5$ ya tenemos una buena convergencia, ya que $g(0,2) = 1,25$, mientras que $S_5(0,2) = 1,24992$.

Este análisis podría hacernos dudar sobre las condiciones dadas en (6.36) y (6.37). Acaso no deberían ser en realidad,

$$|\langle n | \hat{\mathcal{V}} | n \rangle| < |\varepsilon_n|, \quad (6.38)$$

$$|\langle m | \hat{\mathcal{V}} | n \rangle| < |\varepsilon_n - \varepsilon_m|. \quad (6.39)$$

Esto es, un simple menor estricto, antes que “mucho menor”. El problema entonces, sería el lograr calcular órdenes superiores. Pero de poder hacerlo, un simple menor sería suficiente y esto simplifica notablemente el criterio de aplicabilidad de la Teoría de Perturbaciones.

Sin embargo, la respuesta a la pregunta es un no rotundo. Las condiciones de aplicabilidad de la Teoría de Perturbaciones son dadas por las expresiones (6.36) y (6.37). Estas condiciones no solo garantizan la convergencia de la serie, sino también la similitud entre los espacios de Hilbert. En el ejemplo de la serie geométrica, solo se pide la convergencia de la serie. Si uno incluye una perturbación que no cumple con estas condiciones, eso se traduce en que la llamada perturbación, es casi tan importante como la interacción no perturbada. Lo cual indica que la hipótesis de que los espacios de Hilbert de $\hat{\mathcal{H}}$ y $\hat{\mathcal{H}}_0$ son similares, pierde todo sustento y el método es objetable: la función de onda perturbada se escribe como una combinación lineal de las funciones de onda sin perturbar; lo cual solo se sostiene cuando la perturbación es tal. Luego, las condiciones de aplicabilidad de la Teoría de Perturbaciones indican la futilidad de calcular órdenes superiores.

CAPÍTULO 7

La ecuación de Schrödinger para un potencial central

Introducción

Cuando comenzamos a estudiar Mecánica Cuántica, el primer paso que dimos fue postular la ecuación de Schrödinger como,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r},t) = i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}. \quad (7.1)$$

En esta ecuación, la incógnita es la función de onda $\psi(\mathbf{r},t)$ y la información que debemos dar es el potencial $V(\mathbf{r})$, junto con las condiciones iniciales y de contorno. Cuando estudiamos este punto, lo primero que notamos es que el potencial no depende del tiempo. Naturalmente, un potencial sí puede depender del tiempo, pero nos restringimos al subconjunto de problemas de los potenciales independientes del tiempo. Cuando el potencial no depende del tiempo, el sistema está cerrado y cuando sí depende, se trata de un sistema abierto. Pero este no es el punto del presente capítulo.

La no dependencia del potencial con el tiempo, es algo que debemos usar a nuestro favor. Fue así como propusimos una función de onda de la forma,

$$\psi(\mathbf{r},t) = \varphi(\mathbf{r})\mathcal{T}(t), \quad (7.2)$$

y a partir de este punto, encontramos que la función $\mathcal{T}(t)$ se podía calcular fácilmente, teniendo como resultado,

$$\mathcal{T}(t) = \mathcal{T}(0)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \quad (7.3)$$

donde E es una constante y debemos resolver aún la ecuación estacionaria de Schrödinger dada por,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}). \quad (7.4)$$

De este modo, logramos disminuir el grado de dificultad para resolver la ecuación de Schrödinger: ahora nuestras incógnitas son funciones solo de la posición $\varphi(\mathbf{r})$ y una constante que representa la energía, E . Ya que el potencial no depende del tiempo, la función que representa la dependencia temporal de la función de onda es la misma para todos los problemas físicos.

Consideraremos ahora el problema de un Potencial Central y de algún modo, repetiremos el razonamiento que acabamos de exponer.

7.1. Potencial central

Un potencial central es aquel que solo depende de la distancia a un origen de coordenadas. Escribiremos un potencial central como $V(\mathbf{r})$. Tenemos, entonces,

$$V(\mathbf{r}) \rightarrow V(r).$$

El potencial tiene simetría esférica y es esa simetría la que debemos aprovechar. Ejemplos de potenciales centrales son la interacción Coulombiana ($V_C(r) \sim 1/r$), la interacción gravitacional con misma dependencia funcional, etc. Para resolver la ec. (7.4), debemos elegir un sistema de coordenadas. La primera elección que uno intenta, son las coordenadas cartesianas, en ese caso, tenemos,

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \\ V(r) &= V\left(\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}\right). \end{aligned}$$

Si intentamos resolver la ec. (7.4) usando coordenadas cartesianas, no vemos ninguna simplificación. Pensemos ahora en coordenadas esféricas. Las coordenadas esféricas son

(r, θ, ϕ) . Para evitar dudas, establezcamos el vínculo con las coordenadas cartesianas:

$$\begin{aligned}x &= r \operatorname{sen}(\theta) \cos(\phi), \\y &= r \operatorname{sen}(\theta) \operatorname{sen}(\phi), \\z &= r \cos(\theta).\end{aligned}\tag{7.5}$$

Naturalmente, $r \in [0, \infty)$, $\theta \in [0, \pi]$ y $\phi \in [0, 2\pi]$.

Escribamos nuevamente el Laplaciano y el potencial, pero esta vez en coordenadas esféricas:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \operatorname{sen}(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\operatorname{sen}(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \operatorname{sen}^2(\theta)} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right), \tag{7.6}$$

$$V(r) = V(r). \tag{7.7}$$

Hemos escrito el potencial, solo a los efectos de mejorar la comparación con el caso de las coordenadas cartesianas.

Lo que debemos tener en cuenta en este punto, es que en coordenadas cartesianas el potencial depende de (x, y, z) , mientras que en coordenadas esféricas solo depende de r . En este caso y recordando lo discutido en la *Introducción*, esperamos poder resolver la parte de la ecuación de Schrödinger que depende de las coordenadas (θ, ϕ) , ya que el potencial no depende de estas variables.

En primer lugar, escribamos la ecuación de Schrödinger en coordenadas esféricas:

$$\begin{aligned}- \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \operatorname{sen}(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\operatorname{sen}(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \operatorname{sen}^2(\theta)} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right] \varphi(\mathbf{r}) + \\+ V(r)\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}).\end{aligned}\tag{7.8}$$

Proponemos ahora una solución como producto de funciones en coordenadas esféricas $\mathbf{r} = (r, \theta, \phi)$,

$$\varphi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi).\tag{7.9}$$

Reemplazamos esta expresión en la ecuación de Schrödinger,

$$\begin{aligned}\Theta(\theta)\Phi(\phi) \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{R(r)\Phi(\phi)}{r^2 \operatorname{sen}(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left(\operatorname{sen}(\theta) \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \\+ \frac{R(r)\Theta(\theta)}{r^2 \operatorname{sen}^2(\theta)} \left(\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} \right) - \frac{2m}{\hbar^2} V(r)R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi) \\= -\frac{2m}{\hbar^2} E R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi),\end{aligned}\tag{7.10}$$

donde por conveniencia hemos dividido toda la expresión por $-2m/\hbar^2$. Notar que hemos reemplazado la derivada parcial por la derivada total, ya que las funciones derivadas dependen ahora de una sola variable. En el siguiente paso, dividimos toda la expresión por $R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$, la multiplicamos por r^2 y reordenamos los términos como sigue,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V(r) - E) = \\ = & -\frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{1}{\sin(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left(\sin(\theta) \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) - \frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{1}{\sin^2(\theta)} \left(\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} \right). \end{aligned} \quad (7.11)$$

Notamos que el término de la izquierda en esta igualdad es una función de r , mientras que el de la derecha depende de las variables angulares (θ, ϕ) . Como estas son variables independientes el único modo de que valga la igualdad es que cada lado de la igualdad sea igual a la misma constante. Por razones que serán evidentes enseguida, vamos a llamar a esa constante $\ell(\ell + 1)$. Escribimos entonces la ec. (7.11) como,

$$\frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V(r) - E) = \ell(\ell + 1), \quad (7.12)$$

$$\frac{\sin(\theta)}{\Theta(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left(\sin(\theta) \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{1}{\Phi(\phi)} \left(\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} \right) = -\ell(\ell + 1) \sin^2(\theta), \quad (7.13)$$

donde la segunda ecuación (ec. (7.13)), la multiplicamos por $\sin^2(\theta)$, por conveniencia. Estas ecuaciones se ven y realmente son complicadas. Dada la complejidad de las ecuaciones, corremos el riesgo a no ver un resultado de enorme relevancia: el potencial solo aparece en la ecuación radial, esto es, en la ec. (7.12). El potencial, junto con las condiciones iniciales y de contorno, es lo que define el problema que estamos estudiando. Expresamos siempre el potencial como $V(r)$ hasta que tengamos un problema concreto y entonces damos una expresión explícita para el mismo. Vemos que la ecuación radial es una ecuación diferencial de segundo orden en una dimensión.

La parte angular (ec. (7.13)), no depende del potencial, como ya dijimos. De este modo, si encontramos una solución para la parte angular, ésta misma solución nos sirve *para todos* los potenciales *centrales*. En la siguiente subsección analizaremos la solución de la parte angular.

7.2. La ecuación angular

La ec. (7.13) puede ser reescrita como,

$$\frac{\text{sen}(\theta)}{\Theta(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left(\text{sen}(\theta) \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \ell(\ell + 1) \text{sen}^2(\theta) = -\frac{1}{\Phi(\phi)} \left(\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} \right). \quad (7.14)$$

Nuevamente vemos que la dependencia de cada lado de la igualdad es con una variable angular diferente y debemos pedir nuevamente que sea igual a una constante. Vamos a llamar a esa constante m^2 , con lo cual tenemos,

$$\frac{\text{sen}(\theta)}{\Theta(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left(\text{sen}(\theta) \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \ell(\ell + 1) \text{sen}^2(\theta) = m^2, \quad (7.15)$$

$$-\frac{1}{\Phi(\phi)} \left(\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} \right) = m^2. \quad (7.16)$$

Reescribimos ahora estas ecuaciones de la siguiente manera,

$$\text{sen}(\theta) \frac{d}{d\theta} \left(\text{sen}(\theta) \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + (\ell(\ell + 1) \text{sen}^2(\theta) - m^2) \Theta(\theta) = 0, \quad (7.17)$$

$$\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} + m^2\Phi(\phi) = 0. \quad (7.18)$$

La primera ecuación depende solo de θ , mientras que la segunda lo hace solo en ϕ . Debemos resolver estas dos ecuaciones. Antes de comenzar a resolver algo, debemos tener en claro cuáles son nuestras incógnitas y qué le debemos pedir a nuestras soluciones. Las incógnitas son las funciones $\Theta(\theta)$ y $\Phi(\phi)$, junto con las constantes ℓ y m . Las letras que hemos elegido para las constantes sugieren que se tratan de números enteros, pero aún no podemos afirmar tal cosa. Por lo pronto, ℓ y m son dos constantes cualesquiera. Sobre lo que le debemos pedir a nuestras soluciones, es que sean de cuadrado integrable: no debemos perder de vista que escribimos la función de onda como $\varphi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$. Al integrar en todo el espacio para calcular la norma de la función de onda, debemos integrar en cada variable en forma independiente. Por lo tanto, ninguna de las funciones $R(r)$, $\Theta(\theta)$ y $\Phi(\phi)$, puede no ser integrable.

Comencemos por resolver el ec. (7.18) ya que es más simple. Repetimos la expresión por comodidad para el lector,

$$\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2} + m^2\Phi(\phi) = 0.$$

La solución de esta ecuación es bien conocida,

$$\Phi(\phi) = e^{im\phi}. \quad (7.19)$$

Ahora bien, notemos que la función de onda debe estar unívocamente definida. Esto significa que en el mismo punto del espacio no puede tomar dos valores diferentes:

$$\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi).$$

Para que se cumpla esta condición, m debe ser un entero,

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (7.20)$$

Notemos que lo que pudimos hallar fue la función que es solución de la ec. (7.18). No sabemos qué valor tiene la constante m , solo impusimos una restricción sobre m (que tome valores enteros), para que la solución tenga sentido físico. El valor de m en sí, es una condición de contorno que debe ser dada.

Como comentario menor, al ver esta solución podríamos objetar que en realidad la solución más general es de la forma,

$$\Phi(\phi) = A e^{im\phi} + B e^{-im\phi}, \quad (7.21)$$

lo cual es verdad. Sin embargo, la solución física es realmente la ec. (7.19). El motivo lo comprenderemos más adelante, cuando estudiemos el momento angular en mecánica cuántica. Pero para aquellos que ya conocen el tema del momento angular, la solución $\varphi(r, \theta, \phi)$, debe ser diagonal en la base $\hat{\mathcal{H}}$, \hat{L}^2 y \hat{L}_z . La ec. (7.21) no es diagonal en \hat{L}_z , pero la ec. (7.19) sí lo es. El multiplicar o no a esta última expresión por una constante es irrelevante, pues esa constante siempre puede ser absorbida por la constante de normalización de la función de onda.

Vayamos ahora a la ec. (7.17), que repetiremos como lo hicimos para la ecuación azimutal,

$$\sin(\theta) \frac{d}{d\theta} \left(\sin(\theta) \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + (\ell(\ell + 1) \sin^2(\theta) - m^2) \Theta(\theta) = 0.$$

En el caso de la ecuación azimutal, escribimos la ecuación diferencial y propusimos la solución. No haremos lo mismo ahora, por una razón matemática, con contenido físico. En la solución propuesta para la ec. (7.19), la constante m aún podía tomar cualquier valor y enseguida vimos que esa constante debía ser un número entero, para que la función de onda esté unívocamente definida. Veremos enseguida que la constante restante ℓ , tomará valores naturales más el cero. Esto resulta de una condición física al

resolver la ec. (7.17). Podríamos dar la solución para esta ecuación $\Theta(\theta) \sim P_\ell^m(\cos(\theta))$, pero nos quedaría la duda sobre el por qué de los valores posibles para ℓ .

Para resolver la ec. (7.17), seguimos el desarrollo expuesto en Ref. [9]. En esta ecuación en primer lugar, hacemos un cambio de variables,

$$\ell(\ell + 1) = \lambda, \quad (7.22)$$

$$\xi = \cos(\theta), \quad (7.23)$$

$$F(\xi) = \Theta(\theta). \quad (7.24)$$

De este modo, la ec. (7.17), queda escrita ahora como,

$$\frac{d}{d\xi} \left[(1 - \xi^2) \frac{dF}{d\xi} \right] - \frac{m^2}{1 - \xi^2} + \lambda F = 0. \quad (7.25)$$

Por conveniencia, resolvemos primero el caso particular de $m = 0$,

$$\frac{d}{d\xi} \left[(1 - \xi^2) \frac{dF}{d\xi} \right] + \lambda F = 0. \quad (7.26)$$

Notemos que esta ecuación (al igual que la ec. (7.25)), es invariante ante un cambio de $\xi \rightarrow -\xi$, lo cual implica que las soluciones $F(\xi)$ serán funciones pares o impares.

Para encontrar la solución de la ec. (7.26), proponemos una serie de la forma,

$$F(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k,$$

donde debemos notar que así escrita, la función $F(\xi)$ puede ser cualquier función continua. Sustituimos esta serie en la ec. (7.26), lo cual nos lleva a la siguiente relación de recurrencia para los coeficientes a_k :

$$a_{k+2} = \frac{k(k+1) - \lambda}{(k+1)(k+2)} a_k. \quad (7.27)$$

Debido a la simetría de $F(\xi)$, $a_0 = 0$ para las $F(\xi)$ impares y $a_1 = 0$ para las $F(\xi)$ pares. Ahora bien, si

$$k \gg 1,$$

entonces,

$$\frac{a_{k+2}}{a_k} \sim \frac{k}{k+2},$$

donde este comportamiento asintótico es consistente con la serie $\sum n^{-1}$. Debemos recordar que sumamos sobre términos pares o impares de ξ , es por ello que expresamos estas

suma con una letra n , donde dependiendo de la paridad, $n = 2k + 1$ ó $n = 2k$. La serie diverge para $\xi = \pm 1$, por lo cual debemos 'cortar' la serie: para ello en la ec. (7.27) asumimos que existe un valor máximo del índice de suma, que llamamos k_{max} , para el cual,

$$k_{max}(k_{max} + 1) - \lambda = 0.$$

En este punto, flotan varios elementos y es conveniente recordar los más importantes. La ecuación de partida nos dice que la función $F(\xi)$ debe ser par ó impar, lo cual se establece a partir de los valores iniciales para a_0 y a_1 . Este punto debe ser claro: la función $F(\xi)$ es par o bien es impar. Una vez que fijamos a_0 y a_1 , digamos $a_0 \neq 0$ y $a_1 = 0$, la ec. (7.27) nos da todos los valores de a_k restantes, que en nuestro ejemplo son $a_{k(par)} \neq 0$ y $a_{k(impar)} = 0, \forall k$. Pero encontramos que $F(\xi)$ diverge a menos que fije un k_{max} que haga que $a_{k_{max}+2} = 0$ y por lo tanto, todos los a_k con $k > k_{max}$ valen cero. El mismo análisis vale para los a_k impares.

De este modo, pasamos de una serie infinita a un polinomio de orden k_{max} . Notemos que $|\xi| \leq 1$ y sin importar el orden del polinomio, éste no diverge nunca, con lo cual logramos construir una solución física de nuestro problema. Es importante notar que del conjunto de soluciones posibles para la ec. (7.26) que llamamos $F(\xi)$, nos quedamos con un *subconjunto* de soluciones que son de cuadrado integrable que llamaremos $P(\xi)$, pues a fin de cuentas esta solución es parte de una función de onda. Para ser claros,

$$F(\xi) \rightarrow P_{k_{max}}(\xi),$$

donde,

$$P_{k_{max}}(\xi) = \sum_{k=0}^{k_{max}} a_k \xi^k,$$

con,

$$a_{k+2} = \frac{k(k+1) - k_{max}(k_{max} + 1)}{(k+1)(k+2)} a_k.$$

Ahora volvemos a nuestra notación original y llamamos,

$$\ell = k_{max},$$

esto es casi redundante, pues $k_{max}(k_{max} + 1) = \lambda$ y $\lambda = \ell(\ell + 1)$. De acuerdo con este desarrollo, tenemos que los valores posibles para ℓ , son,

$$\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$$

esto es, los números naturales más el cero. El polinomio $P_\ell(\xi)$ resulta ser el polinomio de Legendre (que por *azar* resulta tener la misma notación). *El valor de ℓ , al igual que el de m , lo debemos dar nosotros mismos como una condición de contorno. No hemos encontrado los valores de estas constantes, sino que encontramos restricciones sobre sus valores.* Estamos ya próximos a encontrar la solución para nuestro problema, que es encontrar una solución para la ec. (7.17). Nos falta aún el caso de $m \neq 0$.

Antes de seguir adelante, es conveniente hacer un comentario. La ec. (7.26), es una ecuación diferencial de segundo orden y por lo tanto tiene dos soluciones independientes y hemos encontrado solo una. Siguiendo un análisis similar para la segunda solución, se encuentra otra divergencia, solo que esta vez es logarítmica. Del mismo modo, mostramos una única solución física para nuestro problema, dada por $P_\ell(\xi)$. Al igual que en el caso de la ecuación azimutal donde teníamos dos soluciones y nos quedamos con una pues pedimos que la solución sea un autovector del operador \hat{L}_z , en este caso también nos quedamos con una sola solución que es un autovector de \hat{L}^2 . Este párrafo supone saber qué son los operadores de momento angular \hat{L}^2 y \hat{L}_z , que veremos en el capítulo siguiente. Estos puntos son algo sutiles (verán que son omitidos en la mayoría de los libros) y pueden ser pasados por alto en una primera lectura.

Volvamos a la solución para la ec. (7.17), para $m \neq 0$. El procedimiento para encontrar esta solución es conceptualmente sencillo, pero requiere de algún conocimiento de las funciones especiales. En primer lugar, dado que $P_\ell(\xi)$ es solución de la ec. (7.26), podemos escribir,

$$\frac{d}{d\xi} \left[(1 - \xi^2) \frac{dP_\ell(\xi)}{d\xi} \right] + \ell(\ell + 1)P_\ell(\xi) = 0. \quad (7.28)$$

Derivamos m -veces esta ecuación y obtenemos,

$$\frac{d}{d\xi} \left[(1 - \xi^2) \frac{dP_\ell^m(\xi)}{d\xi} \right] - \frac{m^2}{1 - \xi^2} P_\ell^m(\xi) + \ell(\ell + 1)P_\ell^m(\xi) = 0, \quad (7.29)$$

donde introducimos la *función asociada de Legendre* $P_\ell^m(\xi)$, se puede obtener a partir de los polinomios de Legendre $P_\ell(\xi)$, como,

$$P_\ell^m(\xi) = (1 - \xi^2)^{m/2} \frac{d^m P_\ell(\xi)}{d\xi^m}. \quad (7.30)$$

La ec. (7.29) es justamente la ec. (7.17), por lo tanto la solución para esta ecuación es

$P_\ell^m(\xi)$. Notemos que esta función está definida para $|m| \leq \ell$, con lo cual tenemos,

$$m = -\ell, -\ell + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, \ell - 1, \ell.$$

El motivo por el cual hicimos el desarrollo que acabamos de mostrar, fue porque en su desarrollo debimos restringir al conjunto de soluciones para que tenga sentido físico.

Recordemos que la solución para la parte azimutal es $e^{im\phi}$. Podemos hacer ahora el producto de $\Theta(\theta)\Phi(\phi)$, recordando que $\xi = \cos(\theta)$ e incluyendo un factor de normalización que explicaremos enseguida,

$$\Theta(\theta)\Phi(\phi) = Y_\ell^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} (-1)^m e^{im\phi} P_\ell^m(\cos(\theta)). \quad (7.31)$$

Las funciones $Y_\ell^m(\theta, \phi)$ son los armónicos esféricos y cumplen con la relación,

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d\cos(\theta) \left(Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \phi) \right)^* Y_\ell^m(\theta, \phi) = \delta_{\ell', \ell} \delta_{m', m}. \quad (7.32)$$

Esto muestra que la parte angular ya está ortonormalizada. Luego, dada la expresión para la función de onda $\varphi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$, una vez que hallemos $R(r)$, solo debemos preocuparnos por normalizar esta parte radial de la función de onda, pues la parte angular ya está correctamente normalizada.

En resumen, encontramos como solución para la parte angular,

$$\Theta(\theta)\Phi(\phi) = Y_\ell^m(\theta, \phi) \quad (7.33)$$

Con,

$$\ell = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (7.34)$$

$$m = -\ell, -\ell + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, \ell - 1, \ell. \quad (7.35)$$

En este punto, es conveniente concluir la síntesis de la parte angular, reescribiendo la ec. (7.13), como,

$$-\left[\frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right] \Theta(\theta)\Phi(\phi) = \ell(\ell + 1) \Theta(\theta)\Phi(\phi). \quad (7.36)$$

Hemos reescrito esta ecuación de esta forma, pues así escrita resulta claro que se trata de una ecuación de autovectores y autovalores, donde el operador es la cantidad entre corchetes multiplicada por -1 , los autovectores son las funciones $Y_\ell^m(\theta, \phi)$ y los autovalores toman los valores $\ell(\ell + 1)$.

De este modo, encontramos que para *todos* los potenciales centrales en tres dimensiones, podemos escribir la función de onda como,

$$\varphi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_\ell^m(\theta, \phi),$$

donde la parte angular es común a todas las soluciones.

7.3. La ecuación radial

En primer lugar, recordemos la ecuación radial, que está dada por la ec. (7.12), que reescribimos como,

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V(r) - E)R(r) = \ell(\ell + 1)R(r). \quad (7.37)$$

Esta ecuación se simplifica un poco si hacemos un cambio de variables. Sea,

$$u(r) \equiv rR(r).$$

Después de un poco de álgebra, obtenemos,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2u(r)}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \right] u(r) = Eu(r). \quad (7.38)$$

Este es un resultado interesante. Recordemos que nuestro problema es el de resolver la ecuación de Schrödinger en tres dimensiones para un potencial central. Hemos resuelto ya la parte angular y ahora encontramos para la parte radial una ecuación idéntica a la ecuación de Schrödinger en una dimensión, pero con un potencial que tiene un término nuevo ($\sim \ell(\ell + 1)/r^2$). Definimos ahora un potencial efectivo como,

$$V_{eff}(r) \equiv V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2}. \quad (7.39)$$

El término nuevo, se denomina *barrera centrípeta*, pues tiende a (+)infinito cuando nos acercamos al origen en forma más rápida que el (−)infinito de un potencial de la forma $\sim 1/r$.

7.4. Un caso interesante: el oscilador armónico

En una dimensión, estudiamos al oscilador armónico, cuyo potencial viene dado por,

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad (7.40)$$

donde ω es la frecuencia angular, vinculada con la intensidad de la fuerza armónica.

Hemos estudiado ya la solución de la ecuación,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \varphi(x) = E \varphi(x), \quad (7.41)$$

habiendo encontrado que,

$$\varphi_{n_x}(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^{n_x} n_x!}} H_{n_x}(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad (7.42)$$

$$E_{n_x} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad n_x = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (7.43)$$

Con

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x.$$

Analizaremos ahora el problema de un oscilador en tres dimensiones. El caso más general, es aquel de un oscilador con diferentes frecuencias angulares de acuerdo con la dirección:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m\omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2}m\omega_y^2 y^2 + \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2. \quad (7.44)$$

Este problema se puede resolver sencillamente empleando coordenadas cartesianas. Escribimos la ecuación estacionaria de Schrödinger,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}), \quad (7.45)$$

y proponemos una solución separable de la forma,

$$\varphi(\mathbf{r}) = X(x)Y(y)Z(z). \quad (7.46)$$

De este modo, la ec. (7.45), se puede escribir como un conjunto de tres ecuaciones diferenciales desacopladas, de la forma,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega_x^2 x^2 X(x) = E_{n_x} X(x), \quad (7.47)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} + \frac{1}{2}m\omega_y^2 y^2 Y(y) = E_{n_y} Y(y), \quad (7.48)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Z(z)}{dz^2} + \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2 Z(z) = E_{n_z} Z(z). \quad (7.49)$$

En estas ecuaciones y por conveniencia, le hemos puesto un subíndice n_x , n_y y n_z , a las energías. Cada una de estas ecuaciones es la de un oscilador armónico en una dimensión y empleo las funciones de onda y energías dadas en las ecs. (7.42) y (7.43), respectivamente. La energía total es,

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_z. \quad (7.50)$$

Sobre la función de onda, es simplemente el producto $\varphi(\mathbf{r}) = \varphi_{n_x}(x)\varphi_{n_y}(y)\varphi_{n_z}(z)$, donde cada $\varphi_{n_q}(q)$ lo tenemos en la ec. (7.42).

Este ejemplo en tres dimensiones del oscilador anisotrópico lo hemos resuelto en forma exacta. Un caso particular de este problema, es el de un oscilador *isótropo*, esto es cuando vale que,

$$\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega.$$

Como cada ω_q puede tomar cualquier valor, en particular pueden ser iguales. Notemos que en este caso el potencial dado en la ec. (7.44), se puede escribir como,

$$V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2, \quad (7.51)$$

ya que obviamente $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$. Lo relevante es notar aquí que tenemos un potencial central, para el cual conocemos la solución exacta del problema usando coordenadas cartesianas. De la ec. (7.50), tenemos que la energía vale,

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega = \left(n + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega, \quad (7.52)$$

donde, $n = n_x + n_y + n_z$, cuyos posibles valores son $n = 0, 1, 2, 3, \dots$. Naturalmente, vemos que los estados están degenerados, excepto para $n = 0$.

Ahora bien, como se trata de un potencial central, podemos emplear coordenadas esféricas y el problema admite también una solución exacta. No desarrollaremos la solución del problema de la ecuación radial, simplemente transcribimos el resultado tomado de Ref. [10], dado por,

$$E_{k, \ell} = \left(2k + \ell + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega = \left(n + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega, \quad n \equiv 2k + \ell = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (7.53)$$

La función de onda resulta,

$$\varphi(r, \theta, \phi) = \mathcal{N}_{k, \ell} r^\ell e^{-\nu r^2} \mathcal{L}_k^{(\ell + \frac{1}{2})}(2\nu r^2) Y_\ell^m(\theta, \phi), \quad (7.54)$$

con,

$$\mathcal{N}_{k,\ell} = \sqrt{\sqrt{\frac{2\nu^3}{\pi} \frac{2^{k+2\ell+3} k! \nu^\ell}{(2k+2\ell+1)!!}}, \quad (7.55)$$

$$\nu = \frac{m\omega}{2\hbar}. \quad (7.56)$$

La función $\mathcal{L}_k^{(\ell+\frac{1}{2})}(2\nu r^2)$, es el polinomio generalizado de Laguerre.

De este modo, demostramos que los dos caminos para la solución del problema llevan a la misma energía. Demostrar la equivalencia entre las funciones de onda va más allá del objetivo de este capítulo. El elegir una u otra solución, depende del marco en que se resuelve el problema físico: si usamos la función de onda para calcular posteriormente otro problema que se resuelve en coordenadas esféricas, naturalmente deberemos usar coordenadas esféricas. Si se trata de la simple resolución de este problema, el resolverlo en coordenadas cartesianas es más simple. Esto es interesante, pues en este caso tenemos un potencial central cuya solución es más simple en coordenadas cartesianas.

CAPÍTULO 8

Momento angular

Introducción

Conocemos el momento angular de la Mecánica Clásica, cuya expresión para una partícula de masa m es,

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}, \quad (8.1)$$

donde \mathbf{r} es el vector posición de la partícula respecto de un origen de coordenadas y \mathbf{p} es su cantidad de movimiento. Recordemos que \mathbf{L} , \mathbf{r} y \mathbf{p} dependen del sistema de referencia inercial y del sistema de coordenadas que elijamos. Ahora bien, cuando tenemos una fuerza central en Mecánica Clásica y calculamos el momento angular respecto del origen de nuestro sistema, el momento de la fuerza es nulo y el momento angular como vector se conserva. Esto es, si,

$$\sum \mathbf{r} \times \mathbf{F}_{ext} = \mathbf{0} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{L} = \text{constante}.$$

La conservación del momento angular en Mecánica Clásica, es un reflejo de la simetría esférica de los potenciales centrales. En Mecánica Cuántica el momento angular juega un papel muy importante. Guarda similitudes con el caso clásico, pero muestra también importantes diferencias que discutiremos a lo largo de este capítulo.

8.1. Momento angular

La definición del momento angular en Mecánica Cuántica es inmediata a partir de la definición clásica,

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}, \quad (8.2)$$

donde $\hat{\mathbf{r}}$ y $\hat{\mathbf{p}}$ son los operadores vectoriales posición y cantidad de movimiento, respectivamente. Es conveniente escribir las componentes cartesianas del momento angular,

$$\hat{L}_x = \hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y, \quad (8.3)$$

$$\hat{L}_y = \hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z, \quad (8.4)$$

$$\hat{L}_z = \hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x. \quad (8.5)$$

El paso siguiente es emplear las transformaciones canónicas para los operadores de impulso: $\hat{p}_x = i\hbar \partial/\partial x$, $\hat{p}_y = i\hbar \partial/\partial y$ y $\hat{p}_z = i\hbar \partial/\partial z$. De este modo, tenemos expresiones analíticas para el operador vectorial momento angular. Recordemos que los operadores pueden ser escalares, como el Hamiltoniano o vectoriales, como el operador posición.

Cuando en Mecánica Cuántica mostramos un nuevo operador, el primer paso para entender a este nuevo operador es estudiar cómo sus las relaciones de conmutación. Por ejemplo, habíamos visto la relación de conmutación entre el operador posición y cantidad de movimiento, que viene dada por,

$$\boxed{[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar} \quad (8.6)$$

Análogamente, $[\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar$ y $[\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar$, pero $[\hat{x}, \hat{p}_y] = 0$. En general, podemos escribir,

$$\boxed{[\hat{q}, \hat{p}_{q'}] = i\hbar \delta_{q,q'}} \quad (8.7)$$

En esta expresión, $q, q' = x, y, z$. Las relaciones de conmutación son importantes ya que cuando un conjunto de operadores conmutan entre sí, esto es si sobre un conjunto de operadores los tomo de a dos y todos los conmutadores son cero para todas las combinaciones posibles de dos operadores, entonces tienen una base común. El tener una base común significa que dado un conjunto de estados pertenecientes al espacio de

Hilbert de nuestro problema que forman una base, todos estos operadores son diagonales en esa base. Analicemos, entonces, las relaciones de conmutación que involucran al momento angular.

8.2. Relaciones de conmutación para el momento angular

En primer lugar, calculemos el conmutador $[\hat{L}_x, \hat{L}_y]$. Para ello, tengamos presente la propiedad de los conmutadores,

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}. \quad (8.8)$$

Resulta entonces,

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = i\hbar\hat{L}_z. \quad (8.9)$$

La demostración de este resultado es simple, empleando las ecs. (8.7) y (8.8). Repitiendo el procedimiento para todas las componentes cartesianas del momento angular, podemos resumir estos resultados en una única expresión, dada por,

$$\boxed{[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k} \quad (8.10)$$

Donde ϵ_{ijk} es el tensor completamente antisimétrico de Levi-Civita: $\epsilon_{ijk} = +1$ si $(ijk) = (1, 2, 3)$ ó $(3, 1, 2)$ ó $(2, 3, 1)$; $\epsilon_{ijk} = -1$ si $(ijk) = (2, 1, 3)$ ó $(3, 2, 1)$ ó $(1, 3, 2)$ y $\epsilon_{ijk} = 0$ para los casos restantes. Conviene señalar un punto de notación muy repetido en Mecánica Cuántica: los valores de $i, j, k=1, 2, 3$. A su vez, $1 \rightarrow x, 2 \rightarrow y$ y $3 \rightarrow z$. Por qué no usar siempre $1, 2, 3$ ó x, y, z , y lo que es aún peor, mezclar las notaciones como en este caso. Simplemente, se deben conocer y recordar las dos convenciones, pues es normal el usar ambas. Cuidado: las estamos mezclando al usarlas en las ec. (8.9) y (8.10), que son expresiones separadas; pues mezclarlas en la misma expresión estaría mal.

La ec. (8.10) nos da el álgebra del momento angular. Desde el punto de vista conceptual es muy importante: nos dice que no podemos conocer en forma simultánea el

valor del operador vectorial momento angular $\hat{\mathbf{L}} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$, ya que sus componentes cartesianas no conmutan entre sí. Esto es, si conocemos el autovalor de \hat{L}_z , no podemos conocer el autovalor ni de \hat{L}_x , ni de \hat{L}_y al mismo tiempo. Mientras que en Mecánica Clásica podemos conocer el momento angular \mathbf{L} como vector, en Mecánica Cuántica no lo podemos hacer, *a menos que momento angular sea nulo, lo cual es una posibilidad.*

Sigamos con las relaciones de conmutación. Calculo ahora el momento angular al cuadrado, $\hat{\mathbf{L}}^2$,

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \quad (8.11)$$

por simplicidad a partir de ahora designaremos este operador como \hat{L}^2 . Se trata de un operador escalar y es evidente que la raíz cuadrada de su autovalor nos da la magnitud del momento angular: si pensamos en el momento angular como un vector en tres dimensiones, la longitud de ese vector resulta de calcular el valor correspondiente al autovalor de \hat{L}^2 . Calculamos el conmutador,

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}_x^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z^2, \hat{L}_x] = 0, \quad (8.12)$$

donde debemos usar las ecs. (8.8) y (8.10), recordando que todo operador conmuta consigo mismo. Del mismo modo, resulta,

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0 \quad i = x, y, z. \quad (8.13)$$

De este modo tenemos que \hat{L}^2 conmuta con *todas* las componentes cartesianas de $\hat{\mathbf{L}}$, pero las componentes cartesianas no conmutan entre sí. Luego, podemos quedarnos con \hat{L}^2 y *una* de las componentes cartesianas. De las tres componentes cartesianas, nos conviene quedarnos con \hat{L}_z , pues veremos enseguida que su expresión analítica en coordenadas esféricas es más simple.

Los operadores $\hat{\mathbf{L}}$ y \hat{L}^2 son hermíticos, luego estos operadores pueden representar observables. La prueba de esto es simple, pero no la desarrollaremos en este punto. Introducimos ahora dos operadores, llamados *operadores escalón*, dados por,

$$\hat{L}_{\pm} \equiv \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y \quad (8.14)$$

Notemos que $(\hat{L}_+)^{\dagger} = \hat{L}_-$ y $(\hat{L}_-)^{\dagger} = \hat{L}_+$, por lo tanto \hat{L}_+ y \hat{L}_- no son hermíticos y no pueden representar observables.

Notemos una propiedad que nos va a ser útil, calculo,

$$\begin{aligned}\hat{L}_+ \hat{L}_- &= (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)(\hat{L}_x - i\hat{L}_y) \\ &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 - i(\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x) \\ &= \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z,\end{aligned}\quad (8.15)$$

(para obtener la última igualdad sumamos y restamos \hat{L}_z^2 y usamos el valor del conmutador $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$). podemos escribir ahora,

$$\boxed{\hat{L}^2 = \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z}\quad (8.16)$$

Análogamente, se puede mostrar que,

$$\boxed{\hat{L}^2 = \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z}\quad (8.17)$$

Siguiendo con el tipo de cálculos que ya hemos descrito, podemos encontrar que,

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = 0,\quad (8.18)$$

y que,

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm\hbar\hat{L}_\pm.\quad (8.19)$$

No lo probaremos en esta sección, pero si construimos un Hamiltoniano con un *potencial central*, éste conmuta con \hat{L}^2 y \hat{L}_z :

$$[\hat{\mathcal{H}}_{central}, \hat{L}^2] = 0 \quad \wedge \quad [\hat{\mathcal{H}}_{central}, \hat{L}_z] = 0.\quad (8.20)$$

Estas expresiones junto con la ec. (8.13), nos dicen que la base en que $\hat{\mathcal{H}}_{central}$ es diagonal, también lo es para \hat{L}^2 y \hat{L}_z . O dicho con otras palabras, los autovectores de $\hat{\mathcal{H}}_{central}$, también lo son de \hat{L}^2 y \hat{L}_z .

8.2.1. Unidades

Siempre que encontremos una magnitud nueva, debemos emplear unos instantes en analizar sus unidades: las unidades de \hat{L} , son,

$$[\hat{L}] = [\hat{r}][\hat{p}] = \text{longitud} \times \text{masa} \times \frac{\text{longitud}}{\text{tiempo}^2} \times \text{tiempo} = \text{acción},\quad (8.21)$$

de este modo, el momento angular tiene las mismas unidades que la constante de Planck \hbar , esto es, unidades de acción (energía \times tiempo). Luego, podemos escribir el valor del momento angular en términos de un factor adimensional multiplicado por la constante de Planck.

8.3. El momento angular en coordenadas esféricas

Cuando estudiamos el tema del Potencial Central, vimos que el sistema de coordenadas adecuado para el problema eran las coordenadas esféricas. Por otra parte, al comienzo de este capítulo, vimos que el vector momento angular se conserva en Mecánica Clásica para un potencial central. De este modo, debe despertar nuestra curiosidad el analizar el momento angular en coordenadas esféricas. Recordemos que las expresiones para el momento angular en coordenadas cartesianas están dadas en las ecs. (8.3-8.5), junto a la transformación canónica para el momento. Para escribir el momento angular en coordenadas esféricas, comencemos por escribir el operador gradiente en dichas coordenadas,

$$\nabla = \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\phi} \frac{1}{r \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (8.22)$$

Recordando que $\mathbf{p} = (\hbar/i) \nabla$ y la expresión para el momento angular dado por la ec. (8.2), tenemos,

$$\hat{\mathbf{L}} = \frac{\hbar}{i} \left[(\hat{r} \times \hat{r}) \frac{\partial}{\partial r} + (\hat{r} \times \hat{\theta}) \frac{\partial}{\partial \theta} + (\hat{r} \times \hat{\phi}) \frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \phi} \right], \quad (8.23)$$

con $\mathbf{r} = r\hat{r}$. Aquí tenemos el símbolo que indica operador (un 'sombrero' sobre la letra) y usamos el mismo símbolo para indicar un versor. Es un poco difícil de digerir, pero el símbolo indica operador para la izquierda de las igualdades y versor a la derecha. Haciendo un poco de geometría, se puede ver que,

$$\begin{aligned} \hat{r} \times \hat{r} &= 0, \\ \hat{r} \times \hat{\theta} &= \hat{\phi}, \\ \hat{r} \times \hat{\phi} &= -\hat{\theta}, \end{aligned} \quad (8.24)$$

de este modo,

$$\hat{\mathbf{L}} = \frac{\hbar}{i} \left[\hat{\phi} \frac{\partial}{\partial \theta} - \hat{\theta} \frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \phi} \right], \quad (8.25)$$

por otra parte y siguiendo con geometría, escribimos los versores $\hat{\theta}$ y $\hat{\phi}$ según sus componentes cartesianas,

$$\begin{aligned}\hat{\theta} &= \cos(\theta) \cos(\phi) \hat{i} + \cos(\theta) \sin(\phi) \hat{j} + \sin(\theta) \hat{k}, \\ \hat{\phi} &= -\sin(\phi) \hat{i} + \cos(\phi) \hat{j}.\end{aligned}\quad (8.26)$$

Reemplazamos estas expresiones en la ec. (8.25) y obtenemos las expresiones para los operadores de momento angular en coordenadas esféricas,

$$\begin{aligned}\hat{L}_x &= \frac{\hbar}{i} \left(-\sin(\phi) \frac{\partial}{\partial \theta} - \cos(\phi) \cotg(\theta) \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \\ \hat{L}_y &= \frac{\hbar}{i} \left(+\sin(\phi) \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin(\phi) \cotg(\theta) \frac{\partial}{\partial \phi} \right),\end{aligned}\quad (8.27)$$

$$\boxed{\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}} \quad (8.28)$$

Repasemos lo que estamos haciendo. En la ec. (8.25) vemos las componentes vectoriales del momento angular en términos de componentes esféricas. En esa ecuación debemos notar que la componente radial es nula. Del mismo modo en que podemos escribir las coordenadas cartesianas en términos de las esféricas (ver la ec. (7.5)). Acabamos de mostrar las componentes cartesianas del operador momento angular en términos de coordenadas esféricas. Enseguida veremos por qué es útil haber desarrollado estas expresiones. Continuemos ahora con los operadores escalón, definidos en la ec. (8.25),

$$\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i \hat{L}_y = \hbar e^{\pm i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cotg(\theta) \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \quad (8.29)$$

para obtener esta expresión empleamos las ecs. (8.27), junto con la propiedad: $\cos(\phi) \pm i \sin(\phi) = e^{\pm i\phi}$. Calculamos ahora,

$$\hat{L}_+ \hat{L}_- = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cotg(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} + \cotg^2(\theta) \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + i \frac{\partial}{\partial \phi} \right). \quad (8.30)$$

Con todos estos elementos podemos escribir ahora \hat{L}^2 en coordenadas esféricas, que es uno de los elementos que buscamos, pues veremos enseguida que se vincula con la ecuación de Schrödinger para un potencial central. Recordemos la ec. (8.16):

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z.$$

Reemplazando ahora en esta expresión las ecs.(8.28) y (8.30), obtenemos,

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\text{sen}(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\text{sen}(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\text{sen}^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (8.31)$$

Tenemos ya las expresiones que necesitamos. Este fue un esfuerzo de geometría y álgebra. En la próxima sección, nos concentramos en la interpretación física de estos resultados.

8.4. Nuevamente el potencial central

En el Capítulo 7, estudiamos la ecuación de Schrödinger para un potencial central y la escribimos en coordenadas esféricas. Obtuvimos una solución de la forma,

$$\varphi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_\ell^m(\theta, \phi),$$

y encontramos un conjunto de tres ecuaciones diferenciales acopladas. Recordemos la ecuación de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\text{sen}(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\text{sen}(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\text{sen}^2(\theta)} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right] \right\} \varphi(\mathbf{r}) + V(r)\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}).$$

Llegamos al punto en que podemos vincular la parte angular de la ecuación de Schrödinger con su contenido físico. Para ello, miremos la ecs. (7.36) y (8.31). De la ec. (8.31), vemos que el término entre corchetes de la ecuación de Schrödinger (que contiene toda la dependencia angular del Hamiltoniano), resulta ser el operador $-\hat{L}^2/\hbar^2$; mientras que de la ec. (7.36), encontramos que,

$$\hat{L}^2 Y_\ell^m(\theta, \phi) = \hbar^2 \ell(\ell + 1) Y_\ell^m(\theta, \phi) \quad (8.32)$$

Reemplazando el corchete por el operador, podemos reescribir la ecuación de Schrödinger como,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \varphi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2m r^2} \hat{L}^2 \varphi(\mathbf{r}) + V(r)\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}). \quad (8.33)$$

Pero,

$$\hat{L}^2 \varphi(\mathbf{r}) = \hat{L}^2 R(r)Y_\ell^m(\theta, \phi) = \hbar^2 \ell(\ell + 1) R(r)Y_\ell^m(\theta, \phi) = \hbar^2 \ell(\ell + 1) \varphi(\mathbf{r}),$$

por lo cual,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \varphi(\mathbf{r}) + V(r)\varphi(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2}{2m r^2} \ell(\ell + 1) \varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}), \quad (8.34)$$

donde esta última ecuación ya no depende de los ángulos, pues la dependencia angular está contenida en la ec. (8.32). Esta última expresión resulta ser la ec. (7.12); esto es, la ecuación radial.

Encontramos entonces, que para la ecuación de Schrödinger con un potencial central, la parte angular de la ecuación es el momento angular y de la ec. (8.32), resulta que la cantidad ℓ , es el número cuántico que representa al momento angular.

De este modo, ya sabemos qué representa la constante ℓ y ahora nos falta interpretar la constante m . Para ello, recordemos la ec. (8.28) que nos da la expresión de \hat{L}_z en coordenadas esféricas, junto con la expresión para los armónicos esféricos $Y_\ell^m(\theta, \phi)$ (ec. (7.31)).

$$\hat{L}_z Y_\ell^m(\theta, \phi) = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) (\mathcal{C} (-1)^m e^{im\phi} P_\ell^m(\cos(\theta))) = \hbar m Y_\ell^m(\theta, \phi), \quad (8.35)$$

donde,

$$\mathcal{C} = \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}}.$$

Tenemos entonces que,

$$\boxed{\hat{L}_z Y_\ell^m(\theta, \phi) = \hbar m Y_\ell^m(\theta, \phi)} \quad (8.36)$$

De este modo, el número cuántico m , nos dice cómo es la proyección del momento angular sobre el eje z . Recordemos que el momento angular tiene unidades de acción (al igual que la constante de Plank). La proyección sobre el eje z vale $\hbar m$, pudiendo tomar valores positivos o negativos. Por otra parte, de la ec. (8.32), vemos que la magnitud del vector momento angular vale $\sqrt{\ell(\ell + 1)}\hbar$ y es siempre positiva. Resumamos los resultados más importantes de esta sección, pero para ello empleamos la notación de Dirac. Para ello, hacemos,

$$Y_\ell^m(\theta, \phi) \rightarrow |\ell, m\rangle,$$

donde hemos empleado $Y_\ell^m(\theta, \phi) = \langle \theta, \phi | \ell, m \rangle$. Tenemos entonces,

$$\hat{L}^2 | \ell, m \rangle = \hbar^2 \ell(\ell + 1) | \ell, m \rangle, \quad (8.37)$$

$$\hat{L}_z | \ell, m \rangle = \hbar m | \ell, m \rangle, \quad (8.38)$$

con,

$$\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$m = -\ell, -\ell + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, \ell - 1, \ell.$$

Debemos notar que estas relaciones solo son parte de la solución de la ecuación de Schrödinger, cuando tenemos un potencial central. En ese caso, tenemos cantidades conservadas: la magnitud del momento angular y su proyección sobre el eje z . De la misma forma en que la energía se conserva para un Hamiltoniano que no depende del tiempo, la magnitud del momento angular y su proyección sobre el eje z , se conservan cuando tenemos un potencial central. En general, no damos los valores de $\sqrt{\ell(\ell + 1)}\hbar$ y $m\hbar$; sino simplemente los valores de ℓ y m . Estos números, se denominan *números cuánticos*. De hecho, los denominamos 'buenos' números cuánticos. La palabra 'bueno' no es un calificativo moral, sino que se coloca para enfatizar que el número en cuestión hace referencia a una magnitud que se conserva. Los números cuánticos se vinculan con observables y éstos a operadores hermíticos.

Es importante destacar que hemos desarrollado expresiones para el momento angular y sus componentes, en forma independiente a tener o no un potencial central. Aún si no tenemos un potencial central, podemos calcular los valores para el momento angular. Si repasamos la deducción que vinculó el momento angular con la ecuación de Schrödinger, vemos que esta deducción falla si hay un término del potencial que depende de los ángulos. En ese caso, la base de \hat{L}^2 y \hat{L}_z , que es $Y_\ell^m(\theta, \phi)$, no es diagonal para el Hamiltoniano.

8.5. Acción de los operadores \hat{L}_+ y \hat{L}_-

Queremos calcular ahora la acción de \hat{L}_+ y \hat{L}_- , sobre un autoestado de \hat{L}^2 y \hat{L}_z , dado por $| \ell, m \rangle$. Haremos la deducción para \hat{L}_+ . Los pasos para \hat{L}_- son idénticos, por

lo cual simplemente daremos el resultado. Queremos calcular entonces el ket $\hat{L}_+|\ell, m\rangle$. Sabemos el valor de la magnitud del momento angular y su proyección sobre el eje z para el $|\ell, m\rangle$, pero *a priori*, no sabemos nada de $\hat{L}_+|\ell, m\rangle$. En primer lugar, nos preguntamos si tiene un valor definido para ℓ . Para responder a esa pregunta *medimos* el momento angular. De la ec. (8.18), sabemos que $[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = 0$, lo cual voy a emplear ahora,

$$\hat{L}^2(\hat{L}_+|\ell, m\rangle) = \hat{L}_+(\hat{L}^2|\ell, m\rangle) = \hbar^2\ell(\ell+1)(\hat{L}_+|\ell, m\rangle). \quad (8.39)$$

Esto nos dice que el ket $(\hat{L}_+|\ell, m\rangle)$ es un autovector de \hat{L}^2 , con autovalor $\hbar^2\ell(\ell+1)$. Ahora, nuevamente *medimos*, esta vez \hat{L}_z . Recordemos de la ec. (8.19), que $[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm\hbar\hat{L}_\pm$ (y para evitar dudas, $\hat{L}_z\hat{L}_+ = \hat{L}_+\hat{L}_z + \hbar\hat{L}_+$). Tenemos,

$$\hat{L}_z(\hat{L}_+|\ell, m\rangle) = (\hat{L}_+\hat{L}_z + \hbar\hat{L}_+)|\ell, m\rangle = (\hbar m\hat{L}_+ + \hbar\hat{L}_+)|\ell, m\rangle = \hbar(m+1)(\hat{L}_+|\ell, m\rangle). \quad (8.40)$$

De este modo, podemos afirmar que $\hat{L}_+|\ell, m\rangle$ es un autovector de \hat{L}_z con autovalor $\hbar(m+1)$. De las ecs. (8.39) y (8.40), concluimos que,

$$\hat{L}_+|\ell, m\rangle = \mathcal{C}|\ell, m+1\rangle. \quad (8.41)$$

Recordemos que solo los operadores unitarios conservan la norma y estos operadores no lo son. Luego, para que $\hat{L}_+|\ell, m\rangle$ represente un estado físico, debemos calcular la norma \mathcal{C} . Recordemos que $(\hat{L}_+)^\dagger = \hat{L}_-$, luego,

$$\langle\ell, m|\hat{L}_-\hat{L}_+|\ell, m\rangle = \mathcal{C}^2\langle\ell, m+1|\ell, m+1\rangle = \mathcal{C}^2, \quad (8.42)$$

usamos ahora la ec. (8.17),

$$\mathcal{C}^2 = \langle\ell, m|\hat{L}_-\hat{L}_+|\ell, m\rangle = \langle\ell, m|(\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z)|\ell, m\rangle = \hbar^2(\ell(\ell+1) - m(m+1)), \quad (8.43)$$

reemplazamos el valor de \mathcal{C} en la ec. (8.41) para obtener el resultado final, donde incluimos también el valor para $\hat{L}_-|\ell, m\rangle$:

$$\hat{L}_+|\ell, m\rangle = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m+1)}|\ell, m+1\rangle, \quad (8.44)$$

$$\hat{L}_-|\ell, m\rangle = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m-1)}|\ell, m-1\rangle. \quad (8.45)$$

De este modo, entendemos por qué a estos operadores se los llama operadores escalón: pues su acción es aumentar o disminuir en una unidad el valor de la proyección del

momento angular. Debemos notar que,

$$\hat{L}_+ | \ell, \ell \rangle = 0, \quad (8.46)$$

$$\hat{L}_- | \ell, -\ell \rangle = 0, \quad (8.47)$$

ya que de no ser cero, conduciría a una norma imaginaria.

8.5.1. Sobre los valores de ℓ y m

Más allá de su valor, por construcción la norma de cualquier estado físico es mayor o igual a cero. Siguiendo el procedimiento expuesto en la ec. (8.43), podemos escribir,

$$\langle \ell, m | \hat{L}_- \hat{L}_+ | \ell, m \rangle = \hbar^2 (\ell(\ell + 1) - m(m + 1)) \geq 0, \quad (8.48)$$

$$\langle \ell, m | \hat{L}_+ \hat{L}_- | \ell, m \rangle = \hbar^2 (\ell(\ell + 1) - m(m - 1)) \geq 0, \quad (8.49)$$

hacemos un poco de álgebra y tenemos,

$$\ell(\ell + 1) \geq m(m + 1) \rightarrow \left(\ell + \frac{1}{2} \right)^2 \geq \left(m + \frac{1}{2} \right)^2, \quad (8.50)$$

$$\ell(\ell + 1) \geq m(m - 1) \rightarrow \left(\ell + \frac{1}{2} \right)^2 \geq \left(m - \frac{1}{2} \right)^2, \quad (8.51)$$

ahora bien, si en la ec. (8.50) colocamos un $m > \ell$ la desigualdad no se cumple, mientras que si en ec. (8.51) colocamos un $m < -\ell$ la desigualdad tampoco se cumple. De este modo, para que se cumpla la condición de que la norma sea mayor o igual a cero, debemos tener,

$$-\ell \leq m \leq \ell.$$

Esta condición ya la conocíamos: función asociada de Legendre $P_\ell^m(\cos(\theta))$ valía cero si no se cumplía. Ahora hemos confirmado esta propiedad, pero sobre una base diferente.

8.6. Cálculo de los valores medios $\langle \hat{L}_x \rangle$ y $\langle \hat{L}_y \rangle$

En la ec. (8.14), definimos los operadores \hat{L}_+ y \hat{L}_- . A partir de su definición, podemos escribir los operadores \hat{L}_x y \hat{L}_y , en función de los operadores escalón,

$$\hat{L}_x = \frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-), \quad (8.52)$$

$$\hat{L}_y = \frac{1}{2i}(\hat{L}_+ - \hat{L}_-). \quad (8.53)$$

Para calcular $\langle \hat{L}_x \rangle$ y $\langle \hat{L}_y \rangle$, podemos calcular $\langle \hat{L}_+ \rangle$ y $\langle \hat{L}_- \rangle$ y usar luego las ecs. (8.52) y (8.53):

$$\langle \hat{L}_+ \rangle \equiv \langle \ell, m | \hat{L}_+ | \ell, m \rangle = C_+ \langle \ell, m | \ell, m + 1 \rangle = 0, \quad (8.54)$$

$$\langle \hat{L}_- \rangle \equiv \langle \ell, m | \hat{L}_- | \ell, m \rangle = C_- \langle \ell, m | \ell, m - 1 \rangle = 0. \quad (8.55)$$

Por lo tanto, $\langle \hat{L}_x \rangle = \langle \hat{L}_y \rangle = 0$. Este ejemplo nos muestra la utilidad de los operadores escalón y también nos dice que los operadores \hat{L}_x y \hat{L}_y no son diagonales en la base $|\ell, m\rangle$.

CAPÍTULO 9

El átomo de hidrógeno

Introducción

Considerando la materia en estado atómico, el hidrógeno es el átomo más abundante en el Universo. Es, además, el más simple. Todos sabemos que está formado por un protón y por un electrón. Nuestro estudio del átomo de hidrógeno es desde el punto de vista mecánico cuántico. Desde nuestro punto de vista, debemos primero responder a dos preguntas. La primera pregunta es: ¿qué es un átomo de hidrógeno? La segunda pregunta es: ¿por qué deseamos estudiarlo?

Dada su importancia, vale la pena escribir un párrafo sobre historia. La palabra *hidrógeno*, viene de las palabras griegas *hydor* (que significa “agua”) y *gennao* (“engendrador”), significando “formador de agua”, debido a que al quemar este gas se origina agua. El nombre de hidrógeno fue dado por Lavoisier. El hidrógeno en sí, fue identificado por Henry Cavendish en 1766. La palabra *átomo* es más antigua. El término proviene del griego *átomon*, unión de “a” (que significa “sin”), y “tómos” (“sección”), que no tiene secciones y por lo tanto que no se puede cortar, que es indivisible. El nombre fue dado por Demócrito de Abdera, a las partículas que él concebía como las de menor tamaño posible.

Volvamos a las dos preguntas de arriba. En primer lugar, para nosotros un átomo de hidrógeno es un sistema ligado, formado por un protón y por un electrón. La fuerza que los mantiene ligados, es la interacción Coulombiana. Como el sistema es de dos cuerpos y al igual que en Mecánica Clásica, siempre podemos reducir al problema al

de un solo cuerpo sometido a un potencial externo. En este punto es importante diferenciar entre la realidad y el modelo de la realidad que propondremos para describir al átomo de hidrógeno: la interacción Coulombiana electrostática, es la única fuerza electromagnética, cuando las cargas están en reposo. Si, como en el átomo de hidrógeno, las cargas están en movimiento, juegan también un papel las fuerzas magnéticas. En este capítulo nos restringimos a la interacción coulombiana y veremos que los resultados experimentales muestran que es una buena aproximación.

Sobre la segunda pregunta, el por qué deseamos estudiar al átomo de hidrógeno, la respuesta es porque tiene una importancia enorme en astronomía. La información que nos llega de los átomos en el Universo proviene mayormente de sus espectros (de emisión o de absorción). Si bien se estudian los espectros atómicos desde hace mucho tiempo, su estudio es anterior al del desarrollo de la Mecánica Cuántica. Pero solo con Mecánica Cuántica podemos comprender y predecir el espectro de un átomo. Entre todos los espectros atómicos, el del hidrógeno es el más simple y por lo tanto, es el punto de inicio natural.

9.1. El problema de dos cuerpos

Hasta ahora, trabajamos con una única partícula, que podía ser libre o experimentaba la acción de algún potencial externo. Comenzamos el estudio de un sistema formado por dos partículas. Para ello, en primer lugar introducimos la función de onda para un sistema de dos partículas,

$$\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t), \quad (9.1)$$

donde esta expresión representa la amplitud de probabilidad de encontrar la partícula 1 en \mathbf{r}_1 y la partícula 2 en \mathbf{r}_2 al tiempo t . Por ejemplo,

$$\int d^3r_2 |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)|^2,$$

es la probabilidad de encontrar la partícula 1 en \mathbf{r}_1 al tiempo t , independientemente de la posición de la partícula 2.

Debe cumplirse la condición de normalización,

$$\int d^3r_1 \int d^3r_2 |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)|^2 = 1. \quad (9.2)$$

Se puede pensar a $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$, como la componente del vector de estado $|\psi(t)\rangle$ en la base $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \psi(t) \rangle .$$

Como en el caso de una partícula, la posición y la cantidad de movimiento $\mathbf{p}_{1,2}$, están asociados a operadores, cumpliendo,

$$\begin{aligned} [\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2] &= [\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_1] = 0, \\ [\mathbf{r}_{1i}, \mathbf{p}_{1j}] &= i\hbar \delta_{ij}, \\ [\mathbf{r}_{2i}, \mathbf{p}_{2j}] &= i\hbar \delta_{ij}, \end{aligned} \quad (9.3)$$

con

$$\mathbf{p}_{1,2} = \frac{\hbar}{i} \nabla_{1,2}.$$

Vayamos ahora al problema específico del átomo de hidrógeno, donde tenemos un protón, cuya masa es $m_p = 938\text{MeV}/c^2$, y un electrón, cuya masa es de $m_e = 0,51\text{MeV}/c^2$. La interacción entre ambas depende de la posición relativa de las partículas, esto es, $V(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p)$. La ecuación de Schrödinger para este sistema se puede escribir como,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_p} \nabla_p^2 + V(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p) \right) \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p, t) . \quad (9.4)$$

Introducimos ahora,

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p, \\ \mathbf{R}_{CM} &= \frac{m_e \mathbf{r}_e + m_p \mathbf{r}_p}{m_e + m_p}, \\ \mathbf{P}_{CM} &= \mathbf{p}_e + \mathbf{p}_p, \\ \mathbf{p} &= \frac{m_p \mathbf{p}_e - m_e \mathbf{p}_p}{m_e + m_p}, \\ m &= \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}, \\ M_T &= m_e + m_p. \end{aligned} \quad (9.5)$$

Notamos que la masa reducida vale $m = 0,5097\text{MeV}/c^2$, lo cual indica que más allá del aspecto formal, podemos pensar al protón como fijo en el origen y al electrón moviéndose sin incurrir en un error apreciable (el error es del orden de 0,05 %).

Ahora reescribimos el Hamiltoniano como,

$$\mathcal{H} = \frac{P_{CM}^2}{2M_T} + \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \quad (9.6)$$

reemplazando,

$$\psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p, t) = \phi(\mathbf{r}, \mathbf{R}_{CM}, t), \quad (9.7)$$

la ecuación de Schrödinger resulta,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M_T} \nabla_{CM}^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + V(\mathbf{r}) \right) \phi(\mathbf{r}, \mathbf{R}_{CM}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{r}, \mathbf{R}_{CM}, t). \quad (9.8)$$

Que es una ecuación separable, ya que $V(\mathbf{r})$, es independiente de la posición del centro de masa, $\phi(\mathbf{r}, \mathbf{R}_{CM}, t) = f(\mathbf{R}_{CM}, t)\chi(\mathbf{r}, t)$,

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2M_T} \nabla_{CM}^2 f(\mathbf{R}_{CM}, t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{R}_{CM}, t), \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + V(\mathbf{r}) \right) \chi(\mathbf{r}, t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (9.9)$$

El centro de masa se comporta como una partícula libre,

$$f(\mathbf{R}_{CM}, t) = e^{i(\mathbf{P}_{CM} \cdot \mathbf{R}_{CM} - (P_{CM}^2/2M_T)t)/\hbar}. \quad (9.10)$$

Supongamos ahora que E es el valor de la energía del sistema relativo,

$$\chi(\mathbf{r}, t) = e^{iEt/\hbar} \varphi(\mathbf{r}), \quad (9.11)$$

donde,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + V(\mathbf{r}) \right) \varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}). \quad (9.12)$$

La solución final es,

$$\varphi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p, t) = e^{i(\mathbf{P}_{CM} \cdot \mathbf{R}_{CM} - (E + P_{CM}^2/2M_T)t)/\hbar} \varphi(\mathbf{r}). \quad (9.13)$$

Naturalmente, al ver esta solución la primera objeción es que no es de cuadrado integrable. En realidad, lo que debemos notar de esta discusión es que podemos separar el problema en dos partes: por un lado, el desplazamiento de una única partícula, cuya masa es la masa total del átomo, que se desplaza como un todo en forma libre; más otra partícula, cuya masa es la masa reducida, que está sometida a un potencial. Lo que hace que la función de onda en la ec. (9.13), no sea de cuadrado integrable, es la parte que corresponde al movimiento como un todo y es un problema que en general no tiene interés para nosotros. En el caso de que queramos analizar este punto, deberíamos construir un paquete de ondas, para que represente un estado físico. En resumen, podemos comenzar por el problema dado por la ec. (9.12), pensando al protón en reposo y

al electrón moviéndose y obtendremos básicamente el mismo resultado que usando una partícula con una masa reducida.

9.2. Un modelo simple para el átomo de hidrógeno

Hasta ahora, estudiamos técnicas de cálculo dentro del marco de la Mecánica Cuántica y la mayoría de los problemas que analizamos son simplificaciones de problemas más complejos. Enfrentamos ahora un problema real, que es el del átomo de hidrógeno. En este caso, debemos proponer un modelo para describir al átomo de hidrógeno. La diferencia con los problemas anteriores puede parecer un poco sutil, pero no lo es. En los problemas anteriores, partíamos de un potencial y ciertas condiciones de contorno, y si éramos capaces de resolverlo correctamente, llegábamos al final de nuestro análisis. Con el átomo de hidrógeno, propondremos un modelo, intentaremos resolverlo y luego debemos confrontar nuestros resultados con las medidas experimentales. Si no concuerdan, debemos cambiar el modelo. Naturalmente elegimos un modelo que arroje buenos resultados. Sin embargo, en un capítulo posterior veremos que el modelo en sí es perfectible e implementaremos ciertas sofisticaciones para mejorarlo. Debemos tener en claro que existe una diferencia entre la realidad y el modelo que proponemos para describirla. Debemos establecer claramente cuáles son las hipótesis de partida, tener presentes esas hipótesis y ponerlas a prueba. De hecho, esta idea ocupará lo que resta de este capítulo y varios de los siguientes.

La primera hipótesis que haremos es que podemos describir el problema, con la Mecánica Cuántica no relativista. En segundo lugar, existe una propiedad intrínseca de las partículas llamada *spin* (ó espín, según su denominación en castellano; pero emplearemos la palabra en inglés, pues ya se hizo de uso corriente en física). Estudiaremos el spin en el capítulo siguiente. Sin embargo, es poco probable que quienes lean estas líneas hayan visto la palabra spin escrita aquí por primera vez. El spin es una propiedad puramente cuántica, que no tiene un análogo clásico. La ecuación de Schrödinger vale para partículas sin spin y de hecho, tanto el protón, como el electrón, son partículas con spin. Nuestra segunda hipótesis es que en una primera aproximación, podemos dejar de lado el spin. La tercera y última hipótesis, es que la interacción entre el protón y el electrón es la

interacción Coulombiana. Se trata de un potencial central y de hecho, sería la única interacción sólo si las partículas están en reposo. De este modo, suponemos que la interacción dominante es la electrostática y los efectos magnéticos van a actuar como perturbaciones.

Comencemos discutiendo el potencial entre el protón y el electrón. El potencial Coulombiano es un potencial central dado por,

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_e q_p}{r}, \quad (9.14)$$

donde ϵ_0 es la permitividad eléctrica del vacío, y q_e y q_p , son las cargas eléctricas del electrón y del protón, respectivamente. Sabemos que el signo de las cargas es diferente y por simplicidad escribimos,

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_e q_p}{r} \equiv -\frac{e^2}{r}. \quad (9.15)$$

El paso siguiente es emplear este potencial para resolver la ec. (9.12), que es lo que haremos en la próxima sección. De este modo, tenemos planteado nuestro modelo par describir al átomo de hidrógeno.

9.3. Solución de la ecuación de Schrödinger para el pot. Coulombiano

Debemos resolver la ec. (9.12), para el potencial dado por la ec. (9.15) que es un potencial central. Naturalmente, es el momento de emplear lo aprendido en los capítulos 7 y 8. En primer lugar, recordemos que la función de onda $\varphi(\mathbf{r})$, la podemos escribir como,

$$\varphi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_\ell^m(\theta, \phi),$$

donde $R(r)$ es la solución de,

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V(r) - E)R(r) = \ell(\ell + 1)R(r). \quad (9.16)$$

Haciendo el siguiente cambio de variables:

$$u(r) \equiv rR(r),$$

obtenemos,

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[-\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u(r) = E u(r)} \quad (9.17)$$

En esta última ecuación, hemos reemplazado el potencial, por su expresión explícita. El próximo paso es resolver esta ecuación. La incógnita es la función $u(r)$ y para encontrar una solución física del problema, estableceremos los valores posibles de la energía E .

Este es un problema complejo. Siempre antes de comenzar a resolver un problema complejo, es conveniente detenerse un poco y tratar de entender si podemos decir algo del problema antes de resolverlo. En este caso, miramos el potencial. Lo podemos escribir como un potencial efectivo de la forma,

$$V_{eff}(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}.$$

Vemos que el potencial tiene dos términos. El primero es la interacción Coulombiana que es atractiva. Sabemos que es atractiva, pues la atracción entre cargas de signo opuesto es un concepto elemental del Electromagnetismo. Este potencial tiene signo negativo y a medida de que decrece r este término se incrementa en magnitud, y por el signo menos, hace que la energía disminuya. Como sabemos que los sistemas físicos evolucionan hacia el mínimo de energía, concluimos que es atractivo (o en forma más simple, vinculamos la fuerza con (-) el gradiente del potencial). Aclarado este punto, el término siguiente es repulsivo. El primero va como $\sim -1/r$, mientras que el segundo va como $\sim 1/r^2$. Esto nos dice que para $r \rightarrow 0$, gana $\sim 1/r^2$ y la partícula no puede llegar al origen. *Excepto*, cuando $\ell = 0$, en cuyo caso solo tenemos $\sim -1/r$ y en ese caso sí podemos llegar al origen. En el otro límite, para los rs muy grandes, domina $\sim -1/r$ (notemos que $\sim 1/r^2$, es la dependencia funcional de un dipolo eléctrico, esto es, no se trata de un potencial de alcance infinito).

Volvamos a la ec. (9.17), que reescribimos como,

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{2mr^2} + E \right) u(r) = 0. \quad (9.18)$$

Hacemos ahora el cambio de variables,

$$E = -\frac{k^2 \hbar^2}{2m}, \quad (9.19)$$

$$\xi = \frac{2me^2}{\hbar^2 k}. \quad (9.20)$$

De este modo, tenemos,

$$\frac{1}{k^2} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left(\frac{\xi}{kr} - \frac{\ell(\ell+1)}{k^2 r^2} - 1 \right) u(r) = 0. \quad (9.21)$$

Hacemos ahora otro cambio de variables,

$$kr = x \rightarrow \frac{d^2}{dr^2} = k^2 \frac{d^2}{dx^2}. \quad (9.22)$$

Tenemos entonces,

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \left(\frac{\xi}{x} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} - 1 \right) u(x) = 0. \quad (9.23)$$

Consideremos el límite $x \rightarrow \infty$,

$$\frac{d^2}{dx^2} u(x) - u(x) = 0; \quad u(x) \approx e^{-x},$$

para $x \rightarrow 0$

$$\frac{d^2}{dx^2} u(x) - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} u(x) = 0; \quad u(x) \approx x^{\ell+1}.$$

Teniendo en cuenta estos valores asintóticos, proponemos una solución de la forma,

$$u(x) = e^{-x} x^{\ell+1} S(x), \quad (9.24)$$

reemplazando en la ec. (9.23) y después de un poco de álgebra, tenemos,

$$x \frac{d^2 S(x)}{dx^2} + 2(\ell+1-x) \frac{dS(x)}{dx} + (\xi - 2(\ell+1)) S(x) = 0. \quad (9.25)$$

Para resolver esta ecuación, proponemos una expansión de $S(x)$, en una serie de potencias de la forma,

$$S(x) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j x^j, \quad (9.26)$$

reemplazando en la ec. (9.25), obtenemos la siguiente relación de recurrencia para los coeficientes c_j ,

$$c_{j+1} = \left(\frac{2(j+\ell+1) - \xi}{(j+1)(j+2\ell+2)} \right) c_j. \quad (9.27)$$

Si sumamos la serie a orden infinito, resulta que la función resultante no es de cuadrado integrable, por lo cual debemos pedir que exista un j_{max} que corte la serie y se transforma entonces, en un polinomio:

$$2(j_{max} + \ell + 1) - \xi = 0. \quad (9.28)$$

Definimos el número cuántico principal n , como,

$$n \equiv j_{max} + \ell + 1, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (9.29)$$

Por otra parte,

$$n = \frac{\xi}{2} = \frac{me^2}{\hbar^2 k}, \quad (9.30)$$

reemplazando ahora este valor de k elevado al cuadrado en la ec. (9.19), podemos escribir para E ,

$$E_n = - \left(\frac{me^4}{2\hbar^2} \right) \frac{1}{n^2}, \quad (9.31)$$

donde a la energía, le agregamos el subíndice n , ya que depende de este número cuántico.

Notemos que,

$$E_I \equiv \frac{me^4}{2\hbar^2} \cong 13,6 \text{ eV}, \quad (9.32)$$

se denomina energía de ionización, y representa la energía mínima para arrancar el electrón desde el estado fundamental al continuo. Finalmente, tenemos que las energías son discretas y toman los valores,

$$\boxed{E_n = -\frac{E_I}{n^2}} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (9.33)$$

El polinomio $S(x)$ va a depender de j_{max} y ℓ ó, alternativamente, de n y ℓ . De la ec. (9.27), $S(x)$ resulta ser el polinomio de Laguerre,

$$S(x) = L_\gamma^\beta(x), \quad (9.34)$$

donde $L_\gamma^\beta(x)$ son los polinomios de Laguerre y los valores para β y γ , los daremos enseguida. Volviendo ahora a la variable original, esto es la magnitud del vector posición r y recordando que,

$$R(r) = \frac{1}{r} e^{-kr} (kr)^{\ell+1} S(kr).$$

De la ec. (9.30), podemos escribir,

$$k = \frac{me^2}{\hbar^2} \frac{1}{n},$$

introducimos ahora el radio de Bohr, a_0 , dado por,

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,529 \text{ \AA}, \quad (9.35)$$

esto es, $k = 1/a_0n$. (Recordemos la unidad de longitud Angstrom, cuyo símbolo es Å y $1 \text{ Å} = 10^{10} \text{ m}$). De este modo, tenemos,

$$R_{nl}(r) = -\left\{ \left(\frac{2}{na_0} \right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n-\ell)!]^3} \right\}^{1/2} e^{-r/na_0} \left(\frac{2r}{na_0} \right)^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1} \left(\frac{2r}{na_0} \right) \quad (9.36)$$

Por completitud, escribamos para la función de onda del átomo de hidrógeno,

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_\ell^m(\theta, \phi), \quad (9.37)$$

donde a la función de onda le agregamos los subíndices correspondientes al lado derecho de la expresión. De este modo, ya sabemos las energías posibles para el átomo de hidrógeno, junto a sus funciones de onda. En la sección siguiente analizaremos estos resultados.

9.4. Sobre la paridad de la función de onda

Una transformación de paridad es la que cambia \mathbf{r} por $-\mathbf{r}$. En una dimensión, cambiamos x por $-x$ y sabemos que las funciones, cuando tienen una paridad definida son pares ($f_P(-x) = f_P(x)$) o impares ($f_I(-x) = -f_I(x)$). Hemos discutido esta operación en la Sec. 1.5. Daremos ahora algunos detalles de la transformación de paridad en tres dimensiones y en coordenadas esféricas.

En tres dimensiones, entonces, debemos hacer el cambio $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$, si la función queda igual, la función es par; si cambia de signo, es impar y si el cambio en la función no es un simple cambio de signo, entonces la función no tiene la paridad definida. El cambio $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$, en coordenadas cartesianas se escribe como,

$$x \rightarrow -x,$$

$$y \rightarrow -y,$$

$$z \rightarrow -z.$$

Mientras que en coordenadas esféricas es,

$$\begin{aligned} r &\rightarrow r, \\ \theta &\rightarrow \pi - \theta, \\ \phi &\rightarrow \phi + \pi. \end{aligned}$$

De este modo, como el potencial Coulombiano que es de la forma $\sim 1/r$, resulta ser un potencial par y por ello esperamos que la función de onda correspondiente sea o bien par o bien impar. Es conveniente definir un operador que realice la operación $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$. Este operador es el operador paridad y lo designamos como $\hat{\mathcal{P}}$, definido como,

$$\hat{\mathcal{P}}f(\mathbf{r}) = f(-\mathbf{r}). \quad (9.38)$$

Veamos la acción del operador paridad sobre la función de onda del átomo de hidrógeno dada por la ec. (9.37):

$$\hat{\mathcal{P}} [R_{n\ell}(r)Y_{\ell}^m(\theta, \phi)] = R_{n\ell}(r)Y_{\ell}^m(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^{\ell} R_{n\ell}(r)Y_{\ell}^m(\theta, \phi). \quad (9.39)$$

De este modo, tenemos que para el átomo de hidrógeno el comportamiento de sus funciones de onda frente a un cambio en la paridad resulta en,

$$\hat{\mathcal{P}} [\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi)] = (-1)^{\ell} \psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi). \quad (9.40)$$

Como esperábamos, las funciones de onda del átomo de hidrógeno tiene una paridad definida.

9.5. Análisis de los resultados

En primer lugar, nos conviene escribir nuevamente la expresión para la energía dada por la ec. (9.33):

$$E_n = -\frac{E_I}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Donde $E_I \cong 13,6\text{eV}$, es la energía de ionización como ya indicamos, pues es la menor energía que debemos darle al electrón para pasar del estado fundamental a desprenderse del protón: el electrón está ligado en tanto su energía sea negativa. Si comparamos

la energía de ionización con la masa en reposo del electrón, cuyo valor es de $m_e c^2 = 0,51 \times 10^6 \text{eV}$, vemos que,

$$E_I \ll m_e c^2,$$

esto indica que nuestra primera hipótesis, la que dice que haremos un tratamiento no-relativista, fue una buena hipótesis ya que las energías puestas en juego son mucho menores que la masa en reposo de la partícula involucrada.

9.5.1. Sobre los números cuánticos y la degeneración

Volvamos a la ec. (9.29),

$$n = j_{max} + \ell + 1, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Notamos que la energía depende solo de n , que se denomina *número cuántico principal*. Por otra parte, sabemos que $\ell = 0, 1, \dots$ y por construcción, $j_{max} = 0, 1, \dots$, ya que $n \geq 1$, $\ell \geq 0$ y $j_{max} \geq 0$, si fijamos n , entonces,

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1. \quad (9.41)$$

En la Subsección 8.5.1, vimos los valores posibles de m , para un ℓ fijo. De este modo, tenemos tres número cuánticos: n , que indica el nivel de energía; ℓ , vinculado con el valor del módulo del momento angular; y m vinculado con el valor de la proyección del momento angular sobre el eje z . El valor de n es el de cualquier número natural. Resumamos los valores posibles para estos números cuánticos:

$$n = 1, 2, \dots \quad (9.42)$$

$$\ell = 0, 1, \dots, n - 1. \quad (9.43)$$

$$m = -\ell, -\ell + 1, \dots, 0, \dots, \ell - 1, \ell. \quad (9.44)$$

Analizamos ahora la degeneración de los niveles de energía. Para evitar confusiones, notemos que la función de onda $\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi)$, depende de los números cuánticos (n, ℓ, m) , pero la energía sólo depende de n . De este modo, para conocer la degeneración de cada nivel, debemos contar cuántos valores posibles para ℓ y m tenemos para un n dado. Notamos que dado un ℓ , tenemos $2\ell + 1$ valores posibles para m ; mientras que para un

n , tenemos n valores posibles para ℓ . Al sumar, obtenemos,

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2, \quad (9.45)$$

que es la degeneración del nivel n .

9.5.2. Espectros y comparación con el experimento

Cuando un electrón pasa de un nivel n_i a un nivel n_f , con $n_f < n_i$, lo hace emitiendo un fotón. La frecuencia ν , de ese fotón viene dada por,

$$h\nu = E_{n_i} - E_{n_f}. \quad (9.46)$$

Alternativamente, podemos escribir la inversa de la longitud λ , de onda como,

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{E_I}{hc} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right). \quad (9.47)$$

Comparemos esta expresión con la fórmula de Rydberg, que es un ajuste empírico de los espectros experimentales:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right), \quad (9.48)$$

donde R_H es la denominada *constante de Rydberg*, cuyo valor es,

$$R_H = 1,0967 \times 10^7 \text{ m}^{-1}.$$

Calculamos entonces,

$$\frac{E_I}{hc} = \frac{m_e q_e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^3 4\pi c} = 1,09738 \times 10^7 \text{ m}^{-1}.$$

(Recordemos que habíamos llamado a $e^2 = q_e^2/4\pi\epsilon_0$, donde q_e es la carga del electrón). De este modo, la diferencia entre el valor que da la Mecánica Cuántica para la constante de Rydberg, difiere en 0,06 % del valor experimental, lo cual muestra un excelente acuerdo. Este resultado, respalda la segunda y tercera hipótesis de partida, esto es, que el efecto del spin es poco importante a este nivel y que la interacción Coulombiana es una buena aproximación.

Para finalizar esta subsección, vale la pena indicar que en la denominación de las líneas espectroscópicas pre-cuánticas, se agrupan según el n_f : cuando $n_f = 1$, se habla de la serie de Lyman; $n_f = 2$, serie de Balmer y $n_f = 3$, serie de Paschen.

9.5.3. Funciones de onda y $\langle r \rangle$ para el estado fundamental

Escribamos en forma explícita algunas de las funciones radiales $R_{n\ell}(r)$,

$$R_{10} = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}, \quad \text{estado fundamental,} \quad (9.49)$$

$$R_{20} = \frac{1}{(2a_0)^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}, \quad (9.50)$$

y el armónico esférico con $\ell = 0$, es,

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}. \quad (9.51)$$

Nos concentramos en la función de onda del estado fundamental, de las ecs. (9.49) y (9.51), resulta,

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}. \quad (9.52)$$

Lo primero que notamos es que esta función de onda solo depende de r . Esto es así, para todos los estados con $\ell = 0$. Al comienzo del capítulo, vimos que si bien en lo formal es muy simple pasar del problema de dos cuerpos al de un solo cuerpo con una masa reducida y sometida a la acción de una interacción, en los hechos podemos pensar que tenemos un electrón bajo la acción del potencial Coulombiano (entre este electrón y el protón), donde el electrón se mueve y el protón está fijo en el origen de coordenadas. De este modo, esta es la función de onda del electrón y nos preguntamos ahora dónde está ubicado el electrón respecto del protón.

Sabemos que desde el punto de vista cuántico no podemos hablar de trayectorias, pero sí podemos calcular el valor medio de la posición del electrón. Antes de comenzar a desarrollar los cálculos, debemos respondernos a nosotros mismos la siguiente pregunta: ¿dónde espero que se encuentre el electrón, cuando su estado cuántico es el del estado fundamental? Bueno, si recordamos un poco el curso de Física Moderna, deberíamos responder que se encuentra a una distancia a_0 (radio de Bohr) del protón. Vayamos ahora a las cuentas, pues nos serán útiles para repasar varios conceptos.

En primer lugar, asociamos el módulo de la función de onda al cuadrado, con la probabilidad de encontrar la partícula (en nuestro caso, el electrón), en un punto r , al tiempo t . Eso es verdad, pero en realidad el módulo de la función de onda al cuadrado es la *densidad* de probabilidad. Miremos el panel *a*), en la Fig. 9.1. Vemos que el máximo del módulo de la función de onda al cuadrado se encuentra en el origen. Si confundimos

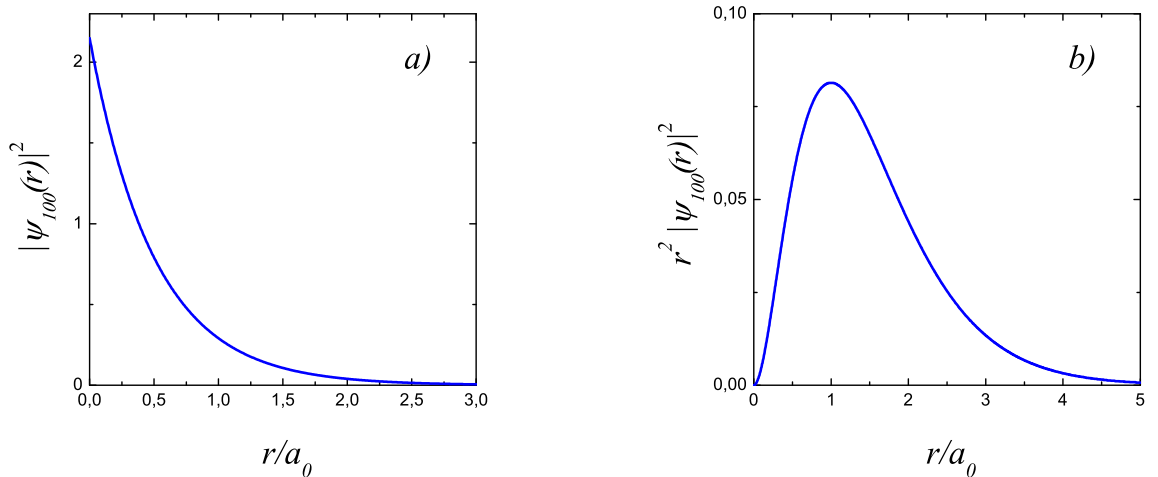


Figura 9.1: *Módulo de la función de onda (a) y módulo de la función de onda por la posición al cuadrado (b), como función de la posición. El módulo de la función de onda está en unidades de Å^{-3} , mientras que la segunda magnitud lo está en unidades de Å^{-1} . Empleamos $a_0 = 0,529\text{Å}$.*

la densidad de probabilidad, con la probabilidad, esto se vería mal, pues no esperamos encontrar el electrón en el origen. Calculemos entonces la probabilidad; para lo cual multiplicamos la densidad de probabilidad por un diferencial de volumen:

$$dP = |\psi_{100}(r, \theta, \phi)|^2 dV, \tag{9.53}$$

en coordenadas esféricas, $dV = d\phi d\cos(\theta) dr r^2$. Calculamos ahora el valor medio de r , la distancia al origen, obtenemos,

$$\langle r \rangle = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d\cos(\theta) \int_0^\infty dr r^2 \psi_{100}^*(r, \theta, \phi) r \psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{3}{2} a_0. \tag{9.54}$$

(Evaluar esta integral es realmente simple). De acuerdo, encontramos algo que está más de acuerdo con lo que esperábamos, pero no es a_0 . Debemos pensar aún un poco, para estar seguros de que entendemos todo correctamente. Ya que la función de onda no depende de los ángulos, integramos en ellos (el resultado de la integral es de 4π), para no arrastrar esas variables. Pasamos a incrementos finitos y tenemos entonces,

$$\Delta P = 4\pi |\psi_{100}(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \Delta r. \tag{9.55}$$

En el panel *b*) de la Fig. 9.1, graficamos la función $|\psi_{100}(r, \theta, \phi)|^2 r^2$. Reemplazo ahora la función de onda, por la ec. (9.52):

$$\Delta P = \frac{4}{a_0^3} e^{-2r/a_0} r^2 \Delta r. \quad (9.56)$$

Sin pérdida de generalidad, podemos elegir el mismo Δr para todo r . Buscamos ahora el extremo de la ec. (9.56), que nos va a dar el r más probable:

$$\frac{d}{dr} \left(e^{-2r/a_0} r^2 \right) = 0,$$

la cuenta es simple y obtenemos $r = a_0$. Este resultado ya lo vemos en el panel *b*) de la Fig. 9.1. De este modo, la distancia más probable para encontrar el electrón es $r = a_0$, mientras que el valor medio de la distancia al origen es $3a_0/2$. Para quienes están al tanto de temas de Estadísticas, al analizar el panel *b*) de la Fig. 9.1 y notar que la distribución de probabilidades es asimétrica, este resultado es el esperado. Pero para quienes no tengan presentes estos conceptos, analicemos un poco más el problema.

Usemos un ejemplo simple. Supongamos que tenemos 70 manzanas que pesan 200gr c/u, 10 manzanas que pesan 100gr c/u y 20 manzanas que pesan 50gr c/u. El peso más probable de una manzana es de 200gr, pero el valor medio del peso de las manzanas es de 160gr. Calculamos la probabilidad y el valor medio como sigue. Tenemos un total de 100 manzanas, luego,

$$\begin{aligned} P_1 &= 70/100 = 0,7 \rightarrow \text{para las manzanas de } w_1 = 200\text{gr,} \\ P_2 &= 10/100 = 0,1 \rightarrow \text{para las manzanas de } w_2 = 100\text{gr,} \\ P_3 &= 20/100 = 0,2 \rightarrow \text{para las manzanas de } w_3 = 50\text{gr.} \end{aligned}$$

Donde P_i indica la probabilidad y naturalmente, $P_1 + P_2 + P_3 = 1$. Como nombramos arriba, el P_i más grande es P_1 que se refiere a las manzanas de 200gr. El valor medio del peso es,

$$\langle w \rangle = P_1 w_1 + P_2 w_2 + P_3 w_3 = 160 \text{ gr.}$$

Volvemos al átomo de hidrógeno y discretizar la probabilidad en la ec. (9.56). Tomamos un conjunto discreto de valores de r : r_1, r_2, r_3 , etc. De este modo,

$$\Delta P_i = \frac{4}{a_0^3} e^{-2r_i/a_0} r_i^2 \Delta r. \quad (9.57)$$

Tomando el mismo paso para todos los r_i , el Δr no depende de i . Comparando con el ejemplo de las manzanas, el papel de P_i en las manzanas, lo juega el ΔP_i , *mientras que el papel de w_i , lo juega r_i , pues es la variable de la que deseo conocer su valor medio, es la distancia al origen*. Luego, para calcular $\langle r \rangle$, debemos hacer la suma,

$$\langle r \rangle = \Delta P_1 r_1 + \Delta P_2 r_2 + \Delta P_3 r_3 + \dots$$

Volviendo al límite continuo, esta suma se transforma en la integral dada por la ec. (9.54). De este modo, entendemos la diferencia entre el valor más probable y el valor medio. La distancia al origen más probable del electrón es la del radio de Bohr, pero su distancia media al origen es 1.5 veces más grande.

Expusimos el ejemplo de las manzanas, pues en el caso del átomo de hidrógeno, la variable r aparece en la probabilidad y eso genera dudas sobre cómo calcular el valor medio de la posición. En el ejemplo de las manzanas, la probabilidad tiene que ver en cuántas manzanas tenemos y cómo las elegimos, mientras que el valor medio se refiere al peso. Al hacer un paralelismo con el átomo de hidrógeno, comprendemos mejor qué es cada cosa. Para finalizar, repasemos este desarrollo a la luz de los Postulados de la Mecánica Cuántica: si hacemos *una única medida* de la posición del electrón, en lo formal lo podemos encontrar en cualquier lugar, sin embargo *lo más probable*, es encontrarlo en $r = a_0$. Por otra parte, *si hacemos un número muy grande de medidas de la posición del electrón para diferentes átomos de hidrógeno, pero todos en el mismo estado cuántico, el valor medio de esas medidas resultará $\langle r \rangle = 3a_0/2$* .

CAPÍTULO 10

Un número cuántico nuevo: el spin

Introducción

El spin irrumpe en la Mecánica Cuántica como consecuencia del experimento de Stern y Gerlach. No haremos una descripción detallada de este experimento, pero sí expondremos su resultado. En el experimento de Stern y Gerlach, se hace pasar un haz de átomos de plata por un campo magnético muy intenso, que además no es constante. Veremos enseguida que en esas condiciones, aparece una fuerza entre el momento magnético de la partícula y el gradiente del campo magnético. Veremos también, que el momento magnético es directamente proporcional al momento angular de la partícula. Luego, si los átomos de plata tienen un momento magnético no nulo, se desvían por la acción del campo magnético y esa desviación deberá ser proporcional al momento angular.

Ahora bien, en el Capítulo 8, vimos que en Mecánica Cuántica el módulo del momento angular está cuantificado al igual que su proyección sobre el eje z . Si el átomo en cuestión tiene un ℓ fijo, tendremos $2\ell + 1$ posibles proyecciones para el número cuántico m . Como ℓ es un entero positivo, el número de proyecciones sobre el eje z es siempre impar. Sin embargo, si el momento angular no está cuantificado, el haz de átomos de plata debería desviarse en forma continua. Mientras que si sí está cuantificado, se debería observar un número impar de desviaciones. El experimento asombró por su resultado: fueron observadas dos manchas. Un número par para el número de valores de m , implica un valor semientero para el momento angular y eso no está permitido por la unicidad de la

función de onda (ver la Sección 7.2, del Capítulo 7).

El razonamiento que siguió, marca un modo de abordar los problemas que es paradigmático de los problemas cuánticos. Este modo de abordar los problemas, tiene algo del razonamiento de Arthur Conan Doyle: “una vez descartado lo imposible, lo que queda, aunque improbable, debe ser la verdad” (El signo de los cuatro, Del Fondo Editorial, 2019, pág. 47). El resultado del experimento de Stern y Gerlach era imposible de entender a partir de los observables conocidos en ese momento. Como con ningún observable conocido se podía explicar, debía existir otra magnitud que por medio de este experimento *fue observada por primera vez*. Un nuevo observable, en el sentido cuántico. Una magnitud a la que deberemos asociar un operador hermítico, cuyo autovalor se puede medir. Notemos que las magnitudes de las que hablamos hasta ahora son: energía, momento, posición y momento angular. Cuánticamente, estas magnitudes se diferencian de sus análogos clásicos: no podemos conocer la posición y el momento al mismo tiempo, tampoco podemos conocer las tres componentes del momento angular, etc. Pero son magnitudes que ya conocíamos de la física clásica. El experimento de Stern y Gerlach abrió un universo nuevo: el de los observables puramente cuánticos. Naturalmente, quien leyó el título de este capítulo ya advirtió que la nueva magnitud es el spin.

El experimento de Stern y Gerlach fue diseñado para que las partículas se desvíen según el valor de su momento angular. Ya que las partículas efectivamente se desviaron, la nueva magnitud debe tener que ver con un momento angular. Pero no puede ser un momento angular orbital, pues si fuera ese el caso, el número de manchas en el detector debió ser impar. Ya que se vieron dos manchas, la magnitud de ese nuevo momento angular debe ser de $1/2$. El momento angular orbital es tal, pues resulta del movimiento orbital de los electrones. Tiene que ver con la cinética de los electrones. Este nuevo momento angular, debe ser intrínseco. Debe ser una propiedad que caracteriza las partículas. Naturalmente, lo que sabemos del spin no se reduce al experimento de Stern y Gerlach que tuvo lugar en 1922. Desde aquel entonces hasta hoy, existe una enorme cantidad de nuevos experimentos.

Hoy sabemos que así como cada partícula elemental está caracterizada por una masa y una carga eléctrica, debemos agregar otras magnitudes que son intrínsecas de la partícula. La primera propiedad que agregamos es el spin. En el caso del electrón, el protón y el neutrón, el valor de spin es $1/2$. Pero no es el único valor posible. Nos

concentraremos en partículas de spin $1/2$, pero existen partículas de spin $0, 1, 3/2, 2$. En lo que sigue, comenzaremos recordando algunas consideraciones de electromagnetismo. Antes de terminar esta introducción, es pertinente aclarar que la palabra inglesa *spin*, puede traducirse al castellano como *espín*. Usaremos, sin embargo, la palabra *spin*, pues es la tendencia de la literatura científica. Vale la misma consideración para *spin up* y *spin down*.

10.1. Algo de electromagnetismo

Podemos escribir al Hamiltoniano de un sistema como,

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}(r), \quad (10.1)$$

donde $\hat{\mathbf{p}} = \hbar\nabla/i$, m es la masa de la partícula y $\hat{V}(r)$ es un potencial que tomaremos como independiente del tiempo. Ahora bien, ¿cómo incluir el efecto del campo magnético, ya que el campo magnético no deriva de un potencial escalar? La respuesta nos la da el Electromagnetismo Clásico y es por medio del potencial vector para el campo magnético $\hat{\mathbf{A}}$, modificando el impulso de la siguiente manera:

$$\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}}, \quad (10.2)$$

donde e es la carga del electrón y c es la velocidad de la luz en el vacío. Para comprender esa sustitución, referimos al lector a [6]. Básicamente, se define el impulso generalizado como la derivada parcial del Lagrangiano respecto de la derivada temporal de la posición generalizada y se obtiene la ec. (10.2). Nos concentramos en un electrón, por lo cual agregamos el subíndice “ e ”, al Hamiltoniano y a la masa de la partícula,

$$\hat{\mathcal{H}}_e = \frac{1}{2m_e} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}} \right)^2 + \hat{V}(r). \quad (10.3)$$

El próximo paso es el de establecer la relación entre el potencial vector y el campo magnético \mathbf{B} , que viene dado por,

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \wedge \hat{\mathbf{r}}. \quad (10.4)$$

A partir de esta relación, se puede ver que el conmutador $[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{A}}] = 0$. De este modo, desarrollando el cuadrado en la ec. (10.3), tenemos,

$$\hat{\mathcal{H}}_e = \frac{1}{2m_e} \left(\hat{\mathbf{p}}^2 - 2 \frac{e}{c} \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{A}} + \frac{e^2}{c^2} \hat{\mathbf{A}}^2 \right) + \hat{V}(r), \quad (10.5)$$

despreciamos el último término ya que está dividido por c^2 , lo que nos hace pensar que es pequeño. Hagamos un poco de álgebra sobre el segundo término:

$$2 \frac{e}{c} \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{A}} = 2 \frac{e}{c} \hat{\mathbf{p}} \cdot \left(\frac{1}{2} \mathbf{B} \wedge \hat{\mathbf{r}} \right) = \frac{e}{c} \mathbf{B} \cdot (\hat{\mathbf{r}} \wedge \hat{\mathbf{p}}),$$

donde usamos la propiedad de rotación cíclica de producto mixto. Pero sabemos que el momento angular es $\mathbf{L} = \mathbf{r} \wedge \mathbf{p}$, con lo cual podemos escribir la ec. (10.3), como,

$$\hat{\mathcal{H}}_e = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - \frac{e}{2m_e c} \hat{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{B} + \hat{V}(r). \quad (10.6)$$

Definimos el momento magnético del electrón como,

$$\hat{\mathbf{m}} \equiv \frac{e}{2m_e c} \hat{\mathbf{L}} \quad (10.7)$$

Tenemos finalmente,

$$\hat{\mathcal{H}}_e = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - \hat{\mathbf{m}} \cdot \mathbf{B} + \hat{V}(r) \quad (10.8)$$

Es así que encontramos que un campo magnético modifica la energía de una partícula, con un término que resulta del producto escalar del campo magnético mismo, con el momento magnético de la partícula.

10.1.1. Corolarios

No siempre lo obvio resulta obvio. En esta subsección llamaremos la atención sobre algunos puntos que deberían ser obvios, pero no siempre lo son. Eventualmente, la subsección puede ser ignorada sin culpa.

Tomemos del Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_e$ (ec. 10.8), el término magnético, que denominaremos como \hat{V}_{mag} ,

$$\hat{V}_{mag} \equiv -\hat{\mathbf{m}} \cdot \mathbf{B}. \quad (10.9)$$

Trabajamos un poco sobre este término.

- Pensemos un poco en términos clásicos y volvamos al experimento de Stern y Gerlach. Sabemos que la fuerza es menos el gradiente del potencial,

$$\mathbf{F} = -\nabla V_{mag},$$

luego, como m es constante, si \mathbf{B} también lo es, entonces la fuerza es cero. Es por ello que en el experimento de Stern y Gerlach se usa un campo magnético no uniforme, pues de lo contrario las partículas no sufrirían una desviación. Recordemos que en este experimento se emplea un haz de *átomos* de plata, esto es, partículas eléctricamente neutras.

- En el punto anterior, justificamos por qué en el experimento de Stern y Gerlach era necesario tener un campo magnético no constante. ¿Es de interés, el estudiar el efecto de un campo magnético constante? Sí lo es, pues \hat{V}_{mag} va a modificar la energía de la partícula, que es un observable. Naturalmente, si se modifica la energía, también cambia la función de onda.
- A partir de este punto, consideremos un campo magnético constante, $\mathbf{B} = \text{const.}$ En este caso, tenemos la libertad para elegir a \mathbf{B} en la dirección del eje z . De este modo,

$$\hat{V}_{mag} \equiv -\hat{\mathbf{m}} \cdot \mathbf{B} = -\frac{e}{2m_e c} \hat{L}_z B. \quad (10.10)$$

Al introducir este término en el Hamiltoniano, notamos que,

$$[\hat{\mathcal{H}}_e, \hat{L}^2] = 0 \quad \text{y} \quad [\hat{\mathcal{H}}_e, \hat{L}_z] = 0, \quad (10.11)$$

esto significa que para un potencial central, podemos seguir usando lo que aprendimos de potenciales centrales. Este es un resultado importante, pues el campo magnético establece una dirección preferencial en el espacio. Esto es, el problema ya no tiene simetría esférica. Sin embargo, para un campo magnético constante, que elegimos como eje z , logramos conservar la simetría.

- Ahora bien, el potencial $\hat{V}_{mag}(\dots)$ ¿de qué depende? Recordemos la expresión de \hat{L}_z en coordenadas esféricas, dada en la ec. (8.28):

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi},$$

este operador se representa como una derivada respecto del ángulo ϕ , pero no es una *función* de ϕ , pues no obtenemos diferentes valores al cambiar el ángulo. Para escribir la dependencia, debemos pensar en una función de onda diagonal para los operadores, $\hat{\mathcal{H}}_e$, \hat{L}^2 y \hat{L}_z . En este caso, tenemos,

$$V_{mag} = V_{mag}(m, B),$$

donde $\hbar m$ es el autovalor de \hat{L}_z y B es el módulo del campo magnético. Como estamos pensando que el operador ya actuó sobre la función de onda y nos quedamos con su autovalor, en esta última expresión hemos quitado el carácter de operador.

Sobre la interacción y cómo se modifica nuestro esquema por la acción de un campo magnético, seguiremos trabajando a lo largo de este capítulo. Sin embargo, en la próxima sección nos concentramos en los aspectos formales del spin.

10.2. Spin 1/2

Introducimos un nuevo operador vectorial hermítico llamado spin, cuyo comportamiento es el de un momento angular,

$$\hat{\mathbf{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z). \quad (10.12)$$

El álgebra del spin, es el álgebra del momento angular dado por la ec. (8.10), por lo tanto,

$$\boxed{[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{S}_k} \quad (10.13)$$

Donde ε_{ijk} es el tensor completamente antisimétrico de Levi-Civita, definido en el Capítulo 8 y los valores para $i, j, k=x, y, z$. Los autovectores o kets para los operadores de spin, se definen como $|s, s_z\rangle$, cumpliendo con,

$$\hat{S}^2 |s, s_z\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s, s_z\rangle, \quad (10.14)$$

$$\hat{S}_z |s, s_z\rangle = \hbar s_z |s, s_z\rangle, \quad (10.15)$$

donde naturalmente, $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$. En lo que sigue, trabajaremos solamente con partículas de spin 1/2. Eso quiere decir que en el ket $|s, s_z\rangle$, $s = 1/2$. Ya que solo puede

tomar ese valor, el mantener su escritura en el ket, es en cierta forma una escritura superflua. Por conveniencia, a veces lo escribiremos y otras no¹³.

El valor $s = 1/2$ es un valor intrínseco de la partícula, como ya habíamos dicho. Su proyección, sin embargo, puede tomar dos valores: $s_z = \pm 1/2$, para fijar ideas:

$$\hat{S}_z \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \quad (10.16)$$

$$\hat{S}_z \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = -\hbar \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle. \quad (10.17)$$

Bueno, son muchos $1/2$. Ya que $s = 1/2$ para las partículas que estudiamos (electrones, protones y neutrones), podemos eliminar esa cantidad:

$$|s, s_z\rangle \rightarrow |s_z\rangle.$$

Cuando $s_z = +1/2$, decimos que el spin está *up*, y cuando $s_z = -1/2$, decimos que el spin está *down*. Existen maneras alternativas para escribir el spin up y down. Es conveniente familiarizarse con todas ellas:

$$|s_z = +1/2\rangle = \left| \frac{1}{2} \right\rangle, \quad \text{ó } |u\rangle, \quad \text{ó } |\uparrow\rangle, \quad \text{ó } |+\rangle. \quad (10.18)$$

$$|s_z = -1/2\rangle = \left| -\frac{1}{2} \right\rangle, \quad \text{ó } |d\rangle, \quad \text{ó } |\downarrow\rangle, \quad \text{ó } |-\rangle. \quad (10.19)$$

Para ser claros, podemos reescribir las ecs. (10.16) y (10.17), como,

$$\hat{S}_z |u\rangle = \hbar \frac{1}{2} |u\rangle, \quad (10.20)$$

$$\hat{S}_z |d\rangle = -\hbar \frac{1}{2} |d\rangle. \quad (10.21)$$

Las funciones de onda de spin, forman un subespacio de dimensión dos, del espacio de Hilbert. A estas funciones de onda particulares, que se refieren al spin, las denominaremos *spinors*. Esto nos permite establecer una notación explícita de los kets y bras, usando pares ordenados de dos componentes. Para los kets,

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |d\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (10.22)$$

¹³Desafortunadamente, tenemos una mala noticia: se emplean diferentes notaciones para el spin y su proyección en el eje z . Claro, podríamos adoptar una e ignorar al resto. Pero eso estaría bien para este escrito y fallaría en preparar al lector en la diversidad de notaciones que describen lo mismo.

Mientras que para los bra, tenemos,

$$\langle u| = (1, 0), \quad \langle d| = (0, 1). \quad (10.23)$$

Notamos que,

$$\langle u|u\rangle = (1, 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1.$$

Análogamente se puede comprobar que $\langle d|d\rangle = 1$, $\langle d|u\rangle = 0$ y $\langle u|d\rangle = 0$.

Es interesante que podemos construir una expresión matricial para los operadores en el subespacio de spin. En particular, para \hat{S}^2 y para \hat{S}_z . Para ello, construimos una matriz haciendo el sandwich de los bra y kets, de la siguiente manera:

$$\begin{array}{l} \langle u| \rightarrow \underbrace{\langle u|\hat{S}^2|u\rangle}_{|u\rangle} \quad \underbrace{\langle u|\hat{S}^2|d\rangle}_{|d\rangle} \\ \langle d| \rightarrow \langle d|\hat{S}^2|u\rangle \quad \langle d|\hat{S}^2|d\rangle \end{array}$$

Lo que estamos haciendo acá, es colocar los kets en la línea horizontal y los bras en la vertical y así construir la matriz:

$$\hat{S}^2 = \begin{pmatrix} \langle u|\hat{S}^2|u\rangle & \langle u|\hat{S}^2|d\rangle \\ \langle d|\hat{S}^2|u\rangle & \langle d|\hat{S}^2|d\rangle \end{pmatrix}. \quad (10.24)$$

Usamos ahora la ec. (10.14),

$$\hat{S}^2|u\rangle = \frac{3\hbar^2}{4}|u\rangle, \quad (10.25)$$

$$\hat{S}^2|d\rangle = \frac{3\hbar^2}{4}|d\rangle. \quad (10.26)$$

Reemplazando estos valores en la ec. (10.24), junto a la ortonormalidad de los spinores, el operador \hat{S}^2 lo podemos representar como,

$$\hat{S}^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (10.27)$$

Repetimos ahora los mismos pasos para \hat{S}_z , empleando,

$$\hat{S}_z|u\rangle = \frac{\hbar}{2}|u\rangle, \quad (10.28)$$

$$\hat{S}_z|d\rangle = -\frac{\hbar}{2}|d\rangle. \quad (10.29)$$

Obtenemos,

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (10.30)$$

Solo como ejemplo, calculamos,

$$\hat{S}_z |d\rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} |d\rangle. \quad (10.31)$$

Vemos entonces que podemos llevar adelante el álgebra de spin por medio de matrices de 2×2 para los operadores y pares ordenados para los spinores.

10.2.1. Matrices de Pauli

Al comenzar este tema dijimos que el operador vectorial de Spin, \hat{S} , cumple con el álgebra del momento angular. Luego, podemos introducir los operadores escalón de spin del mismo modo que lo hicimos para el momento angular orbital (ver ec. 8.14),

$$\hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y. \quad (10.32)$$

La acción de los operadores escalón sobre los spinores es interesante, pues solo tenemos dos spinores y \hat{S}_{\pm} cambia uno, en el otro (ver ecs. 8.27):

$$\hat{S}_- |u\rangle = \hbar |d\rangle, \quad (10.33)$$

$$\hat{S}_+ |d\rangle = \hbar |u\rangle. \quad (10.34)$$

(Nota: de las ecs. (8.27), resulta que el factor multiplicativo es simplemente \hbar). Hagamos una lista de todos los posibles elementos de matriz para \hat{S}_{\pm} :

$$\begin{aligned} \langle u | \hat{S}_- | u \rangle &= 0, \\ \langle u | \hat{S}_- | d \rangle &= 0, \\ \langle d | \hat{S}_- | u \rangle &= \hbar, \\ \langle d | \hat{S}_- | d \rangle &= 0, \\ \langle u | \hat{S}_+ | u \rangle &= 0, \\ \langle u | \hat{S}_+ | d \rangle &= \hbar, \\ \langle d | \hat{S}_+ | u \rangle &= 0, \\ \langle d | \hat{S}_+ | d \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (10.35)$$

Recordamos al ver estas expresiones que los operadores escalón no son hermíticos. De las ecs. (10.32), escribimos ahora \hat{S}_x y \hat{S}_y :

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-), \quad (10.36)$$

$$\hat{S}_y = \frac{1}{2i}(\hat{S}_+ - \hat{S}_-). \quad (10.37)$$

Empleando las ecs. (10.35) y siguiendo el mismo procedimiento que empleamos para encontrar las matrices que representan \hat{S}^2 y \hat{S}_z , tenemos,

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (10.38)$$

Definimos ahora las matrices de Pauli como,

$$\boxed{\hat{S} \equiv \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}} \quad (10.39)$$

Naturalmente,

$$\hat{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z),$$

con,

$$\boxed{\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}} \quad (10.40)$$

Estas son las expresiones explícitas de las matrices de Pauli. Las matrices de Pauli son expresiones muy útiles para representar operadores que dependen del spin, debido a sus propiedades. Algunas de esas propiedades las discutiremos en la siguiente subsección. Por otra parte, no debemos perder de vista que estas matrices sólo son válidas para partículas de spin 1/2.

10.2.2. Propiedades de las matrices de Pauli

Las ecs. (10.40), nos dan las expresiones explícitas de las matrices de Pauli. Existe un conjunto de propiedades que cumplen estas matrices que son fácilmente verificables haciendo un cálculo directo. Esto es, tomando las expresiones dadas en estas ecuaciones,

haciendo la cuenta y comprobando entonces que la propiedad es correcta. En primer lugar, consideramos el conmutador de las matrices:

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i\varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k. \quad (10.41)$$

(Recordemos que ε_{ijk} es el tensor completamente antisimétrico de Levi-Civita). Por otra parte,

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j &= i\varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k & i \neq j, \\ \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j + \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, & i \neq j. \end{aligned} \quad (10.42)$$

Para el caso $i = j$, tenemos

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \hat{\mathcal{I}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (10.43)$$

Estas propiedades se pueden resumir como,

$$\boxed{\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = \delta_{i,j} + i\varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k} \quad (10.44)$$

Otra propiedad útil es la de la traza de las matrices de Pauli,

$$\text{tr}(\hat{\sigma}_i) = 0 \quad \forall i. \quad (10.45)$$

Recordemos que se define el anticonmutador de dos operadores \hat{A} y \hat{B} , como,

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}.$$

El anticonmutador para las matrices de Pauli, resulta,

$$\{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} = 2\delta_{i,j}. \quad (10.46)$$

Finalmente, de estas propiedades tenemos,

$$\hat{S}^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2) = \frac{3\hbar^2}{4} \hat{\mathcal{I}},$$

que es otro camino para obtener el resultado dado por la ec. (10.27).

10.3. Función de onda con spin

Hasta ahora vimos que las partículas tienen un número cuántico nuevo, llamado spin. Nos concentramos en partículas con spin $1/2$ y en ese caso designamos los posibles estados de spin como $|u\rangle$ y $|d\rangle$. Estos dos kets, forman un subespacio del espacio de Hilbert. Un vector arbitrario de ese subespacio se puede escribir como una combinación lineal de estos elementos,

$$|\chi\rangle = c_u|u\rangle + c_d|d\rangle = \begin{pmatrix} c_u \\ c_d \end{pmatrix}. \quad (10.47)$$

Los coeficientes c_u y c_d , deben cumplir: $|c_u|^2 + |c_d|^2 = 1$, esto es,

$$\langle\chi|\chi\rangle = (c_u^*, c_d^*) \begin{pmatrix} c_u \\ c_d \end{pmatrix} = 1.$$

La función de onda total es el producto directo entre la parte orbital $|\varphi\rangle$ (este estado resulta de resolver la ecuación de Schrödinger) y la parte de spin:

$$|\psi\rangle \equiv |\varphi\rangle \otimes |\chi\rangle. \quad (10.48)$$

Antes de seguir, debemos advertir que la ecuación de Schrödinger es solo válida para partículas sin spin. En el caso de partículas con spin $1/2$ debemos usar otra ecuación, que se denomina ecuación de Pauli. En el caso particular de ausencia de campo magnético o la de un campo magnético constante en la dirección del eje z , el producto directo que mostramos en la ec. (10.48), con $|\varphi\rangle$ obtenida como solución de la ecuación de Schrödinger, es la solución correcta. En forma más explícita, podemos escribir,

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_u|\varphi\rangle \\ c_d|\varphi\rangle \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} |\varphi_u\rangle \\ |\varphi_d\rangle \end{pmatrix}. \quad (10.49)$$

Finalmente, debemos escribir la función de onda total considerando al spin de la partícula. Digamos que hasta ahora designamos la función de onda como: $|\ell, m\rangle$, sumamos ahora al spin,

$$|\ell, m\rangle \rightarrow |\ell, m, s, s_z\rangle. \quad (10.50)$$

Sabemos que $s = 1/2$, por lo cual su inclusión es superflua, pero lo escribimos por completitud.

10.4. Interacción de una partícula con spin con el campo magnético externo

Naturalmente, cuando tenemos una partícula cargada en movimiento, ésta interactúa con el campo magnético a través de la fuerza de Lorentz. Vimos al comienzo que cuando tenemos un momento angular no nulo, aparece una interacción entre el momento magnético orbital de la partícula (que es directamente proporcional al momento angular) y el campo magnético externo. El spin es un momento angular y ocurre algo similar. La deducción que hicimos al comienzo de este capítulo sin embargo, solo es válida para la parte orbital. La parte de spin es más compleja y deberemos aceptarla sin demostración. Básicamente, para definir el momento magnético de spin introducimos un factor constante, denominado *factor giromagnético*, que toma diferentes valores para cada partícula. De este modo, el momento magnético de spin viene dado por,

$$\hat{\mathbf{m}}_s \equiv g_i \frac{e}{2m_i c} \hat{\mathbf{S}}, \quad (10.51)$$

donde g_i toma diferentes valores según la partícula. Para el electrón, tenemos $g_e \cong 2$; para el protón, $g_p \cong 5,585$ y para el neutrón, $g_n \cong -3,826$. Debe notarse que en la expresión del momento magnético la masa es diferente para cada partícula. podemos escribir ahora al Hamiltoniano para el electrón como,

$$\hat{\mathcal{H}}_e = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - \hat{\mathbf{m}} \cdot \mathbf{B} - \hat{\mathbf{m}}_s \cdot \mathbf{B} + \hat{V}(r). \quad (10.52)$$

Ya que el factor giromagnético del electrón vale dos, podemos reescribir esta expresión como,

$$\hat{\mathcal{H}}_e = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - \frac{e}{2m_e c} (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \cdot \mathbf{B} + \hat{V}(r). \quad (10.53)$$

Debemos recordar que este campo magnético, es un campo magnético externo a nuestro sistema. Si nuestro sistema es un átomo de hidrógeno, el movimiento del electrón genera un campo magnético. El análisis de este punto es uno de los temas centrales del próximo capítulo.

CAPÍTULO 11

Suma de momentos angulares

Al momento angular le corresponde un operador vectorial hermítico. Para una partícula, vimos que existen dos momentos angulares asociados: el momento angular orbital y el de spin, o momento angular intrínseco. Por otra parte, nada impide que tengamos un sistema físico formado por dos o más partículas, cada una con momentos angulares. Siempre podremos sumar los momentos angulares. En lo que sigue, veremos dos ejemplos de ello. En primer lugar, sumaremos el momento angular y el de spin de una partícula y en segundo lugar, sumaremos el spin de dos partículas.

11.1. El momento angular total

Hasta ahora, trabajamos con dos cantidades que son momentos angulares: $\hat{\mathbf{L}}$ y $\hat{\mathbf{S}}$. A $\hat{\mathbf{L}}$ lo llamamos momento angular orbital. Este momento angular depende de la cinemática de la partícula (en nuestro caso del electrón) y puede tomar diferentes valores, incluido el cero. El otro momento angular es el spin $\hat{\mathbf{S}}$ ó momento angular intrínseco. Este otro momento angular está asociado a una propiedad que caracteriza a cada partícula. Podemos sumar a estos dos momentos angulares, para construir un momento angular total, que llamaremos $\hat{\mathbf{J}}$. De esta manera, definimos,

$$\hat{\mathbf{J}} \equiv \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}. \quad (11.1)$$

El momento angular total es un operador vectorial, cuyas componentes cartesianas son,

$$\hat{\mathbf{J}} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z) = (\hat{L}_x + \hat{S}_x, \hat{L}_y + \hat{S}_y, \hat{L}_z + \hat{S}_z).$$

El momento angular total depende entonces de la cinemática de la partícula y de una de sus propiedades intrínsecas. Ya que es en sí mismo un momento angular, cumple con el álgebra de los momentos angulares,

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k. \quad (11.2)$$

Se puede demostrar que,

$$[\hat{J}^2, \hat{L}^2] = [\hat{J}^2, \hat{S}^2] = 0, \quad (11.3)$$

junto con,

$$[\hat{J}_z, \hat{J}^2] = [\hat{J}_z, \hat{L}^2] = [\hat{J}_z, \hat{S}^2] = 0. \quad (11.4)$$

Sin embargo,

$$[\hat{L}_z, \hat{J}^2] \neq 0 \quad \text{y} \quad [\hat{S}_z, \hat{J}^2] \neq 0. \quad (11.5)$$

Quisimos resaltar que estos dos conmutadores son diferentes de cero. Su valor explícito es,

$$[\hat{L}_z, \hat{J}^2] = i2\hbar(\hat{S}_x\hat{L}_y - \hat{S}_y\hat{L}_x) \quad \text{y} \quad [\hat{S}_z, \hat{J}^2] = -i2\hbar(\hat{S}_x\hat{L}_y - \hat{S}_y\hat{L}_x). \quad (11.6)$$

Naturalmente,

$$[\hat{L}_z, \hat{J}^2] = -[\hat{S}_z, \hat{J}^2], \quad (11.7)$$

ya que $[\hat{J}_z, \hat{J}^2] = 0$ y $\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$.

Nuevamente, como se trata de un momento angular, podemos definir dos números cuánticos, j y j_z , tales que,

$$\hat{J}^2|j, j_z\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j, j_z\rangle, \quad (11.8)$$

$$\hat{J}_z|j, j_z\rangle = \hbar j_z|j, j_z\rangle. \quad (11.9)$$

Recordemos que los valores posibles del número cuántico correspondiente al momento angular orbital son $\ell = 0, 1, 2, \dots$, mientras que para el spin solo tenemos, $s = 1/2$. Como $\hat{\mathbf{J}}$ es la suma vectorial de $\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$, los valores posibles de $j = \ell \pm s$ si $\ell \neq 0$ y $j = 1/2$ si $\ell = 0$. Tenemos entonces que j y j_z son semi-enteros,

$$j = |\ell - s| \quad \text{y} \quad \ell + s,$$

$$j_z = -j, -j+1, \dots, -1/2, 1/2, \dots, j-1, j.$$

Para evitar confusiones, dado un ℓ y asumiendo que $s = 1/2$, j puede tomar *solo dos valores*: $|\ell - s|$ y $\ell + s$. Por ejemplo, si $\ell = 5$, entonces $j = 9/2$ ó $j = 11/2$; pero si $\ell = 0$, solo puede valer $j = 1/2$.

Por simplicidad, hemos escrito la función de onda de los operadores \hat{J}^2 y \hat{J}_z , como $|j, j_z\rangle$. Sin embargo, el estado con todos los números cuánticos es,

$$|j, j_z\rangle \rightarrow |\ell, s, j, j_z\rangle.$$

Recordemos que en la ec. (10.50), mostramos la función de onda $|\ell, m, s, s_z\rangle$, que representa al mismo espacio de Hilbert que $|\ell, s, j, j_z\rangle$, pero en una base diferente. La base que conocemos bien es $|\ell, m, s, s_z\rangle$; luego, debemos ver cómo escribir los vectores $|\ell, s, j, j_z\rangle$ como una combinación lineal de los vectores $|\ell, m, s, s_z\rangle$. Para ello, se escribe la identidad como,

$$\hat{I} = \sum_{\ell', m, s', s_z} |\ell', m, s', s_z\rangle \langle \ell', m, s', s_z|, \quad (11.10)$$

evaluamos ahora, $|\ell, s, j, j_z\rangle = \hat{I} |\ell, s, j, j_z\rangle$ y obtenemos,

$$|\ell, s, j, j_z\rangle = \sum_{\ell', m, s', s_z} |\ell', m, s', s_z\rangle \langle \ell', m, s', s_z | \ell, s, j, j_z\rangle \delta_{\ell', \ell} \delta_{s', s}, \quad (11.11)$$

(notar que s y s' solo pueden valer $1/2$ por lo cual su inclusión en la suma y la delta de Kroenecker son redundantes). Finalmente tenemos,

$$|\ell, s, j, j_z\rangle = \sum_{m, s_z} \langle \ell, m, s, s_z | \ell, s, j, j_z\rangle |\ell, m, s, s_z\rangle. \quad (11.12)$$

Esta expresión nos permite hacer el cambio de base. Los coeficientes $\langle \ell, m, s, s_z | \ell, s, j, j_z\rangle$, se denominan coeficientes de Clebsch–Gordan y sus valores se encuentran en tablas o en Internet.

11.2. Spin total para dos partículas

Consideremos dos partículas de spin $1/2$. Pueden ser un protón y un electrón, como en el átomo de hidrógeno ó los dos electrones del átomo de helio, ó algún otro sistema. A cada partícula le corresponde un operador de spin \hat{S}_1 y \hat{S}_2 , para la partícula 1 y 2,

respectivamente. También escribimos un spinor para cada partícula como χ_1 y χ_2 . Al spinor de las dos partículas lo podemos escribir como,

$$\chi_1 \otimes \chi_2 = |s_1, s_{z,1}\rangle \otimes |s_2, s_{z,2}\rangle \equiv |s_{z,1}, s_{z,2}\rangle, \quad (11.13)$$

donde eliminamos s_1 y s_2 , pues valen siempre $1/2$. Podemos definir un spinor para el sistema de dos partículas χ_{12} , como una matriz columna de cuatro elementos. Solo como ejemplo, mostramos,

$$\chi_{12} = |-1/2, 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (11.14)$$

Naturalmente la notación χ_{12} es insuficiente, pero $|s_{z,1}, s_{z,2}\rangle$, no lo es. Este estado representa un subespacio del espacio de Hilbert y consta de cuatro estados. Estos estados son:

$$\begin{aligned} &|1/2, 1/2\rangle, \\ &|1/2, -1/2\rangle, \\ &|-1/2, 1/2\rangle \quad \text{y} \\ &|-1/2, -1/2\rangle. \end{aligned} \quad (11.15)$$

Del mismo modo en que construimos el momento angular total $\hat{\mathbf{J}}$, como la suma vectorial del operador momento angular orbital $\hat{\mathbf{L}}$ y momento angular intrínseco o de spin, $\hat{\mathbf{S}}$; también podemos construir un operador de spin total, como la suma de $\hat{\mathbf{S}}_1$ más $\hat{\mathbf{S}}_2$:

$$\boxed{\hat{\mathbf{S}}_{tot} \equiv \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2} \quad (11.16)$$

El operador $\hat{\mathbf{S}}_{tot}$, es un momento angular y valen todas las propiedades que se desarrollan en la Sección 11.1, cuando reemplazamos: $\hat{\mathbf{J}} \rightarrow \hat{\mathbf{S}}_{tot}$, $\hat{\mathbf{L}} \rightarrow \hat{\mathbf{S}}_1$ y $\hat{\mathbf{S}} \rightarrow \hat{\mathbf{S}}_2$. Ya que $s_1 = s_2 = 1/2$, entonces $s_{tot} = 0, 1$. Construimos ahora los estados que son autovectores de \hat{S}_1^2 , \hat{S}_2^2 , \hat{S}_{tot}^2 y \hat{S}_z , como $|s_1, s_2, s, s_z\rangle$. Como s_1 y $s_2 = 1/2$, están fijo, podemos simplificar la notación como,

$$|s_1, s_2, s, s_z\rangle \rightarrow |s, s_z\rangle.$$

Naturalmente, tenemos,

$$\hat{S}_{tot}^2 |s, s_z\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s, s_z\rangle, \quad (11.17)$$

$$\hat{S}_z |s, s_z\rangle = \hbar s_z |s, s_z\rangle. \quad (11.18)$$

El subespacio del espacio de Hilbert que determinan los estados $|s, s_z\rangle$ es el mismo que el dado por los estados en (11.15), pero la base es diferente. La nueva base está dada por,

$$\begin{aligned} &|1, 1\rangle, \\ &|1, 0\rangle, \\ &|1, -1\rangle \text{ y} \\ &|0, 0\rangle. \end{aligned} \quad (11.19)$$

Ya que las bases dadas por las tablas (11.15) y (11.19), representan al mismo subespacio, debemos mostrar cómo pasar de una base a la otra. Eso lo podemos hacer empleando la expresión dada en la ec. (11.12) y buscando los valores para los coeficientes de Clebsch-Gordan. En lugar de esto, mostraremos un método ingenioso para vincular ambas bases.

Como vale la igualdad vectorial $\hat{S}_{tot} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$, en particular vale que $\hat{S}_{z,tot} = \hat{S}_{z,1} + \hat{S}_{z,2}$. Esto significa que $s_z = s_{z,1} + s_{z,2}$. Ahora bien, por inspección de los estados en las tablas (11.15) y (11.19), vemos que si $s_z = 1$, existe un único estado que cumple con que $s_{z,1} + s_{z,2} = 1$. Lo mismo ocurre con $s_z = -1$. De este modo, tenemos,

$$|1, 1\rangle = |1/2, 1/2\rangle, \quad (11.20)$$

$$|1, -1\rangle = |-1/2, -1/2\rangle. \quad (11.21)$$

Por otra parte, el estado $|1, 0\rangle$ lo podemos construir a partir de la ec. (11.20), actuando sobre este estado con el operador escalón $\hat{S}_{-,tot} = \hat{S}_{-,1} + \hat{S}_{-,2}$, calculamos,

$$\hat{S}_{-,tot}|1, 1\rangle = \hat{S}_{-,1}|1/2, 1/2\rangle + \hat{S}_{-,2}|1/2, 1/2\rangle,$$

obtenemos como resultado,

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|-1/2, 1/2\rangle + |1/2, -1/2\rangle). \quad (11.22)$$

Nos resta vincular un solo estado, que es $|0, 0\rangle$. Para ello notamos que tiene el mismo valor de s_z que $|1, 0\rangle$. Luego, lo construimos pidiendo que sea ortogonal a $|1, 0\rangle$. Resumimos

los resultados en una única tabla:

$$\begin{aligned}
 |1, 1\rangle &= |1/2, 1/2\rangle, \\
 |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1/2, -1/2\rangle + |-1/2, 1/2\rangle), \\
 |1, -1\rangle &= |-1/2, -1/2\rangle, \\
 |0, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1/2, -1/2\rangle - |-1/2, 1/2\rangle). \tag{11.23}
 \end{aligned}$$

A partir de estas relaciones, es inmediato invertirlas para expresar la primera base en función de la segunda.

11.3. Conjunto completo de operadores que conmutan

En la Sección 11.1, consideramos dos bases diferentes para el mismo espacio de Hilbert. Estas bases resultan de todos los valores posibles de los estados cuánticos $|\ell, m, s, s_z\rangle$, para una de las bases y $|\ell, s, j, j_z\rangle$, para la otra. Escribamos los operadores hermíticos cuyos números cuánticos son los de estos estados:

$$\begin{aligned}
 |n, \ell, m, s, s_z\rangle &\rightarrow \hat{\mathcal{H}}, \hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z, \\
 |n, \ell, s, j, j_z\rangle &\rightarrow \hat{\mathcal{H}}, \hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z,
 \end{aligned}$$

donde por completitud hemos agregado al estado cuántico el número cuántico n , asociado con la energía. En la sección anterior omitimos esta cantidad, pues para esa discusión esta cantidad era superflua.

Ahora bien, tenemos en cada caso cinco operadores y a cada operador le corresponde un número cuántico. Cada operador hermítico representa un observable y de acuerdo a nuestro interés, elegimos los observables. Por ejemplo, dado los operadores: $\hat{\mathcal{H}}, \hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2$ y \hat{S}_z , llamamos como el *conjunto de buenos números cuánticos* al conjunto n, ℓ, m, s y s_z asociados a los autovalores de estos operadores. De este modo, cuando elijimos un conjunto particular de operadores, existe un conjunto de magnitudes físicas que podemos conocer con absoluta precisión.

Es importante notar que dado un sistema físico, este conjunto de operadores no es único. En nuestro ejemplo, podemos elegir también los operadores $\hat{\mathcal{H}}$, \hat{L}^2 , \hat{S}^2 , \hat{J}^2 y \hat{J}_z . Si elegimos a estos operadores, ahora el conjunto de buenos números cuánticos es n , ℓ , s , j y j_z . Si *mido* \hat{J}^2 y \hat{J}_z , no podemos medir simultáneamente \hat{L}_z y \hat{S}_z .

Dado un problema físico, existe un conjunto máximo de operadores, cuyos observables podemos medir en forma simultánea. Este conjunto se denomina el *conjunto completo de operadores que conmutan*. Como vimos, este conjunto no es único. Pero el número de operadores que integran el conjunto completo de operadores que conmutan es uno solo. En nuestro ejemplo tenemos cinco operadores.

En lo que sigue, mostraremos cómo la interacción de una partícula con spin con el campo magnético, corrige los resultados del átomo de hidrógeno.

CAPÍTULO 12

El átomo de hidrógeno más allá del potencial Coulombiano

Introducción

Intentamos describir al mundo físico por medio de modelos. A veces, los modelos son tan exitosos que olvidamos que son modelos. Cuando estudiamos al átomo de hidrógeno en el capítulo 9, escribimos la ecuación de Schrödinger, propusimos al potencial Coulombiano como la interacción entre el electrón y el protón, y resolvimos ese problema. El resultado fue comparado con la fenomenología de los espectros del hidrógeno y se obtuvo un acuerdo excelente. Enseguida, revisaremos las hipótesis que hicimos para llegar a esos resultados. Antes, vale la pena señalar que exponemos el tema en el orden inverso al que fue abordado históricamente. En primer lugar, se observaron los espectros y la fenomenología del átomo de hidrógeno. A partir de toda esa información, se propusieron modelos. Entre los modelos, no podemos dejar de mencionar al modelo del átomo de Bohr. Cuando un modelo, como lo es la Mecánica Cuántica, no solamente es exitoso para describir la fenomenología conocida hasta el momento, sino que hace predicciones sobre cantidades aún no observadas que se verifican más tarde, entonces es cuando comenzamos a olvidar que se trata de un modelo para tratar de describir la realidad.

Recordemos las hipótesis principales del capítulo 9, y agreguemos algunas más. En primer lugar, pensamos que los efectos relativistas no son importantes. Es por ello que empleamos la ecuación de Schrödinger, que no tiene en cuenta la relatividad. En segundo

lugar, sabemos que tenemos un protón y un electrón y pensamos que el electrón se está moviendo. Aún así, limitamos la interacción entre estas partículas a la interacción Coulombiana, que es la interacción entre dos cargas en reposo. Cuando las cargas se mueven, generan un campo magnético y las cosas son más complicadas. Las cargas se mueven, ignoramos al campo magnético y aún así, el resultado que obtenemos es muy bueno. Eso nos dice que los efectos del campo magnético, si existen, deben ser pequeños. En tercer lugar, ya vimos que tanto el protón, como el electrón, son partículas con spin $1/2$. De hecho, la ecuación de Schrödinger vale para partículas sin spin. Nuevamente, el modo en que el spin afecta a los resultados, si existe, debe ser pequeño.

En este capítulo estudiaremos el efecto que tiene el campo magnético que genera el mismo átomo, sobre los niveles de energía que estudiamos en el capítulo 9 y veremos también cómo se vincula este problema con el spin de las partículas. Sobre la base de lo expuesto en el párrafo de arriba, estudiaremos este problema usando la teoría de perturbaciones que vimos en el capítulo 6. Además, aprovechando lo que nos enseña este problema, veremos cómo se comporta el átomo de hidrógeno cuando está inmerso en un campo magnético o eléctrico *externo* al átomo. En este caso, debemos tener cuidado en verificar que la teoría de perturbaciones es aplicable. Esto, naturalmente, va a depender de la intensidad de los campos en cuestión. Todos estos aspectos son discutidos en forma muy elegante en [7].

Antes de comenzar con el estudio de este problema, vale la pena señalar algo que hemos considerado como obvio, pero que no lo es. Las partículas (el protón y el electrón), son descritas por medio de la Mecánica Cuántica y las representamos por medio de estados cuánticos, que son vectores del espacio de Hilbert del problema. Tomamos los campos eléctrico y magnético del electromagnetismo *clásico*. Lo cierto es que los campos electromagnéticos también deben ser cuantificados. Pero este punto queda para más adelante.

12.1. Interacción fina: el acoplamiento $L \cdot S$

En el capítulo anterior, en la Sección 10.4, vimos cómo es la interacción de una partícula con spin con un campo magnético externo. Ahora bien, cuando el electrón se

mueve en el átomo de hidrógeno, genera un campo magnético. Este campo magnético interactúa con el mismo electrón, modificando su estado cuántico. Comprendemos que el hecho de que el campo magnético que genera un electrón, modifique al electrón mismo, suena raro, pues parecería violar la Tercera Ley de Newton. Sin embargo, estas aparentes contradicciones las encontramos con los campos magnéticos todo el tiempo. Una respuesta completa del problema requiere de la ecuación de Dirac, esto es, de la Mecánica Cuántica Relativista, lo cual excede el objetivo de este escrito. Sin embargo, vale la pena recordar que algo similar se vio al estudiar la autoinductancia en el curso de Electricidad y Magnetismo.

Sobre la deducción del potencial de interacción del campo magnético atómico con el electrón, remitimos al lector interesado a [3]. Para encontrar dicho potencial, se comienza con el cálculo del campo magnético desde el sistema de referencia no inercial del electrón, pensando que el electrón realiza una órbita circular o dicho de otro modo, el cálculo no es cuántico, sino clásico. Luego, se debe hacer una transformación para traducir ese resultado a un sistema de referencia inercial. Desafortunadamente, todo esto es insuficiente y hay que sumar correcciones relativistas, incluido un factor que viene de la ecuación de Dirac. Notemos que la ecuación de Dirac, significa mecánica cuántica relativista, como ya advertimos. Con estas palabras, solo queremos expresar que daremos el resultado sin su demostración, pues tal demostración o bien se vería muy forzada o bien requeriría de varios capítulos de análisis.

Antes de escribir la interacción que representa al acoplamiento $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ (también es llamada interacción spin órbita), hagamos una consideración de carácter conceptual. Cuanto más "gira" el electrón, mayor deberá ser su campo magnético. Luego, suena razonable que el campo magnético que genera un electrón sea proporcional al momento angular $\hat{\mathbf{L}}$. Ahora sí, demos el potencial,

$$V_{LS}(r) = \left(\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{m_e c^2 r^3} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \quad (12.1)$$

Puede sonar algo tardío, pero debemos pensar en para qué queremos emplear a este potencial. Recordemos que estamos trabajando con el átomo de hidrógeno y queremos ver cómo se modifican sus niveles de energía por la acción del campo magnético intrínseco del átomo. Ya discutimos que tal corrección debe ser pequeña en comparación con la

separación de los niveles de energía más bajas del átomo de hidrógeno. Luego, podemos emplear teoría de perturbaciones. Ahora no podemos dejar de lado el spin, pues el campo magnético intrínseco (que es proporcional al momento angular), se acopla con el momento magnético intrínseco, esto es, el spin.

Teniendo en cuenta que debemos considerar el spin, hay que tener presente que *todos* los niveles de energía del átomo de hidrógeno están degenerados. Luego, en principio se debería usar teoría de perturbaciones para estados degenerados, *a menos* que conozcamos alguna base en la que el potencial $V_{LS}(r)$, dado en la ec. (12.1), sea diagonal. Por simple inspección, vemos que este potencial no es diagonal en la base $|\ell, m, s, s_z\rangle$ (ver la Sección 11.1, en el capítulo 10), pero sí lo es en la base $|\ell, s, j, j_z\rangle$:

i) base $|\ell, m, s, s_z\rangle$: $V_{LS}(r) \sim \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} = \hat{L}_x \hat{S}_x + \hat{L}_y \hat{S}_y + \hat{L}_z \hat{S}_z$, sabemos que solo el término $\hat{L}_z \hat{S}_z$ es diagonal en esta base. ii) base $|\ell, s, j, j_z\rangle$: Notamos que,

$$\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}},$$

luego,

$$V_{LS}(r) = \left(\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{2m_e c^2 r^3} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2). \quad (12.2)$$

Para un elemento de matriz genérico, tenemos,

$$\begin{aligned} \langle \ell', s', j', j'_z | (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) | \ell, s, j, j_z \rangle &= \hbar^2 [j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)] \\ &\times \delta_{\ell', \ell} \delta_{s', s} \delta_{j', j} \delta_{j'_z, j_z}. \end{aligned} \quad (12.3)$$

Pero sabemos que $s = 1/2$ y $j = \ell + 1/2$ ó $j = \ell - 1/2$ (con $\ell \neq 0$). Luego,

$$\langle \ell, s, j, j_z | (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) | \ell, s, j, j_z \rangle_{j=\ell+1/2} = \hbar^2 \ell, \quad (12.4)$$

$$\langle \ell, s, j, j_z | (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) | \ell, s, j, j_z \rangle_{j=\ell-1/2} = -\hbar^2(\ell+1). \quad (12.5)$$

Notemos que si $\ell = 0$, solo podemos emplear la expresión dada por la ec. (12.4), que nos dice que la corrección es cero. *La corrección a la energía por la interacción spin órbita es nula para $\ell = 0$.*

Sobre el elemento de matriz de $1/r^3$, no mostraremos su cálculo explícito, sino que daremos el resultado. Si $\ell \neq 0$:

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{\ell(\ell+1/2)(\ell+1)n^3 a_0^3}, \quad (12.6)$$

donde n es el número cuántico principal y a_0 es el radio de Bohr. De este modo, la corrección a la energía a primer orden en teoría de perturbaciones es,

$$\begin{aligned}\langle V_{LS}(r) \rangle |_{j=\ell+1/2} &= \left(\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{2m_e c^2} \frac{\hbar^2 \ell}{\ell(\ell+1/2)(\ell+1)n^3 a_0^3}, \\ \langle V_{LS}(r) \rangle |_{j=\ell-1/2} &= - \left(\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{2m_e c^2} \frac{\hbar^2 (\ell+1)}{\ell(\ell+1/2)(\ell+1)n^3 a_0^3}.\end{aligned}\quad (12.7)$$

De esta manera, la interacción spin órbita rompe *parcialmente* la degeneración de los niveles del átomo de hidrógeno: la energía cambia con j y ℓ , pero sigue estando degenerada con respecto a j_z .

12.2. Interacción hiperfina. La línea de 21cm del hidrógeno

Un átomo de hidrógeno consta de un protón y un electrón. Las dos partículas son de spin $1/2$ y poseen un momento magnético dipolar dado por,

$$\boldsymbol{\mu}_p = \frac{g_p e}{2m_p} \mathbf{S}_p \quad \text{y} \quad \boldsymbol{\mu}_e = -\frac{g_e e}{2m_e} \mathbf{S}_e, \quad (12.8)$$

con $g_p \cong 5,59$ y $g_e \cong 2,00$. Debemos pensar a los momentos magnéticos como imanes. Si tenemos dos imanes, uno que representa el protón y el otro el electrón, estos "imanes" interactúan entre sí. El objetivo de esta sección es ver cómo esta interacción modifica la energía del átomo de hidrógeno. Para ello, emplearemos teoría de perturbaciones. Por otra parte, del electromagnetismo sabemos que un dipolo magnético $\boldsymbol{\mu}$, genera un campo magnético \mathbf{B} , dado por,

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} [3(\boldsymbol{\mu} \cdot \hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{r}} - \boldsymbol{\mu}] + \frac{2\mu_0}{3} \boldsymbol{\mu} \delta^3(\mathbf{r}), \quad (12.9)$$

donde \mathbf{r} es el vector posición del electrón respecto del protón. Tomamos el momento dipolar magnético de una de las partículas, calculamos su campo magnético y acoplamos dicho campo con el momento dipolar de la otra partícula. Una pregunta válida es si es indistinto para ello tomar el protón o el electrón. La respuesta es que no lo es. Debemos tomar el campo generado por el protón, y ver cómo afecta al electrón. Esto se debe a que

vamos a estudiar cómo se modifican las energías del electrón. Enseguida se aclara mejor este punto. Ahora bien, debido a que en la expresión del momento magnético dipolar del protón, vemos a la masa del protón en el denominador, sabemos que el efecto que tendrá la interacción entre el momento magnético del protón y el electrón, debe ser pequeño. En la sección anterior estudiamos el acoplamiento spin órbita y vimos que resultaba del campo magnético que genera el electrón mismo al moverse en el átomo. Vimos además, que para el caso del momento angular orbital nulo, no hay interacción spin órbita. Debido a esto, nos concentramos en el estado fundamental del átomo de hidrógeno, pues solo admite $\ell = 0$.

Dejamos la demostración para el lector interesado, pero para el estado fundamental, al calcular la energía se puede ver que el primer término de la ec. (12.9), no contribuye. Luego, la interacción hiperfina resulta,

$$V_{hf}(r) = \frac{\mu_0 g_p g_e e^2}{6m_p m_e c^2} \hat{\mathbf{S}}_p \cdot \hat{\mathbf{S}}_e \delta^3(\mathbf{r}) \quad (12.10)$$

Evaluaremos ahora cómo modifica este potencial la energía del estado fundamental del hidrógeno, empleando teoría de perturbaciones. Para ello, el paso inicial es establecer cuál es la función de onda del estado fundamental. Debemos notar que hasta ahora cuando empleamos funciones de onda del átomo de hidrógeno, empleamos de hecho las funciones de onda del electrón. Pero ahora el protón juega un papel en el problema. Si regresamos al comienzo del capítulo 9 y para simplificar las ideas, pensamos que el protón es mucho más pesado que el electrón y por lo tanto asumimos que el centro de masa se encuentra en el protón, entonces podemos escribir la función de onda del sistema protón–electrón, como,

$$\Psi_{p,e}(\mathbf{R}_{CM}, \mathbf{r}) = \psi_p(\mathbf{R}_{CM}) \chi_p \psi_e(\mathbf{r}) \chi_e, \quad (12.11)$$

donde a diferencia de la función de onda del capítulo 9, hemos incluido la parte de spin del protón y del electrón, dadas por χ_p y χ_e , respectivamente. Sobre la función de onda del protón, $\psi_p(\mathbf{R}_{CM})$, no daremos una expresión explícita de la misma, pero no es necesario. Solo nos basta saber que es de cuadrado integrable¹⁴. Finalmente, para la

¹⁴Notemos que en el capítulo 9, dimos una expresión explícita de esta función, como una onda plana. Naturalmente, esta función no nos sirve aquí. Es obvio que se puede construir un paquete de ondas para resolver el problema.

función de onda del electrón, empleamos la función de onda del estado fundamental, esto es: $\psi_e(\mathbf{r}) = \psi_{100}(r, \theta, \phi)$ (recordar que empleamos la notación $\psi_{n\ell m}$). De este modo, a primer orden en teoría de perturbaciones la corrección a la energía resulta:

$$\Delta E_{hf} = \langle \Psi_{p,e} | \hat{V}_{hf} | \Psi_{p,e} \rangle. \quad (12.12)$$

Separaremos las integrales espaciales de la parte de spin. Comencemos por las integrales espaciales. Al mirar la expresión del potencial en la ec. (12.10), vemos que la única dependencia espacial es con la coordenada relativa \mathbf{r} ; esto es, no depende de \mathbf{R}_{CM} . Luego, para las integrales espaciales tenemos:

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{R}_{CM} \psi_p^\dagger(\mathbf{R}_{CM}) \psi_p(\mathbf{R}_{CM}) &= 1, \quad \text{por normalización.} \\ \int dr r^2 d\theta \sin(\theta) d\phi \psi_{100}^\dagger(r, \theta, \phi) \delta^3(\mathbf{r}) \psi_{100}(r, \theta, \phi) &= |\psi_{100}(0, 0, 0)|^2, \end{aligned} \quad (12.13)$$

donde para evaluar la segunda integral empleamos la propiedad,

$$\delta^3(\mathbf{r}) = \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \delta(r) \delta(\theta) \delta(\phi). \quad (12.14)$$

Empleando ahora la expresión explícita para la interacción (ver ec. 12.10), tenemos,

$$\Delta E_{hf} = \frac{\mu_0 g_p g_e e^2}{6m_p m_e} \langle \hat{\mathbf{S}}_p \cdot \hat{\mathbf{S}}_e \rangle |\psi_{100}(0, 0, 0)|^2, \quad (12.15)$$

donde, $|\psi_{100}(0)|^2 = 1/(\pi a_0^3)$ (ver capítulo 9). Tenemos entonces,

$$\Delta E_{hf} = \frac{\mu_0 g_p g_e e^2}{6\pi m_p m_e a_0^3} \langle \hat{\mathbf{S}}_p \cdot \hat{\mathbf{S}}_e \rangle. \quad (12.16)$$

Por medio de $\langle \hat{\mathbf{S}}_p \cdot \hat{\mathbf{S}}_e \rangle$, indicamos el sandwich de las funciones de onda de spin, con el factor dependiente del spin en la interacción. Nos concentramos ahora en esta parte, para concluir nuestro cálculo.

Para entender cómo calcular la parte de spin, en primer lugar debemos tener claro qué representamos por medio de los spinores χ_p y χ_e . Estos spinores representan un estado up o down, para cada una de las partículas: $\chi_N = |1/2, 1/2\rangle$ ó $\chi_N = |1/2, -1/2\rangle$, con $N = p, e$. Para calcular la corrección a la energía, debemos decir si tenemos un estado up o down, para el protón y para el electrón. Luego, podemos escribir,

$$\langle \hat{\mathbf{S}}_p \cdot \hat{\mathbf{S}}_e \rangle = \sum_{i=x,y,z} (\chi_p^\dagger \hat{S}_i \chi_p) (\chi_e^\dagger \hat{S}_i \chi_e). \quad (12.17)$$

Notamos que para $i = x, y$, esta interacción no es diagonal en la base elegida y dado que el estado fundamental del átomo de hidrógeno tiene una degeneración igual a cuatro, deberíamos usar teoría de perturbaciones para el caso degenerado. Sobre la degeneración, notemos que si nos limitamos al estado fundamental del electrón, la degeneración es dos. Los dos estados son: $n, \ell, m = 1, 0, 0$ spin up y $n, \ell, m = 1, 0, 0$ spin down. A estos dos estados, le debemos sumar el protón con spin up y el protón con spin down. De este modo, tenemos en total cuatro estados.

Buscamos ahora una base en que esta interacción es diagonal. Para ello, comenzamos construyendo una notación que nos ayudará a resolver el problema. Para los spinores podemos escribir,

$$\chi_p \chi_e = |s_p, s_{z,p}\rangle \otimes |s_p, s_{z,p}\rangle \equiv |s_{z,p}, s_{z,e}\rangle. \quad (12.18)$$

Empleando esta notación, los cuatro estados posibles son: $|s_{z,p}, s_{z,e}\rangle = |1/2, 1/2\rangle$, $|1/2, -1/2\rangle$, $|-1/2, 1/2\rangle$ y $|-1/2, -1/2\rangle$. Por otra parte, podemos reescribir la ec. (12.17), como,

$$\langle \hat{\mathbf{S}}_p \cdot \hat{\mathbf{S}}_e \rangle = \langle s_{z,p}, s_{z,e} | \hat{\mathbf{S}}_p \cdot \hat{\mathbf{S}}_e | s_{z,p}, s_{z,e} \rangle. \quad (12.19)$$

Para encontrar una base construimos en primer lugar el operador de spin total, dado por,

$$\hat{\mathbf{S}}_{tot} = \hat{\mathbf{S}}_p + \hat{\mathbf{S}}_e, \quad (12.20)$$

elevando al cuadrado,

$$\hat{\mathbf{S}}_{tot}^2 = \hat{\mathbf{S}}_p^2 + \hat{\mathbf{S}}_e^2 + 2 \hat{\mathbf{S}}_p \cdot \hat{\mathbf{S}}_e, \quad (12.21)$$

de este modo, podemos escribir,

$$\hat{\mathbf{S}}_p \cdot \hat{\mathbf{S}}_e = \frac{1}{2} \left(\hat{\mathbf{S}}_{tot}^2 - \hat{\mathbf{S}}_p^2 - \hat{\mathbf{S}}_e^2 \right). \quad (12.22)$$

Así escrito, es evidente que este operador es diagonal en la base $|s, s_z\rangle$ (ver Sección 11.2).

Tenemos entonces,

$$\langle s, s_z | \hat{\mathbf{S}}_p \cdot \hat{\mathbf{S}}_e | s, s_z \rangle = \frac{\hbar^2}{2} \left\{ s(s+1) - \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \right] - \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \right] \right\}. \quad (12.23)$$

Finalmente, tenemos,

$$\langle 0, 0 | \hat{\mathbf{S}}_p \cdot \hat{\mathbf{S}}_e | 0, 0 \rangle = -\frac{3}{4} \hbar^2, \quad (12.24)$$

$$\langle 1, s_z | \hat{\mathbf{S}}_p \cdot \hat{\mathbf{S}}_e | 1, s_z \rangle = \frac{1}{4} \hbar^2. \quad (12.25)$$

Vemos que para $s = 1$ se mantiene la degeneración en s_z . Como este estado tiene tres proyecciones posibles para s_z , este estado se denomina *triplete*. Mientras que el estado con $s = 0$ ($s_z = 0$), se denomina *singlete*.

$$\Delta E_{hf} = \frac{\mu_0 g_p g_e e^2 \hbar^2}{6\pi m_p m_e a_0^3} \times \begin{cases} -3/4 & \text{singlete,} \\ 1/4 & \text{triplete.} \end{cases} \quad (12.26)$$

Calculando la diferencia de energía entre estos estados, obtenemos,

$$\Delta E_{hf}^{triplete} - \Delta E_{hf}^{singlete} \cong 5,88 \times 10^{-6} \text{ eV.} \quad (12.27)$$

Mientras que la longitud de onda resulta,

$$\lambda = \frac{(\Delta E_{hf}^{triplete} - \Delta E_{hf}^{singlete})}{hc} \cong 21 \text{ cm.} \quad (12.28)$$

Esta es la línea de 21cm del hidrógeno, de tanta importancia en la astrofísica.

12.3. Interacciones externas al átomo

La interacción fina y la hiperfina, son interacciones de origen magnético, debido a campos magnéticos internos del átomo. Nada nos impide sumergir al átomo de hidrógeno en un campo externo, pero *no dependiente del tiempo*, y estudiar cómo se ven afectados sus niveles de energía debido a estos campos. Ahora, cuando escribimos “campos”, puede tratarse de un campo magnético o de un campo eléctrico. Tratándose de un campo externo, debemos ser más cuidadosos con el uso de la teoría de perturbaciones. Un campo muy fuerte, puede hacer que no se pueda emplear dicho modelo. Pero existe otro punto igualmente importante: un campo externo lo podemos encender o apagar. Pero el campo interno está siempre presente. Luego, cuando tomemos en cuenta un campo magnético externo, debemos compararlo con el campo magnético interno.

12.3.1. Un campo magnético externo: efecto Zeeman

El efecto Zeeman es el cambio o corrimiento, que experimentan los niveles de energía del átomo de hidrógeno, cuando se sumerge al átomo en un campo magnético constante.

Vamos a elegir al eje z en la dirección del campo. De este modo, tenemos un campo \mathbf{B}_{ext} , que es constante como vector. La energía potencial de este campo con un electrón viene dada por,

$$\hat{V}_Z = -(\boldsymbol{\mu}_L + \boldsymbol{\mu}_S) \cdot \mathbf{B}_{ext}, \quad (12.29)$$

donde los momentos magnéticos orbital y de spin del electrón vienen dados por,

$$\boldsymbol{\mu}_L = -\frac{e}{2m_e} \hat{\mathbf{L}} \quad y \quad (12.30)$$

$$\boldsymbol{\mu}_S = -g_e \frac{e}{2m_e} \hat{\mathbf{S}}, \quad (12.31)$$

con $g_e = 2$. De este modo, podemos escribir,

$$\hat{V}_Z = \frac{e}{2m_e} (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \cdot \mathbf{B}_{ext}. \quad (12.32)$$

Como advertimos, no podemos analizar el efecto de un campo magnético externo sobre los niveles de energía del átomo de hidrógeno sin dejar de considerar al mismo tiempo la interacción fina, dada por el potencial $V_{LS}(r)$ (ec. 12.1). Para ello, una vez finalizado el cálculo, debemos comparar las correcciones de los niveles de energía entre la interacción fina y el corrimiento Zeeman. Si el corrimiento Zeeman es menor, entonces estamos realizando el cálculo correctamente.

Volvamos a la ec. (12.32) y mostremos la dificultad en este cálculo. En esta expresión, podemos elegir el eje z en la dirección del campo magnético, con lo cual tenemos,

$$\hat{V}_Z = \frac{e}{2m_e} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) B_{ext}. \quad (12.33)$$

Este operador es diagonal en la base $|\ell, m, s, s_z\rangle$. Desafortunadamente, estamos obligados a usar la base $|\ell, s, j, j_z\rangle$, pues el corrimiento Zeeman debemos *agregarlo* al de la interacción fina, para la que usamos esas base. Podemos escribir la interacción como,

$$\hat{V}_Z = \frac{e}{2m_e} (\hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{S}}) \cdot \mathbf{B}_{ext}, \quad (12.34)$$

recordando que $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$. En la base $|\ell, s, j, j_z\rangle$, el primer término es diagonal, pero no el segundo. En este caso y para evitar el uso teoría de perturbaciones para el caso degenerado, usamos un valor promedio de $\hat{\mathbf{S}}$, definido por,

$$\hat{\mathbf{S}}_{prom} = \frac{\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{J}}}{J^2} \hat{\mathbf{J}}. \quad (12.35)$$

Es fácil ver que,

$$\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{J}} = \frac{1}{2} (J^2 + S^2 - L^2),$$

de este modo,

$$\langle \ell, s, j, j_z | [J_z + (S_{prom})_z] | \ell, s, j, j_z \rangle = \hbar \left[1 + \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) + 3/4}{2j(j+1)} \right] j_z. \quad (12.36)$$

Definimos ahora el factor g_J de Landé, como,

$$g_J \equiv 1 + \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) + 3/4}{2j(j+1)}. \quad (12.37)$$

Finalmente tenemos para el corrimiento Zeeman de la energía,

$$E_Z = \mu_B g_J B_{ext} j_z, \quad (12.38)$$

donde,

$$\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m_e} = 5,788 \times 10^{-5} \text{ eV/T}, \quad (12.39)$$

se denomina magnetón de Bohr. (Nota: eV=electrón-Volt; T=Tesla).

Naturalmente, el valor de E_Z depende de la intensidad del campo magnético y para que este desarrollo sea válido, esta corrección no puede exceder a la de la interacción fina.

12.3.2. Un campo eléctrico externo: efecto Stark

El efecto Stark es el corrimiento de los niveles de energía del átomo de hidrógeno debido a un campo eléctrico constante. Ya que el momento magnético intrínseco o de spin, no se acopla con un campo eléctrico, no tendremos en cuenta al spin. Se diferencian dos efectos Stark: el lineal y el cuadrático; de acuerdo al número de veces en que aparece el potencial eléctrico en la corrección a la energía. En esta subsección, nos referiremos solo al efecto Stark lineal.

Vamos a considerar entonces un campo eléctrico constante. Elegimos al eje z en la dirección del campo eléctrico:

$$\mathbf{E}_{ext} = E_{ext} \hat{k},$$

donde la energía potencial para este campo es,

$$\hat{V}_{ext}(z) = -e E_{ext} \hat{z}. \quad (12.40)$$

Para este potencial, no encontramos ninguna base en forma inmediata, en que este potencial sea diagonal y por lo tanto, debemos emplear teoría de perturbaciones para estados degenerados. Esto significa que nos debemos colocar en un nivel de energía y resolver el problema. La solución que obtendremos es válida solo para el nivel en cuestión.

Consideraremos el nivel con $n = 2$; para este nivel tenemos,

$$\begin{aligned}\ell &= 0, & m &= 0, \\ \ell &= 1, & m &= -1, 0, 1.\end{aligned}$$

Recordemos que lo que debemos hacer ahora es construir a partir de las funciones de onda del átomo de hidrógeno, una nueva base en la que el potencial $\hat{V}_{ext}(z)$ es diagonal. Para ello, definimos en primer lugar el elemento de matriz de $\hat{V}_{ext}(z)$, como,

$$V_{\ell'm', \ell m} = -e E_{ext} \int d\phi \int d\cos(\theta) \int dr r^2 \psi_{2\ell'm'}^*(r, \theta, \phi) \hat{z} \psi_{2\ell m}(r, \theta, \phi), \quad (12.41)$$

donde en este punto vale la pena recordar la ec. (9.37), para la función de onda del átomo de hidrógeno,

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \phi).$$

Recordemos el comportamiento de la función de onda del átomo de hidrógeno frente a una transformación de paridad (Sección 9.4),

$$\mathcal{P} [R_{n\ell}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \phi)] = R_{n\ell}(r) Y_{\ell}^m(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^{\ell} R_{n\ell}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \phi),$$

por otra parte,

$$\mathcal{P} \hat{z} = -\hat{z}, \quad (12.42)$$

tenemos entonces,

$$\mathcal{P} [\psi_{2\ell'm'}^*(r, \theta, \phi) \hat{z} \psi_{2\ell m}(r, \theta, \phi)] = (-1)^{\ell'+1+\ell} \psi_{2\ell'm'}^*(r, \theta, \phi) \hat{z} \psi_{2\ell m}(r, \theta, \phi). \quad (12.43)$$

Esto nos dice que el integrando en la ec. (12.41), tiene una paridad definida. Sabemos que la integral de una función impar en un intervalo simétrico es nula. Luego, para que la integral en la ec. (12.41), sea no nula, debemos pedir que,

$$\ell' + 1 + \ell = 2k, \quad \text{con } k \text{ entero.}$$

Como ℓ' , $\ell = 0$ ó 1 , entonces,

$$\text{Si } \ell = 0, \Rightarrow \ell' = 1,$$

$$\text{Si } \ell = 1, \Rightarrow \ell' = 0.$$

Si no se cumple alguna de estas dos condiciones, entonces el elemento de matriz $V_{\ell'm',\ell m}$ es nulo. Construimos ahora la matriz de la perturbación. Elegimos, para filas y columnas, el siguiente orden: $\ell m = 0 0, 1 - 1, 1 0$ y $1 1$; con lo cual, tenemos,

$$\hat{V}(z) = \begin{pmatrix} 0 & V_{0,0,1-1} & V_{0,0,1,0} & V_{0,0,1,1} \\ V_{1-1,0,0} & 0 & 0 & 0 \\ V_{1,0,0,0} & 0 & 0 & 0 \\ V_{1,1,0,0} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (12.44)$$

Se puede simplificar aún más esta expresión. Para ello evaluamos,

$$\begin{aligned} \langle \ell'm' | \hat{L}_z \hat{z} | \ell m \rangle &= \hbar m' \langle \ell'm' | \hat{z} | \ell m \rangle, \\ \langle \ell'm' | \hat{z} \hat{L}_z | \ell m \rangle &= \hbar m \langle \ell'm' | \hat{z} | \ell m \rangle, \end{aligned} \quad (12.45)$$

restando ambas ecuaciones,

$$\langle \ell'm' | [\hat{L}_z, \hat{z}] | \ell m \rangle = \hbar(m' - m) \langle \ell'm' | \hat{z} | \ell m \rangle, \quad (12.46)$$

pero el conmutador $[\hat{L}_z, \hat{z}] = 0$, luego,

$$\hbar(m' - m) \langle \ell'm' | \hat{z} | \ell m \rangle = 0, \quad (12.47)$$

de este modo,

$$\text{Si } m' \neq m \Rightarrow \langle \ell'm' | \hat{z} | \ell m \rangle = 0. \quad (12.48)$$

Notemos que por la definición del elemento de matriz, tenemos,

$$V_{\ell'm',\ell m} = -eE_{ext} \langle \ell'm' | \hat{z} | \ell m \rangle.$$

De este modo, la matriz (12.44), se reduce a,

$$\hat{V}(z) = \begin{pmatrix} 0 & V_{00,10} \\ V_{10,00} & 0 \end{pmatrix}. \quad (12.49)$$

Estos son los elementos no nulos del problema. Es conveniente evaluar ahora en forma explícita los elementos de matriz. Para ello, comenzamos mostrando las funciones de onda,

$$\begin{aligned} \psi_{200}(r, \theta, \phi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{1}{2a_0} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-r/(2a_0)}, \\ \psi_{210}(r, \theta, \phi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{1}{2a_0} \right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/(2a_0)} \cos(\theta). \end{aligned} \quad (12.50)$$

Calculamos ahora los elementos de matriz, $V_{00,10}$ y $V_{10,00}$. Notemos que $z = r \cos(\theta)$.

Tenemos,

$$\begin{aligned} V_{00,10} = V_{10,00} &= -e E_{ext} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d \cos(\theta) \int_0^\infty dr r^2 \psi_{210}^*(r, \theta, \phi) r \cos(\theta) \psi_{200}(r, \theta, \phi) \\ &= -3e E_{ext} a_0. \end{aligned} \quad (12.51)$$

El próximo paso consiste en resolver el problema de autovalores,

$$\begin{pmatrix} 0 & V_{00,10} \\ V_{10,00} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \Delta E_{Stark} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \quad (12.52)$$

donde las incógnitas son ΔE_{Stark} , c_1 y c_2 . Para que la ec. (12.52), tenga una solución distinta de la trivial, debemos pedir que el determinante de la ecuación homogénea sea cero,

$$\begin{vmatrix} -\Delta E_{Stark} & V_{00,10} \\ V_{10,00} & -\Delta E_{Stark} \end{vmatrix} = 0. \quad (12.53)$$

Los dos autovalores que obtenemos resultan,

$$\Delta E_{Stark} = \pm 3e E_{ext} a_0. \quad (12.54)$$

Tomando cada una de estas energías, sus correspondientes autovectores normalizados, resultan,

$$\begin{aligned} \psi_+(r, \theta, \phi) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{200}(r, \theta, \phi) - \psi_{210}(r, \theta, \phi)), \\ \psi_-(r, \theta, \phi) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{200}(r, \theta, \phi) + \psi_{210}(r, \theta, \phi)). \end{aligned} \quad (12.55)$$

Resumimos el resultado,

$$\begin{aligned} E_{n=2}^+ &= E_2^0 + 3e E_{ext} a_0; \quad \psi_+(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{200}(r, \theta, \phi) - \psi_{210}(r, \theta, \phi)), \\ E_{n=2}^- &= E_2^0 - 3e E_{ext} a_0; \quad \psi_-(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{200}(r, \theta, \phi) + \psi_{210}(r, \theta, \phi)). \end{aligned}$$

Donde E_2^0 es la energía no perturbada para el átomo de hidrógeno con $n = 2$. Notemos que como consecuencia de la perturbación, el momento angular total dejó de ser un buen número cuántico.

CAPÍTULO 13

Teoría de perturbaciones dependiente del tiempo I

Introducción

Hasta ahora, siempre pensamos que el Hamiltoniano de nuestro problema no depende del tiempo. Físicamente, eso significa que el sistema está cerrado: no existe ningún flujo de energía, ni entrante, ni saliente. En el capítulo anterior, estudiamos el efecto Zeeman y Stark, que representan la acción de campos externos al sistema. Una vez establecidos, estos campos son estáticos: podemos seguir usando la conservación de la energía, ya que si bien los campos son externos, éstos no dependen del tiempo.

Consideramos ahora un potencial que depende del tiempo. Como en el caso de la Teoría de Perturbaciones independiente del tiempo, vamos a considerar que nuestro problema consta de dos partes: un Hamiltoniano independiente del tiempo cuya solución conocemos; más un potencial pequeño que lleva la dependencia temporal. Debemos sumar al Hamiltoniano de referencia (la parte dominante, que no depende del tiempo) el potencial que sí depende del tiempo, con lo cual el Hamiltoniano completo depende de él. Notamos entonces, que la energía depende del tiempo, ya que el Hamiltoniano lo hace. Esto es, la energía no es constante para el sistema que estamos estudiando. En capítulos previos, nuestro objetivo fue el calcular los posibles niveles de energía y sus funciones de onda. Ahora nuestro interés va a ser el poder calcular la probabilidad de que se produzca una transición entre diferentes niveles cuánticos (del Hamiltoniano de

referencia).

De este modo, antes resolvíamos las ecuaciones y encontrábamos diferentes niveles de energía para el sistema cuántico que estábamos estudiando. Nunca nos planteamos cómo podíamos hacer para que una partícula pase de un nivel a otro y con qué probabilidad. Es este tema el objeto de estudio de este capítulo. Un enfoque similar al de este capítulo y el siguiente se puede encontrar en [1].

13.1. Sobre la ecuación de Schrödinger

Partimos de un Hamiltoniano que depende del tiempo,

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{V}}(t), \quad (13.1)$$

donde $\hat{\mathcal{H}}_0$ es un término independiente del tiempo, cuya solución conocemos. Naturalmente, la expresión de $\hat{\mathcal{H}}_0$ tiene un término de energía potencial que llamaremos $\hat{\mathcal{V}}_0$. De este modo, podemos dar una única expresión para la energía potencial,

$$\tilde{V}(\mathbf{r}, t) = V_0(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}, t), \quad (13.2)$$

donde hemos pasado de operadores, a su representación en el espacio de posición. Para evitar dudas posteriores, $V(\mathbf{r}, t)$ es la parte del potencial total que depende del tiempo. Escribimos ahora la ecuación de Schrödinger,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + \tilde{V}(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}. \quad (13.3)$$

Al ver la ecuación de Schrödinger así escrita, lo primero que notamos es que la separación que hicimos para la función de onda en la *Introducción* del capítulo 7, en las ecs. (7.1-7.4), ya no es válida; pues la dependencia con el tiempo del término $\tilde{V}(\mathbf{r}, t)$, nos lo impide.

Si dejamos de lado la parte que depende del tiempo del potencial, esto es, si nos quedamos con $\hat{\mathcal{H}}_0$, la ecuación de Schrödinger es ahora,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + V_0(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad (13.4)$$

cuya solución se puede escribir como,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \varphi_n(\mathbf{r}), \quad (13.5)$$

donde E_n y $\varphi_n(\mathbf{r})$, resultan de resolver la ecuación estacionaria y las constantes c_n , se fijan a partir de las condiciones iniciales.

13.2. Ansatz para resolver la ecuación de Schrödinger

Debemos resolver la ec. (13.3) y sabemos que la solución de la ec. (13.4) está dada por una expresión de la forma (13.5). Para resolver entonces la ec. (13.3), proponemos el siguiente ansatz¹⁵,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \varphi_n(\mathbf{r}), \quad (13.6)$$

esto es, en lugar de tomar las c_n como constantes, las tomamos como una función del tiempo y dejamos el resto igual. Para poder encontrar las ahora funciones $c_n(t)$, reemplazamos la ec. (13.6), en la ec. (13.3). Al hacerlo, debemos tener presente que $\hat{\mathcal{H}}_0|n\rangle = E_n|n\rangle$, con $\varphi_n(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|n\rangle$. Debemos notar que el término del potencial $V_0(\mathbf{r})$, está contenido en $\hat{\mathcal{H}}_0$:

$$\begin{aligned} & \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} E_n \varphi_n(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}, t) \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \varphi_n(\mathbf{r}) = \\ & = i\hbar \sum_n \frac{dc_n(t)}{dt} e^{-iE_n t/\hbar} \varphi_n(\mathbf{r}) + i\hbar \sum_n c_n(t) \left(\frac{-i}{\hbar} \right) E_n e^{-iE_n t/\hbar} \varphi_n(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (13.7)$$

Vemos que el primer término de la izquierda se cancela con el segundo término de la derecha. Tenemos entonces,

$$i\hbar \sum_n \frac{dc_n(t)}{dt} e^{-iE_n t/\hbar} \varphi_n(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}, t) \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \varphi_n(\mathbf{r}). \quad (13.8)$$

Multiplicamos ahora por $\varphi_m^*(\mathbf{r})$ e integramos. Empleamos también la ortonormalidad de la función de onda,

$$i\hbar \frac{dc_m(t)}{dt} e^{-iE_m t/\hbar} = \sum_n V_{m,n}(t) c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (13.9)$$

¹⁵Ansatz: del alemán acercarse. Ansatz es un término comúnmente utilizado por físicos y matemáticos. Un ansatz es una solución estimada para una ecuación inicial que describe un problema físico o matemático.

Donde introducimos el elemento de matriz $V_{m,n}(t)$, definido como,

$$V_{m,n}(t) \equiv \int d\mathbf{r} \varphi_m^*(\mathbf{r})V(\mathbf{r},t)\varphi_n(\mathbf{r}). \quad (13.10)$$

Finalmente, llevando el exponencial de la izquierda al término de la derecha, tenemos,

$$\boxed{i\hbar \frac{dc_m(t)}{dt} = \sum_n V_{m,n}(t) c_n(t) e^{-i(E_n - E_m)t/\hbar}} \quad (13.11)$$

De este modo, obtenemos un conjunto de ecuaciones diferenciales de primer orden acopladas. Debemos enfatizar que esta es una solución aproximada del problema, pues como en el caso de la teoría de perturbaciones independientes del tiempo, el espacio de Hilbert es el de $\hat{\mathcal{H}}_0$.

13.3. Teoría de Perturbaciones dependiente del tiempo

Buscamos un método aproximado para resolver el sistema de ecs. (13.11). Para ello, en primer lugar fijamos la condición inicial. Supondremos que en $t = 0$, el sistema se encuentra en un autoestado de $\hat{\mathcal{H}}_0$:

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \varphi_i(\mathbf{r}); \quad \Rightarrow \quad c_m(0) = \delta_{m,i}. \quad (13.12)$$

En forma análoga a como procedimos para el caso de la teoría de perturbaciones independientes del tiempo, proponemos un desarrollo de la forma¹⁶,

$$c_m(t) = c_m(0) + \lambda c_m^{(1)}(t) + \lambda^2 c_m^{(2)}(t) + \dots \quad (13.13)$$

Junto a,

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{\mathcal{H}}_0 + \lambda \hat{\mathcal{V}}(t), \quad (13.14)$$

¹⁶Notar que el caso λ^0 , es el caso no perturbado. Si nuestra hipótesis es que en $t = 0$ el sistema se encuentra en $\psi(\mathbf{r}, 0)$ y no actúa ninguna perturbación, va a seguir en ese estado, por lo que $c_m(t) = c_m(0)$, al orden λ^0 .

donde λ es un parámetro adimensional cuyo único fin es contar el orden perturbativo y una vez que nos quedemos con un orden dado, este parámetro se cancela. Reemplazando estas expresiones en la ec. (13.11), junto con la condición inicial dada por (13.12), tenemos,

$$i\hbar \left(\lambda \frac{dc_m^{(1)}(t)}{dt} + \lambda^2 \frac{dc_m^{(2)}(t)}{dt} + \dots \right) = \lambda \sum_n V_{m,n}(t) \left(\delta_{m,i} + \lambda c_n^{(1)}(t) + \dots \right) e^{-i(E_n - E_m)t/\hbar}. \quad (13.15)$$

Notemos que el factor λ que multiplica a todos los términos de la derecha, proviene de la ec. (13.14). Nos quedamos con el orden λ (esto es, λ^1),

$$i\hbar \frac{dc_m^{(1)}(t)}{dt} = \sum_n V_{m,n}(t) \delta_{m,i} e^{-i(E_n - E_m)t/\hbar}, \quad (13.16)$$

hacemos actuar la delta de Kroenecker,

$$\boxed{i\hbar \frac{dc_f^{(1)}(t)}{dt} = V_{f,i}(t) e^{-i(E_i - E_f)t/\hbar}} \quad (13.17)$$

Donde además reemplazamos la letra m por f , por razones que serán obvias enseguida. En este orden, las ecuaciones están desacopladas, es decir, para cada valor de f , solo debemos resolver una ecuación diferencial. En particular, esta ecuación se integra fácilmente.

Si $f = i$, tenemos,

$$c_i^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' V_{i,i}(t'), \quad (13.18)$$

por otra parte, si $f \neq i$,

$$c_f^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' V_{f,i}(t') e^{-i(E_i - E_f)t'/\hbar}, \quad (13.19)$$

sumando ahora el orden cero, tenemos $c_f(t) \cong c_i(0) + c_f^{(1)}(t)$:

$$\boxed{c_f(t) = \delta_{f,i} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' V_{f,i}(t') e^{-i(E_i - E_f)t'/\hbar}} \quad (13.20)$$

Por medio de i , estamos designando el estado inicial del sistema y por medio de f , su estado final. La cantidad $|c_f(t)|^2$, representa la *probabilidad de transición* de una

partícula desde el estado i al estado f . En el caso de que $f = i$, estamos pensando en la probabilidad de que la partícula permanezca en el mismo estado a pesar de la perturbación.

13.3.1. Sobre la probabilidad de transición

Es conveniente discutir con más detalles el concepto de probabilidad de transición. Designemos como $\mathcal{P}_{i,f}(t)$ la probabilidad de transición desde un estado inicial i , a un estado final f . Afirmamos que la probabilidad en cuestión vale $|c_f(t)|^2$. De nuestra discusión previa sobre la función de onda, esta afirmación nos parece correcta. Sin embargo, es interesante mostrar este punto con más detalle.

A lo largo de este capítulo, calculamos la función de onda del sistema para cualquier instante. La función de onda, empleando ahora la notación de Dirac, la podemos escribir como,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle. \quad (13.21)$$

Por construcción, sabemos que esta función de onda vale para cualquier instante y en particular, para el instante inicial sabemos que,

$$|\psi(t=0)\rangle = |\varphi_i\rangle. \quad (13.22)$$

Cuando calculamos una probabilidad de transición, lo que calculamos es la probabilidad de pasar de un estado que denominamos “estado inicial” del Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_0$ a otro estado, llamado “estado final” del mismo Hamiltoniano. Sea $|\varphi_f\rangle$ un autoestado de $\hat{\mathcal{H}}_0$ que tomamos como nuestro estado final; mientras que el estado inicial lo designamos como, $|\varphi_i\rangle$. Partiendo de $t = 0$ y transcurrido un intervalo de tiempo $\Delta t = t_f$, nuestro cálculo nos da una expresión para $|\psi(t_f)\rangle$. La probabilidad de transición es entonces,

$$\mathcal{P}_{i,f}(t_f) \equiv |\langle\varphi_f|\psi(t_f)\rangle|^2. \quad (13.23)$$

Hagamos la cuenta en forma explícita:

$$\begin{aligned} \langle\varphi_f|\psi(t_f)\rangle &= \sum_n c_n(t_f) e^{-iE_n t_f/\hbar} \langle\varphi_f|\varphi_n\rangle = \\ &= \sum_n c_n(t_f) e^{-iE_n t_f/\hbar} \delta_{f,n} = \\ &= c_f(t_f) e^{-iE_f t_f/\hbar}. \end{aligned} \quad (13.24)$$

Luego, podemos definir,

$$\mathcal{P}_{i,f}(t_f) = |\langle \varphi_f | \psi(t_f) \rangle|^2 = |c_f(t_f)|^2. \quad (13.25)$$

Si bien llamamos a esta expresión “probabilidad de transición”, es válida también para la situación $i = f$; esto es, la probabilidad de permanencia en el mismo estado. Es conveniente resumir este resultado,

$$\boxed{\mathcal{P}_{i,f}(t) = \left| \delta_{f,i} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' V_{f,i}(t') e^{-i(E_i - E_f)t'/\hbar} \right|^2} \quad (13.26)$$

Sin culpa, podríamos terminar aquí. Sin embargo, vale la pena tomar una situación trivial para aclarar el concepto. Consideremos solo el Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_0$, esto es, anulamos la dependencia temporal de la interacción, $\hat{\mathcal{V}}(t) = 0$. Una función de onda mezcla para este problema la podemos escribir como,

$$|\psi(t)\rangle|_{\hat{\mathcal{V}}(t)=0} = \sum_n \tilde{c}_n e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle, \quad (13.27)$$

donde ahora el conjunto de las \tilde{c}_n son de constantes. Si respetamos la misma condición inicial que en la ec. (13.22), tenemos,

$$\tilde{c}_i = 1, \quad \text{y} \quad \tilde{c}_j = 0 \quad \forall j \neq i. \quad (13.28)$$

Resulta inmediato que,

$$\mathcal{P}_{ii} = 1, \quad \text{y} \quad \mathcal{P}_{f,i} = 0 \quad \forall f \neq i. \quad (13.29)$$

De este ejemplo, podemos pensar entonces que la acción de $\hat{\mathcal{V}}(t)$, es la de generar una función de onda mezcla a partir del estado puro $|\varphi_i\rangle$. A diferencia del estado mezcla dado por la ec. (13.27), este estado mezcla tiene coeficientes que dependen del tiempo, donde es esta dependencia la que nos hace pasar de un estado puro a un estado mezcla.

13.3.2. Resumen del método

Por medio de la Teoría de Perturbaciones dependiente del tiempo, podemos saber con qué probabilidad ocurre una transición de un nivel cuántico a otro inducido por un agente externo. También conocemos con qué probabilidad el sistema permanece en el mismo

estado cuántico a pesar de la acción del mismo agente externo. No debemos perder de vista que lo que hacemos es lo mismo que hacemos a lo largo de todo el curso: resolver la ecuación de Schrödinger (13.3). La diferencia con lo escrito anteriormente es que como ahora el potencial depende del tiempo, la energía no se conserva *para nuestro sistema*¹⁷ y debemos resolver la ecuación de Schrödinger como tal, ya no podemos separarla en una parte espacial y otra temporal. El objetivo último es el mismo: calcular la función de onda del problema. Para una pequeña perturbación, proponemos para la función de onda la expresión dada por la ec. (13.6). El problema es entonces evaluar las funciones $c_n(t)$ que representan el único elemento no conocido de la ec. (13.6). Al igual que para el caso estacionario, interpretamos a las funciones $c_n(t)$ como la probabilidad de encontrar la partícula en un estado cuántico n . Al ser estos coeficientes funciones del tiempo, si la partícula en el instante inicial se encuentra en un estado cuántico dado i , entonces podemos interpretar la cantidad $c_f(t_f)$ como la amplitud de probabilidad de entrar la partícula en el estado f al tiempo t_f . Este estado, como dijimos, puede ser cualquiera: puede ser el mismo estado inicial u otro diferente. Y como sabíamos que la partícula se encontraba en un estado i en el instante inicial, el módulo al cuadrado de esta amplitud de probabilidad $|c_f(t_f)|^2$, es la probabilidad de transición a $t = t_f$, en pasar de i a f (si $f \neq i$); mientras que para el caso $f = i$, la cantidad $|c_i(t_f)|^2$ es la probabilidad de encontrar la partícula en el mismo estado inicial al tiempo $t = t_f$.

En lo que sigue, desarrollaremos estos conceptos aplicándolos a cierto tipo de perturbaciones.

13.4. Algunas ejemplos y aplicaciones

En esta sección, desarrollaremos algunos ejemplos y discutiremos brevemente algunas aplicaciones de la Teoría de Perturbaciones dependiente del tiempo.

¹⁷En todo proceso físico la energía se conserva. Cuando existe un flujo de energía de un subsistema a otro, podemos decir que en cada subsistema separadamente, la energía no es constante o no se conserva.

13.4.1. Perturbación periódica en el tiempo

Consideramos una perturbación periódica del tiempo, de la forma,

$$V(\mathbf{r}, t) = F(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + G(\mathbf{r})e^{i\omega t}, \quad (13.30)$$

donde ω es una constante. Sin pérdida de generalidad, consideraremos que $\omega \geq 0$. Las funciones $F(\mathbf{r})$ y $G(\mathbf{r})$ dependen solo de la posición. El elemento de matriz de la perturbación se puede escribir como (ver la ec. 13.10):

$$V_{f,i}(t) = F_{f,i}e^{-i\omega t} + G_{f,i}e^{i\omega t}. \quad (13.31)$$

Antes de seguir adelante, vale la pena realizar una pequeña discusión. En nuestro sistema, con un Hamiltoniano que depende del tiempo, la energía no se conserva. Ahora bien, ¿se puede medir la energía? Naturalmente que sí, solo que su valor no es constante respecto del tiempo. Si podemos medir la energía, entonces debemos pedir que el Hamiltoniano sea hermítico. De este modo, debe cumplirse que,

$$F_{f,i}e^{-i\omega t} + G_{f,i}e^{i\omega t} = F_{i,f}^*e^{i\omega t} + G_{i,f}^*e^{-i\omega t}. \quad (13.32)$$

De esta relación, resulta,

$$G_{f,i} = F_{i,f}^*. \quad (13.33)$$

Debemos notar que esta es una relación entre dos números: las funciones $F(\mathbf{r})$ y $G(\mathbf{r})$ lo son de la posición y al evaluar los elementos de matriz ($F_{f,i}$ y $G_{f,i}$), integramos respecto de la posición como se indica en la ec. (13.10) y obtenemos finalmente una constante. Podemos escribir entonces,

$$V_{f,i}(t) = F_{f,i}e^{-i\omega t} + F_{i,f}^*e^{i\omega t}. \quad (13.34)$$

En lo que sigue, nos limitaremos al caso $i \neq f$, con $E_i \neq E_f$, de modo que la delta de Kroenecker en la expresión (13.20) es cero. La amplitud de transición resulta,

$$c_f(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' V_{f,i}(t') e^{i\omega_{fi}t'}, \quad (13.35)$$

donde definimos,

$$\omega_{fi} \equiv \frac{E_f - E_i}{\hbar} \quad (13.36)$$

Reemplazamos ahora en la ec. (13.35), la expresión del potencial dada por la ec. (13.34). Evaluando la integral definida obtenemos,

$$c_f(t) = \frac{1}{\hbar} \left(F_{f,i} \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\omega_{fi} - \omega} + F_{f,i}^* \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}}{\omega_{fi} + \omega} \right). \quad (13.37)$$

Sobre esta expresión, podemos diferenciar dos situaciones extremas: *i*) que $E_i > E_f$

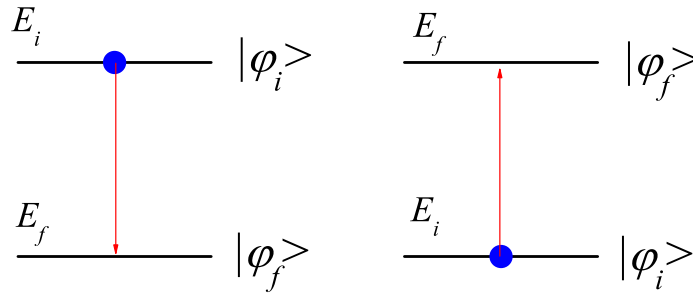


Figura 13.1: Consideramos dos niveles y la transición entre ellos. En el panel de la izquierda, el sistema se encuentra en el estado de mayor energía en el instante inicial, mientras que en el panel de la derecha, en el instante inicial la partícula está en el nivel de menor energía.

con lo cual $\omega_{fi} < 0$ y en ese caso si $\omega_{fi} \simeq -\omega$ entonces el segundo término de la derecha de esta expresión es mucho mayor que el primero. La otra situación es, *ii*) que $E_i < E_f$ con lo cual $\omega_{fi} > 0$ y en ese caso si $\omega_{fi} \simeq \omega$ entonces el primer término de la derecha de esta expresión es mucho mayor que el segundo. En la Fig. 13.1, vemos estas situaciones: en el panel izquierdo de la figura vemos el caso *i*) esto es, $E_i > E_f$; mientras que en el panel derecho se dibuja la situación *ii*) en la que $E_i < E_f$.

Debemos indicar que cada uno de estos paneles representa una situación física diferente; donde el estado físico real puede ser una de estas dos situaciones. Los niveles de energía son los mismos, pero son nombrados de diferente modo según el estado inicial del sistema (E_i ó E_f). En el panel izquierdo de la Fig. 13.1, la partícula se encuentra en el nivel de energía más alto y calculamos la probabilidad de que decaiga al de energía más bajo. En el segundo panel, la partícula se encuentra en el estado de energía más bajo y calculamos la probabilidad de que por la acción de un campo externo, suba un nivel más alto *absorbiendo* energía. En lo que sigue, debemos tratar de despojarnos de ciertos prejuicios para no cometer un error. En el panel de la izquierda la partícula se encuentra

en un nivel de energía más alto y decae a uno de energía más bajo. Sabemos que ese proceso puede ocurrir en forma espontánea. Sin embargo, aquí lo estamos estudiando como resultado de un decaimiento *inducido* por la acción de un potencial externo. Es interesante notar que esta situación es la que explica el funcionamiento de un láser.

Volvamos a los cálculos. Sobre estas dos situaciones físicas analizaremos una. La restante admite el mismo análisis, por lo cual no vale la pena repetirlo. Consideremos el caso en que $E_i < E_f$ (panel de la derecha en la Fig. 13.1). En este caso, podemos despreciar el segundo término de la ec. (13.37). Con un poco de álgebra, podemos escribir,

$$c_f(t) \cong \frac{1}{\hbar} F_{f,i} \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} - \omega)t}}{\omega_{fi} - \omega} = -\frac{i}{\hbar} F_{f,i} e^{i(\omega_{fi} - \omega)t/2} \frac{\text{sen}((\omega_{fi} - \omega)t/2)}{(\omega_{fi} - \omega)/2}. \quad (13.38)$$

De este modo,

$$\mathcal{P}_{if}(t) = |c_f(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |F_{f,i}|^2 \frac{\text{sen}^2((\omega_{fi} - \omega)t/2)}{(\omega_{fi} - \omega)^2/4}. \quad (13.39)$$

Con el fin de analizar esta expresión, definimos ahora,

$$\kappa \equiv \frac{(\omega_{fi} - \omega)t}{2},$$

lo que nos permite reescribir la ec. (13.39), como,

$$\mathcal{P}_{if}(t) = \frac{|F_{f,i}|^2 t^2}{\hbar^2} \left(\frac{\text{sen } \kappa}{\kappa} \right)^2. \quad (13.40)$$

Graficamos esta expresión en la Fig. 13.2. El graficar esta expresión no es simple, pues es en realidad una función de muchas variables: en forma explícita depende de la frecuencia ω y del tiempo t . Pero también se pueden obtener diferentes valores según el resultado del elemento de matriz $F_{f,i}$. Tomaremos como variable la frecuencia ω del potencial externo ya que nos interesa analizar el fenómeno conocido como *resonancia* que consiste en el aumento de la probabilidad de transición cuando $\omega_{fi} \simeq \omega$.

En la Fig. 13.2, vemos que la probabilidad de transición $\mathcal{P}_{if}(t)$, tiene un máximo cuando $\omega_{fi} = \omega$, cuyo valor se indica en la figura. Vemos que la dependencia funcional de $\mathcal{P}_{if}(t)$ es la de un patrón de difracción. En forma algo arbitraria, podemos tomar los dos primeros ceros de la función $\mathcal{P}_{if}(t)$ como la región de resonancia. Por "región de resonancia" entendemos el rango de valores de ω , para los cuales $\mathcal{P}_{if}(t)$ toma valores

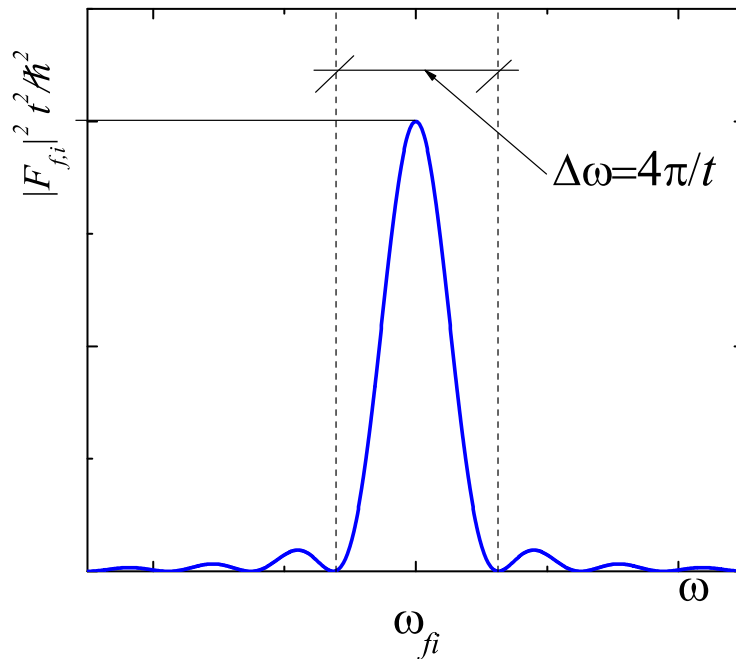


Figura 13.2: En esta figura graficamos la probabilidad de transición $\mathcal{P}_{if}(t)$, como función de la frecuencia ω del potencial externo. En este caso, el tiempo t juega el papel de un parámetro, esto significa que si bien el tiempo es una de las variables del problema, con el fin de dibujar esta curva tomamos un tiempo fijo.

significativos. Los ceros de la función, son los ceros de la función seno, en nuestro caso, $\kappa = \pi$ y $\kappa = -\pi$. Con un poco de álgebra:

$$\begin{aligned} \Delta\kappa &= 2\pi = \\ \Delta\omega \frac{t}{2} &= 2\pi \Rightarrow \\ \Delta\omega &= \frac{4\pi}{t}, \end{aligned} \tag{13.41}$$

donde $\Delta\omega$ es el rango de variación de ω entre su valor mínimo y su valor máximo; con el primer cero de $\mathcal{P}_{if}(t)$ a la izquierda de ω_{fi} , mientras que el segundo está a la derecha de la misma frecuencia de referencia. De esta expresión notamos que $\Delta\omega$ decrece a medida de que el tiempo t aumenta.

Luego de todos estos cálculos, debemos preguntarnos: ¿qué aprendemos de todo esto? Tenemos dos estados discretos E_i y E_f , que lo son de un Hamiltoniano que

no depende del tiempo y una perturbación armónica. La perturbación puede inducir una transición entre estos estados. Mostramos una expresión analítica para la probabilidad de transición (dada por la ec. 13.39). Pero también encontramos un resultado interesante: la probabilidad es máxima cuando $\omega = \omega_{fi}$ en el caso de que $E_i < E_f$. Esta frecuencia del potencial externo se denomina *frecuencia de resonancia* y como vimos se vincula una propiedad intrínseca del sistema. La siguiente pregunta se refiere al rango de validez de los cálculos que hemos hecho.

La primera aproximación que debemos revisar es el habernos quedado con un solo término de la expresión (13.39). De lo que aprendimos, sabemos que un término tiene un máximo para $\omega = +|\omega_{fi}|$ y el otro para $\omega = -|\omega_{fi}|$. Según el eje ω la separación de estos dos máximos es $2|\omega_{fi}|$. En la Fig. 13.2, vemos que la probabilidad solo es significativa dentro de un rango de variación de ω dado por $\Delta\omega$. Si ese ancho de variación es mucho menor que la separación entre los máximos, entonces tenemos los máximos claramente separados y nuestra aproximación es válida. Debemos pedir entonces que,

$$\Delta\omega \ll 2|\omega_{fi}|. \quad (13.42)$$

Usando la ec. (13.41), tenemos,

$$t \gg \frac{1}{|\omega_{fi}|} \simeq \frac{1}{\omega}. \quad (13.43)$$

El significado físico de este resultado indica que la perturbación debe realizar varias oscilaciones antes de inducir la transición: $1/\omega$ es a menos de una constante, el período de una oscilación. La relación (13.43), establece que el tiempo debe ser mucho mayor a un período.

Es interesante notar que si no se cumple la condición dada por la ec. (13.42), entonces existiría una superposición entre dos picos (cada uno de ellos, similar al de la Fig. 13.2). En la superposición de estos picos tendríamos lo que se da en llamar “interferencias cuánticas”. Un tema muy interesante que no abordaremos en este capítulo.

La otra condición que debemos analizar es la aplicabilidad de la Teoría de Perturbaciones en sí. Al mirar la ec. (13.40) vemos que esta probabilidad tiene un máximo cuando $\omega = \omega_{fi}$. En ese caso tenemos,

$$(\mathcal{P}_{if})_{max} = \frac{|F_{f,i}|^2 t^2}{\hbar^2}, \quad (13.44)$$

donde vemos que esta probabilidad crece cuadráticamente con el tiempo. Naturalmente, cualquier probabilidad no puede exceder al valor 1. Luego, debemos pedir que,

$$\frac{|F_{f,i}|^2 t^2}{\hbar^2} \ll 1,$$

de este modo,

$$t \ll \frac{\hbar}{|F_{f,i}|}. \quad (13.45)$$

Esta segunda condición establece un límite de aplicabilidad para la Teoría de Perturbaciones a primer orden. Si no es válida, simplemente debemos ir a un orden superior. Vemos entonces que los resultados que hemos obtenido tienen un rango de tiempo en el que son aplicables.

13.4.2. Perturbación constante que se enciende en $t = 0$.

Introducimos ahora un potencial que se enciende en $t = 0$ y a partir de ese instante no cambia en el tiempo. En términos generales podemos escribir este potencial como,

$$V(\mathbf{r}, t) = F(\mathbf{r})\Theta(t), \quad (13.46)$$

donde la función $F(\mathbf{r})$ dependen solo de la posición y $\Theta(t)$ es conocida como *función escalón* ó *función de Heaviside* y tiene la forma¹⁸:

$$\Theta(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t < 0, \\ 1 & \text{si } t \geq 0. \end{cases} \quad (13.47)$$

Nuevamente, nos concentramos en la transición desde un estado inicial i a uno final f , con la condición de que $i \neq f$ y además, $E_i \neq E_f$. Siguiendo los mismos pasos que en la sub-sección 13.4.1, obtenemos,

$$\mathcal{P}_{if} = |c_f(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |F_{f,i}|^2 \frac{\text{sen}^2(\omega_{fi} t/2)}{\omega_{fi}^2/4}. \quad (13.48)$$

Debemos notar que este resultado es en realidad un caso particular del anterior y se obtiene simplemente haciendo $\omega = 0$ en la ec. (13.39). Definimos nuevamente la variable κ como,

$$\kappa \equiv \frac{\omega_{fi} t}{2},$$

¹⁸No lo necesitamos aquí, pero vale la pena mencionar que la derivada de la función de Heaviside respecto de t , es la delta de Dirac, $\delta(t)$.

que nos permite reescribir la ec. (13.48), como,

$$\mathcal{P}_{if} = \frac{|F_{f,i}|^2 t^2}{\hbar^2} \left(\frac{\text{sen } \kappa}{\kappa} \right)^2. \quad (13.49)$$

La condición dada por la ec. (13.45), sigue siendo válida, pues podemos repetir el razonamiento que llevó a su obtención. De modo que debe cumplirse que,

$$t \ll \frac{\hbar}{|F_{f,i}|}. \quad (13.50)$$

Pero en este caso no tenemos un valor mínimo para t ; aunque naturalmente,

$$(\mathcal{P}_{if})_{t=0} = 0.$$

Antes de terminar esta subsección, señalemos que para el caso de este potencial si graficamos \mathcal{P}_{if} en función de E_f , encontramos la misma dependencia funcional que para el potencial oscilante de las subsección anterior. En el caso del potencial oscilante lo graficamos en función de la frecuencia del potencial, ω . Sin embargo, si tomamos $\omega = \text{constante}$ y graficamos la probabilidad en función de $E_f - \omega$, encontramos exactamente la misma dependencia.

Corolario: En la sección 6.3, discutimos la aplicabilidad de la Teoría de Perturbaciones independiente del tiempo. Cuando tratamos con un problema dependiente del tiempo, le debemos seguir pidiendo al potencial de la perturbación que sea pequeño frente al problema no perturbado. Ahora, sin embargo, aparece una variable adicional que es el tiempo. En este caso, vimos que para tiempos largos la corrección perturbativa a primer orden falla. Esta vez sí tiene sentido evaluar órdenes superiores para dar cuenta de tiempos largos, en tanto la condición sobre la magnitud del potencial se mantenga.

13.5. Degeneración de niveles y transiciones al continuo

Una transición al continuo es aquella en que el estado final es el de una partícula libre. Un ejemplo de este tipo de transiciones es el de un átomo que se ioniza: un electrón que en su estado inicial está ligado al átomo, se libera de su ligadura y deja de interactuar

con el resto de las partículas del átomo; esto es, el estado final del electrón es el de una partícula libre. Notemos que el espectro del Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_0$ puede tener todas las combinaciones posibles entre estados discretos y continuos. Por ejemplo, el Hamiltoniano del oscilador armónico solo tiene estados discretos, el de una partícula libre solo tiene estados del continuo, mientras que para el caso de un potencial Coulombiano (que usamos para modelar al átomo de hidrógeno), tenemos un espectro discreto para las energías negativas y uno continuo para las positivas. Estamos pensando ahora en este último caso, en que tenemos una parte discreta y otra continua.

El estado inicial puede ser un estado discreto, como en el ejemplo del párrafo anterior o también un estado del continuo. Un ejemplo de transiciones entre estados del continuo es una partícula que es dispersada por un centro dispersor. De esta manera, podemos tener transiciones entre estados discretos, como estudiamos en las secciones anteriores, transiciones desde el discreto al continuo o transiciones entre estados del continuo. En esta sección nos ocuparemos en detalle de las transiciones en que al menos el estado final está en el continuo. Sin embargo, antes es conveniente discutir dos puntos relevantes. El primero es entender qué ocurre cuando los niveles en los que trabajamos están degenerados. El segundo punto se vincula con el carácter de una medida.

13.5.1. Niveles degenerados

Cuando calculamos la probabilidad de transición en la ec. (13.26), debemos decir cuál es el estado cuántico inicial y final. Esta información es necesaria para poder evaluar el elemento de matriz $V_{f,i}(t)$ en dicha expresión. Supongamos ahora que tanto el estado inicial, como el final, están degenerados. Esto es, para las energías E_i y E_f , existen varios estados cuánticos. Si esto ocurre, existen diferentes posibilidades. La más simple es elegir un estado de cada nivel y calcular la probabilidad. Pero esta elección parece algo arbitraria.

Pensamos entonces que la partícula está en un nivel inicial, con energía E_i y llega a un estado final con energía E_f ; y nos preguntamos cómo calcular la probabilidad de transición. Vamos a dar la respuesta al problema y luego explicarla: *debemos promediar sobre los estados iniciales y sumar sobre los estados finales*. Si sabemos que la partícula se encuentra en la línea de energía E_i , en la que existen varios estados, no podemos saber

en cuál está o si está en un estado mezcla. Lo mejor que podemos hacer es promediar sobre los diferentes estados, dándoles a todos los estados posibles el mismo peso. Si esto llegara a funcionar mal, es porque nos estamos olvidando de alguna variable importante.

Nos interesa más entender el concepto de *sumar sobre todos los posibles estados finales*. Discutamos un ejemplo simple para entender esto: si arrojamos un dado, la probabilidad de obtener el número 4 es de $1/6$. La probabilidad de obtener un número *par*, es $1/2$, que resulta de sumar la probabilidad de obtener 2 que es $1/6$, más la de obtener 4, otro $1/6$ y la de obtener 6, el último $1/6$. La suma es $1/6 + 1/6 + 1/6 = 1/2$. Sumamos las probabilidades de obtener cada número par del dado para obtener la probabilidad final. Del mismo modo, si existen muchos estados finales con la misma energía E_f , debemos sumar sobre cada uno de ellos.

13.5.2. Comentario sobre la medida de una transición

El objetivo de esta subsección es el de plantear un tema de discusión que iremos desarrollando en el resto del capítulo y en el próximo capítulo. En este punto, sólo daremos algunos elementos de tipo conceptual.

Hemos puesto mucho énfasis en señalar que un observable en Mecánica Cuántica es una magnitud física que tiene un operador hermítico asociado. La energía, la magnitud del momento angular y su proyección sobre el eje z , son ejemplos de observables. También lo son la posición y la cantidad de movimiento. Sin embargo, si medimos la posición y la cantidad de movimiento, solo una de ellas puede ser dada con precisión arbitraria, ya que sus operadores hermíticos asociados no conmutan. Es verdad que no podemos dar *con precisión arbitraria* ambas magnitudes al mismo tiempo, pero sí podemos dar el valor medio de ambas magnitudes, con cierto grado de incertidumbre. Cuando escribimos que no podemos hablar de la trayectoria de una partícula, no significa que nuestra ignorancia sobre la trayectoria sea absoluta. Significa que nuestra ignorancia sobre la trayectoria respecto del valor medio de la posición y la cantidad de movimiento, está acotada por la incertidumbre asociada.

La Mecánica Cuántica tiene una propiedad que es sutil, es central en la teoría y resulta de los postulados; esto es, no podemos demostrar: si conocemos la función de onda de un sistema, el valor medio de cualquier magnitud calculado con esa función de

onda, coincide con el promedio de muchas medidas individuales. Esto lo hemos discutido extensamente. Notemos que un promedio no se puede hacer con una única medida.

En este capítulo, mostramos cómo calcular una probabilidad de transición. Para confrontar nuestro cálculo con el experimento, deberíamos realizar muchas medidas, determinar todas las transiciones posibles y determinar las probabilidades de transición individuales. Por ejemplo, pensemos en tres posibles estados finales: f_1 , f_2 y f_3 . En 1000 sistemas cuánticos idénticos, inducimos la transición y encontramos que el sistema llega al estado f_1 : 400 veces, al f_2 : 100 veces y al f_3 : 200 veces y vemos que se queda en el estado inicial i , 300 veces. Luego, $\mathcal{P}_{i,f_1} = 0,4$, $\mathcal{P}_{i,f_2} = 0,1$, $\mathcal{P}_{i,f_3} = 0,2$ y $\mathcal{P}_{i,i} = 0,3$. Esto hace a la medida. Luego usamos la teoría y calculando la probabilidad con la ec. (13.26), comparamos teoría con experimento. Es importante aclarar que el contenido de este párrafo expresa las cosas en forma sobresimplificada, lo cual no es en general una buena idea. Simplemente se busca llamar la atención sobre el significado de las magnitudes más allá de sus expresiones.

Terminamos esta subsección con la introducción a una aplicación de interés. Muchas veces se escucha el concepto de “vida media”. Por ejemplo, la vida media de un neutrón libre es de unos 841s. Esto no significa que todos los neutrones decaigan en exactamente 841s. ¿Cómo calcular la vida media? Bueno, aún no sabemos cómo hacer eso. Pero pensemos un poco: sabemos cómo calcular la probabilidad de transición. Si la probabilidad es alta, uno imagina que el decaimiento debe ser rápido. Si es baja, debe ser lento. Luego, vida media y probabilidad de transición deben estar relacionados. Discutiremos este punto más adelante.

13.5.3. Transiciones al continuo

Vale la pena hacer una aclaración sobre el título. Lo que describimos en esta subsección son las transiciones que terminan en estados del continuo, pudiendo comenzar en un estado discreto u otro estados continuo.

Desde el punto de vista experimental, existe una diferencia importante entre un estado final del continuo y otro del discreto: los estados del discreto están claramente separados. Para el caso continuo, es imposible que un detector diferencie un estado particular, pues la separación entre los estados del continuo es infinitesimal. Luego,

debemos sumar sobre un entorno del estado final que nos interesa, pues es para lo que tiene sentido hacer una comparación con el experimento. Arbitrariamente, denominamos a este dominio de estados finales con \mathcal{D}_f .

No debemos perder de vista que los estados del continuo son autoestados de $\hat{\mathcal{H}}_0$. Designemos por medio de α , al índice que rotula a estos estados, para los que consideramos la normalización (ver subsec. 3.1.2),

$$\langle \alpha | \alpha' \rangle = \delta(\alpha - \alpha'). \quad (13.51)$$

Para describir al sistema en un tiempo arbitrario, naturalmente mantenemos siempre la función de onda normalizada $|\psi(t)\rangle$, según la ec. (13.21). Recordemos que esta función de onda describe al estado inicial para $t = 0$. Calculamos ahora la probabilidad $\delta\mathcal{P}(\alpha_f, t)$ de encontrar al sistema en algún estado final dentro del dominio \mathcal{D}_f . Esto supone sumar sobre todos los posibles estados finales dentro de ese dominio:

$$\delta\mathcal{P}(\alpha_f, t) = \int_{\mathcal{D}_f} d\alpha |\langle \alpha | \psi(t) \rangle|^2. \quad (13.52)$$

Notemos que esta expresión debe ser comparada con la ec. (13.23), correspondiente al caso discreto. Por medio de $d\alpha$ estamos indicando la suma sobre las variables continuas que caracterizan al estado final. Una de estas variables es necesariamente la energía E del estado final. Reemplazamos el conjunto de variables,

$$\{\alpha\} \rightarrow \{E, \beta\},$$

donde β indica el resto de las variables una vez excluida la energía E . De este modo, podemos hacer el siguiente cambio de variables,

$$d\alpha = \rho(\beta, E) d\beta dE, \quad |\alpha\rangle = |\beta, E\rangle, \quad (13.53)$$

donde desde el punto de vista matemático $\rho(\beta, E)$ es el Jacobiano de la transformación, que físicamente resulta en la densidad de estados finales. En la próxima subsección daremos algunos detalles sobre este punto. Tenemos finalmente para la probabilidad de transición,

$$\delta\mathcal{P}(\alpha_f, t) = \int_{\mathcal{D}_f} d\beta dE \rho(\beta, E) |\langle \beta, E | \psi(t) \rangle|^2 \quad (13.54)$$

Para aclarar estos conceptos, mostremos un ejemplo. Consideremos la dispersión de una partícula de masa m , sin spin. La energía de la partícula es,

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

y los estados finales los podemos describir como estados con un impulso \mathbf{p} bien definido. De este modo, podemos escribir,

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} e^{i\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} / \hbar}.$$

De este modo, usando la ec. (13.54), la probabilidad de transición es,

$$\delta\mathcal{P}(\mathbf{p}_f, t) = \int_{\mathcal{D}_f} d\mathbf{p} |\langle \mathbf{p} | \psi(t) \rangle|^2. \quad (13.55)$$

Sabemos que,

$$d\mathbf{p} = dp p^2 d\Omega,$$

donde $d\Omega = d \cos(\theta) d\phi$. Ya que la energía no depende de Ω , podemos escribir,

$$d\mathbf{p} = \rho(E) dE d\Omega,$$

esto es,

$$dp p^2 = \rho(E) dE,$$

entonces,

$$\rho(E) = p^2 \frac{dp}{dE} = p^2 \frac{2m}{2p} = m\sqrt{2mE}.$$

Finalmente, la probabilidad de transición resulta,

$$\delta\mathcal{P}(\mathbf{p}_f, t) = \int_{\mathcal{D}_f} dE d\Omega \rho(E) |\langle \mathbf{p} | \psi(t) \rangle|^2. \quad (13.56)$$

13.5.4. Sobre la densidad de estados $\rho(E)$

Por simplicidad, supondremos que la densidad de estados depende solo de la energía. Debemos recordar que si el sistema puede llegar a varios estados finales, debemos sumar sobre cada uno de ellos. Si los estados finales son discretos, es claro cómo hacer la suma. Para sumar sobre todos los estados continuos, debemos saber cuántos estados existen en

un entorno infinitesimal de la energía final. Llamemos dN_f al número de estados finales cuya energía se encuentra entre E_f y $E_f + dE_f$. Podemos escribir,

$$dN_f = \frac{dN_f}{dE_f} dE_f,$$

donde ahora definimos,

$$\rho(E_f) \equiv \frac{dN_f}{dE_f},$$

con lo cual, tenemos,

$$dN_f = \rho(E_f) dE_f.$$

De este modo, al sumar sobre los estados finales del continuo, podemos integrar sobre la energía final pesando la integral con la densidad de estados.

Mostramos ahora en forma algo esquemática, cómo debemos proceder. Cuando conocemos el estado inicial y podemos llegar a un único estado final, tenemos $\mathcal{P}_{i,f} = |c_f(t_f)|^2$. Si tenemos un conjunto posible de estados finales discretos, debemos sumar sobre todos los estados finales,

$$\mathcal{P}_{i,\sum f} = \sum_f |c_f(t_f)|^2. \quad (13.57)$$

Pero si los estados finales pertenecen al continuo, debemos pasar de una suma a una integral,

$$\mathcal{P}_{i,\sum f} = \sum_f |c_f(t_f)|^2 \rightarrow \int dN_f |c_f(t_f)|^2 = \int dE_f \rho(E_f) |c_f(t_f)|^2. \quad (13.58)$$

Naturalmente, el último paso resulta de una conveniencia de cálculo, pues integrar sobre energía es más simple que escribir a $|c_f(t_f)|^2$ en función de N_f . Claro, la dificultad la trasladamos a conocer la densidad de estados finales, $\rho(E_f)$.

13.6. La Regla de Oro de Fermi

La Regla de Oro de Fermi es una aproximación para calcular la probabilidad de transición tan empleada, que en general se olvida su origen y de que es una aproximación. Su potencialidad y uso va más allá de este escrito. Sin embargo, mostraremos algo de ello en el capítulo siguiente.

Comencemos repitiendo la expresión (13.54), para una transición al continuo,

$$\delta\mathcal{P}(\alpha_f, t) = \int_{\mathcal{D}_f} d\beta dE \rho(\beta, E) |\langle\beta, E|\psi(t)\rangle|^2. \quad (13.59)$$

Considerando un potencial que se enciende en $t = 0$, (ver ec. 13.48), tenemos,

$$|\langle\beta, E|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle\beta, E|V(\mathbf{r})|\varphi_i\rangle|^2 \frac{\text{sen}^2(t(E - E_i)/2\hbar)}{(E - E_i)^2/4\hbar^2}. \quad (13.60)$$

Para evitar dudas, $|\psi(t = 0)\rangle = |\varphi_i\rangle$, con energía E_i y la energía final E puede tomar diferentes valores. Tomamos el límite para $t \gg 1$. Para ello, empleamos la propiedad,

$$\delta(x) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\text{sen}^2(tx)}{t x^2}. \quad (13.61)$$

De este modo,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\text{sen}^2(t(E - E_i)/2\hbar)}{t(E - E_i)^2/4\hbar^2} = 2\hbar \delta(E - E_i).$$

Reemplazando ahora en la ec. (13.59), tenemos,

$$\delta\mathcal{P}(\alpha_f, t) = \frac{2\pi}{\hbar} t \int_{\mathcal{D}_f} d\beta dE \rho(\beta, E) |\langle\beta, E|V(\mathbf{r})|\varphi_i\rangle|^2 \delta(E - E_i). \quad (13.62)$$

A lo largo de todo este escrito, quizá este sea el desarrollo en el que las aproximaciones sean más difíciles de digerir: estamos tomando el límite para $t \rightarrow \infty$ a pesar de que en la subsección 13.4.2 (ver ec. 13.50), mostramos que existe una cota superior para el tiempo t . No solo eso, para hacer el límite, debimos multiplicar y dividir por t , debido a lo cual en la expresión (13.62), existe un t en el numerador e ignoramos aquí la idea de que $t \gg 1$, que podría determinar que la probabilidad sea mayor que uno. Era conveniente llamar la atención sobre este punto. Volveremos sobre él enseguida. Sobre la ec. (13.62), la presencia de la delta de Dirac nos dice que la energía se conserva ($E_f = E_i$).

Definimos ahora una nueva magnitud, que es la probabilidad por unidad de tiempo y por unidad de variación de β ,

$$\Gamma(\varphi_i, \alpha_f) \equiv \frac{\delta}{\delta\beta} \frac{d(\delta\mathcal{P}(\alpha_f, t))}{dt}, \quad (13.63)$$

donde respecto de t hacemos una derivada común, mientras que sobre β debemos hacer la derivada funcional. Notemos que por conveniencia hemos agregado en Γ , la dependencia con la función de onda inicial φ_i . De este modo, tenemos finalmente,

$$\Gamma(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle\beta_f, E_f = E_i|V(\mathbf{r})|\varphi_i\rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f = E_i) \quad (13.64)$$

Debimos colocar el subíndice f en β , pues antes esa información estaba contenida en la integral, al indicar el dominio \mathcal{D}_f . Quizá pudimos escribir simplemente " E_i ", donde antes teníamos E , para ser más consistentes con la expresión. Este resultado se conoce como Regla de Oro de Fermi.

Como escribimos más arriba, las aproximaciones que hicimos para llegar a este resultado nos despiertan dudas. Simplemente, la usamos porque funciona. Como también dijimos, funciona tan bien que a veces se olvida que es una aproximación.

Antes de terminar y como corolario, recordemos que encontramos la Regla de Oro de Fermi para el caso de una perturbación que se enciende en $t = 0$ y a partir de ahí, es constante en el tiempo. Podemos repetir la deducción para la perturbación armónica de la subsección 13.4.1. La Regla de Oro de Fermi para este caso es,

$$\Gamma(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \beta_f, E_f = E_i + \omega | V(\mathbf{r}) | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f = E_i + \omega). \quad (13.65)$$

En el próximo capítulo mostraremos una formulación alternativa de la Teoría de Perturbaciones dependiente del tiempo y discutiremos algunas aplicaciones algo más elaboradas.

CAPÍTULO 14

Teoría de perturbaciones dependiente del tiempo II

Introducción

En el capítulo anterior introdujimos la Teoría de Perturbaciones dependiente del tiempo. Al hacerlo, notamos que debimos cambiar nuestro modo de abordar un problema cuántico. Mientras que antes el problema era el de calcular las energías y las funciones de onda de un problema físico particular, ahora al tener un Hamiltoniano que depende del tiempo, el cálculo de la energía pierde sentido, pues dejó de ser una magnitud conservada. Ya no podemos escribir la ecuación estacionaria de Schrödinger. Debemos trabajar con la ecuación de Schrödinger completa y el primer punto es calcular la función de onda del sistema, colocando como condición de contorno el conocimiento del estado físico en un instante considerado como inicial.

El conocimiento de la función de onda nos permite evaluar con qué probabilidad el sistema puede encontrarse en alguno de los diferentes estados cuánticos. Esto es, nos permite calcular la probabilidad de transición entre los diferentes estados cuánticos.

El objetivo de este capítulo es el de desarrollar algunas aplicaciones de la Teoría de Perturbaciones dependiente del tiempo, con el fin de comprender mejor el alcance del método. Comenzaremos el capítulo desarrollando una formulación alternativa de dicho método. Esta formulación es equivalente a la anterior y es algo más abstracta, por lo cual mostramos el esquema más simple en primer lugar.

14.1. Formulación alternativa

Desarrollaremos ahora una formulación alternativa de la Teoría de Perturbaciones dependiente del tiempo. El presentar esta formulación alternativa busca varios objetivos. En primer lugar, es interesante ver que un esquema diferente conduce al mismo resultado. Por otra parte, el esquema que presentaremos es algo más abstracto. En la sección 5.2, discutimos la noción de *esquema*. Vimos dos esquemas: en el *esquema de Schrödiger*, los estados dependen del tiempo, pero no los operadores asociados con observables. El segundo que discutimos, el *esquema de Heisenberg*, los estados no dependen del tiempo, pero sí dependen los operadores asociados con observables. En esta sección, vamos a introducir el *esquema de Interacción*, en el que tanto los estados, como los operadores dependen del tiempo. Esto suena raro: el que todo dependa del tiempo hacer parecer que todo debe ser más complicado. Es este otro motivo que nos lleva a discutir esta formulación alternativa: a veces una estrategia que parece intrincada, termina simplificando un problema difícil.

Como en el capítulo anterior, consideramos un Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_0$, que no depende del tiempo y cuya solución conocemos, al que le sumamos un potencial pequeño $\hat{\mathcal{V}}(t)$, que le da la dependencia temporal al problema,

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{V}}(t).$$

El potencial $\hat{\mathcal{V}}(t)$ puede depender también de la posición, pero omitimos escribir esta dependencia para no recargar las expresiones. Sin pérdida de generalidad, tomamos el origen del tiempo en $t = 0$, de modo que,

$$\hat{\mathcal{V}}(t) = 0, \quad \text{si } t \leq 0.$$

De este modo, la ecuación de Schrödiger resulta,

$$\hat{\mathcal{H}}_0 |\psi^0(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi^0(t)\rangle, \quad \text{si } t \leq 0, \quad (14.1)$$

donde definimos la función de onda para $t = 0$, como,

$$|\psi^0\rangle \equiv |\psi^0(t = 0)\rangle. \quad (14.2)$$

Cuando $t > 0$, tenemos,

$$(\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{V}}(t)) |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle, \quad \text{si } t > 0. \quad (14.3)$$

Notemos que se eliminó el superíndice 0. Naturalmente, $|\psi(t \rightarrow 0)\rangle = |\psi^0\rangle$.

Debemos resolver la ec. (14.3). Para ello, notamos que $\hat{\mathcal{V}}(t)$ debe ser pequeño y buscamos hacer un desarrollo de la función de onda en una serie de potencias de la interacción $\hat{\mathcal{V}}(t)$. Por otra parte, si la contribución más importante al Hamiltoniano es $\hat{\mathcal{H}}_0$, debe ser este término el dominante en la evolución temporal de la función de onda. De este modo, buscamos separar la acción de $\hat{\mathcal{H}}_0$ de la de $\hat{\mathcal{V}}(t)$. Para ello, proponemos reescribir la función de onda como,

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} |\psi_t\rangle, \quad (14.4)$$

donde hemos introducido $|\psi_t\rangle$ por medio de esta igualdad. Debemos reemplazar ahora esta expresión en la ec. (14.3). Por conveniencia, calculamos primero,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} |\psi_t\rangle) = \hat{\mathcal{H}}_0 |\psi(t)\rangle + i\hbar e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} \frac{\partial}{\partial t} |\psi_t\rangle,$$

notamos que el término $\hat{\mathcal{H}}_0 |\psi(t)\rangle$, se cancela con el primer término de la izquierda en la ec. (14.3). De este modo, al reemplazar la ec. (14.4) en la ec. (14.3), obtenemos,

$$\hat{\mathcal{V}}(t) e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} |\psi_t\rangle = i\hbar e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} \frac{\partial}{\partial t} |\psi_t\rangle, \quad (14.5)$$

multiplicamos ambos miembros por $e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar}$, con lo que tenemos,

$$e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} \hat{\mathcal{V}}(t) e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} |\psi_t\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_t\rangle. \quad (14.6)$$

Definimos ahora,

$$\hat{\mathcal{V}}_t \equiv e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} \hat{\mathcal{V}}(t) e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar}, \quad (14.7)$$

lo cual, nos permite escribir,

$$\boxed{\hat{\mathcal{V}}_t |\psi_t\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_t\rangle} \quad (14.8)$$

Obtenemos entonces una expresión que nos da la evolución temporal de $|\psi_t\rangle$, debido a la acción solo de $\hat{\mathcal{V}}_t$. La función de onda y el potencial, están definidos en las ecs. (14.4) y (14.8), respectivamente. Las transformaciones que se muestran en esas expresiones muestran cómo pasar del esquema de Schrödinger al esquema de Interacción (dado por $|\psi_t\rangle$ y $\hat{\mathcal{V}}_t$). En el esquema de interacción, tanto la función de onda, como el potencial, dependen del tiempo. Gracias a este esquema, logramos separar la dependencia temporal debida a $\hat{\mathcal{H}}_0$, de aquella debida al potencial $\hat{\mathcal{V}}(t)$.

Buscamos ahora encontrar una solución aproximada de la ec. (14.8). En primer lugar, integramos respecto del tiempo (invertimos el orden de los términos en dicha ecuación),

$$\int_0^t d|\psi_{t'}\rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{\mathcal{V}}_{t'} |\psi_{t'}\rangle, \quad (14.9)$$

lo cual nos lleva a la ecuación implícita,

$$\boxed{|\psi_t\rangle = |\psi^0\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{\mathcal{V}}_{t'} |\psi_{t'}\rangle} \quad (14.10)$$

donde debemos notar que de la ec. (14.4), $|\psi_{t=0}\rangle = |\psi^0\rangle$. Esta ecuación, es equivalente a la ec. (14.8), donde la incógnita $|\psi_t\rangle$, está a la derecha de la ecuación y dentro del integrando.

Resolveremos la ec. (14.10) por medio de un método iterativo: comenzamos reemplazando en el integrando $|\psi_t\rangle$ por $|\psi^0\rangle$:

$$|\psi_t\rangle^{(1)} = |\psi^0\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{\mathcal{V}}_{t'} |\psi^0\rangle. \quad (14.11)$$

Esta es la solución de primer orden. Los órdenes superiores se obtienen fácilmente. Sólo debe reemplazarse $|\psi_t\rangle^{(1)}$, en lugar de $|\psi_t\rangle$ en el integrando de la ec. (14.10):

$$|\psi_t\rangle^{(2)} = |\psi^0\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{\mathcal{V}}_{t'} |\psi^0\rangle + \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \hat{\mathcal{V}}_{t'} \hat{\mathcal{V}}_{t''} |\psi^0\rangle. \quad (14.12)$$

Ahora calculemos la probabilidad de transición a primer orden, con el fin de comparar con el resultado del capítulo anterior. Para ello, empleamos la expresión (13.23):

$$\mathcal{P}_{i,f} = |\langle \varphi_f | \psi(t) \rangle|^2,$$

donde ambos vectores están en el espacio de Schrödinger. Sin embargo, notamos que,

$$\mathcal{P}_{i,f} = |\langle \varphi_f | e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} |\psi_t\rangle|^2 = |e^{-i\varepsilon_f t/\hbar}|^2 |\langle \varphi_f | \psi_t \rangle|^2 = |\langle \varphi_f | \psi_t \rangle|^2.$$

De este modo, la probabilidad de transición se puede calcular entre el estado final $|\varphi_f\rangle$ y el estado al tiempo t , del estado en el esquema de interacción.

Para mejorar nuestra comparación con el resultado del capítulo anterior, cambiemos brevemente la notación del estado inicial por,

$$|\psi^0\rangle \rightarrow |\varphi_i\rangle.$$

A partir de la ec. (14.12), tenemos,

$$\langle \varphi_f | \psi_t \rangle^{(1)} = \langle \varphi_f | \varphi_i \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \langle \varphi_f | \hat{\mathcal{V}}_{t'} | \varphi_i \rangle. \quad (14.13)$$

Empleando ahora la ec. (14.7), tenemos,

$$\langle \varphi_f | \hat{\mathcal{V}}_t | \varphi_i \rangle = \langle \varphi_f | e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} \hat{\mathcal{V}}(t) e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} | \varphi_i \rangle = e^{i(\varepsilon_f - \varepsilon_i)t/\hbar} \langle \varphi_f | \hat{\mathcal{V}}(t) | \varphi_i \rangle. \quad (14.14)$$

De este modo,

$$\mathcal{P}_{i,f} = |\langle \varphi_f | \psi_t \rangle^{(1)}|^2 = \left| \delta_{i,f} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' e^{i(\varepsilon_f - \varepsilon_i)t'/\hbar} \langle \varphi_f | \hat{\mathcal{V}}(t') | \varphi_i \rangle \right|^2, \quad (14.15)$$

que luego de un esfuerzo mínimo de álgebra, es exactamente la ec. (13.26), del capítulo anterior. De este modo, hemos llegado al mismo resultado por dos caminos diferentes.

Notemos que la ec. (14.8) nos permite encontrar la solución exacta de la ecuación de Schrödinger para un potencial dependiente del tiempo. Para obtener nuestro resultado a partir de esta ecuación, hicimos dos aproximaciones. La primera es evidente, es el método iterativo para su solución. La segunda aproximación puede haber pasado desapercibida: tomamos como estado inicial y final, estados del Hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_0$, lo cual equivale a imponer que el espacio de Hilbert es el de los autoestados del Hamiltoniano sin perturbar; que es la aproximación más fuerte de la teoría de perturbaciones, dependiente o no del tiempo.

14.2. Anchos de decaimiento y vida media

En el capítulo anterior, definimos la magnitud $\Gamma(\varphi_i, \alpha_f)$ en la ec. (13.64), como la probabilidad de transición por unidad de tiempo y por unidad de la variable β_f . Esta última cantidad (β_f), la podemos omitir en nuestro análisis sin culpa, pues en general la densidad de estados solo depende de la energía. Por conveniencia, repetimos dicha expresión, que es la Regla de Oro de Fermi para un potencial que se enciende en $t = 0$, y luego ya no depende del tiempo. La escribiremos en forma simplificada para resaltar las variables relevantes:

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \varphi_f | V(\mathbf{r}) | \varphi_i \rangle|^2 \rho(E). \quad (14.16)$$

El ancho de decaimiento tiene unidades de $[1/s]$. Lo que hace que esta expresión sea tan útil, es que es independiente del tiempo. Esto es una aproximación; pero funciona muy bien y eso hace que se use extensamente. Notemos que una vez que se fija el estado inicial y final, el ancho de decaimiento Γ , es una constante.

La cantidad Γ nos da la probabilidad de transición por unidad de tiempo. Vamos a desarrollar ahora un ejemplo de aplicación de este esquema, vinculando esta magnitud con un posible experimento. Para ello, mostramos primero un ejemplo numérico simple, con el fin de fijar ideas. Consideremos un conjunto de estados cuánticos idénticos que se encuentran en el mismo estado excitado y pensemos que solo pueden decaer al mismo estado final. Puede tratarse de átomos en su primer estado excitado, pudiendo decaer solo al estado fundamental. Designemos por N el número total de dichos estados y pensemos que en el instante inicial tenemos $N_0 = 10$, estados. Con el fin de desarrollar este ejemplo, pensemos que,

$$\Gamma\Delta t = 0,1, \quad \text{cuando } \Delta t = 1 \text{ s.}$$

La cantidad $\Gamma\Delta t$, es una probabilidad: esta expresión nos dice que después de 1s, uno de cada diez sistemas decayeron. Si comenzamos con diez sistemas en el estado excitado, al cabo de un segundo, nos quedan nueve. Esto es,

$$\Delta N \equiv N_f - N_0 = 9 - 10 = -1,$$

donde N_f es el número de estados excitados al cabo de 1s. Podemos escribir esta idea como,

$$\Delta N = -\Gamma\Delta t N_0.$$

Es trivial comprobar que $-\Gamma\Delta t N_0 = -1$. La probabilidad de decaimiento $\Gamma\Delta t$ por el número de sistemas N_0 , nos dice cuántos sistemas decaen y debemos agregar un signo $(-)$, para indicar que tenemos un sistema menos. Esta misma expresión se puede escribir en términos diferenciales como,

$$\frac{dN(t)}{dt} = -\Gamma N(t), \quad (14.17)$$

donde indicamos en forma explícita la dependencia de N con el tiempo. Gracias a que Γ es una constante, esta ecuación se puede integrar, obteniendo,

$$N(t) = N_0 e^{-\Gamma t}, \quad (14.18)$$

podemos escribir ahora,

$$N(t) = N_0 e^{t/\tau}, \quad (14.19)$$

donde hemos definido,

$$\tau \equiv \frac{1}{\Gamma}, \quad \text{con } [\tau] = \text{s} \quad (14.20)$$

La cantidad τ , se denomina *vida media* y es el tiempo para quedarnos con $1/e$ del número de inicial de sistemas. Notemos que estamos vinculando la probabilidad de que decaiga *un* sistema, con el comportamiento físico medible que resulta del promedio de los decaimientos de *muchos* sistemas. Esto es algo intrínsecamente cuántico: sobre lo que le ocurre a un sistema en particular damos una probabilidad. Si bien el valor más probable es el que resulta del cálculo, el decaimiento puede ocurrir en cualquier momento, antes o después. Sin embargo, cuando medimos muchos sistemas cuánticos *independientes entre sí*, su promedio es siempre el mismo y coincide con el predicho por la probabilidad para un único sistema.

Al revisar en tablas la información sobre partículas que decaen (por ejemplo, el neutrón), encontramos los valores para su masa, carga, spin y también su vida media. Para medir esta última cantidad, se toma un conjunto grande de sistemas cuánticos idénticos y se grafica el número de partículas que decae en función del tiempo. Naturalmente, se obtiene un decaimiento exponencial del que se puede extraer el valor de la vida media τ_{exp} . Luego, confrontamos este valor experimental con el resultado teórico que se obtiene del cálculo de la probabilidad de transición. Si los resultados coinciden, significa que entendemos el tipo de interacción que determina el decaimiento.

14.3. Sobre la llamada relación de incertidumbre tiempo-energía

En la Sec. 5.5, mostramos cómo se obtienen las relaciones de incertidumbre. Existe una relación similar entre la energía y el tiempo, que viene dada por,

$$\Delta t \Delta E \gtrsim \hbar \quad (14.21)$$

Enseguida mostraremos una justificación para esta expresión. Antes de ello, es conveniente indicar que formalmente esta no es una relación de incertidumbre comparable a las desarrolladas en la Sec. 5.5, ya que el tiempo entra en la Mecánica Cuántica no-relativista como un parámetro y no tiene ningún operador hermítico asociado. Es correcto referirse a esta expresión como la relación de incertidumbre tiempo-energía, pero debemos recordar que su origen es diferente.

Para justificar esta expresión, pensemos en primer lugar en un sistema de dos niveles, con energías E_1 y E_2 , cuyos autovectores escribimos como $|\varphi_1\rangle$ y $|\varphi_2\rangle$, respectivamente. Para un instante arbitrario t , escribimos una función de onda mezcla como,

$$|\psi(t)\rangle = c_1 e^{-iE_1 t/\hbar} |\varphi_1\rangle + c_2 e^{-iE_2 t/\hbar} |\varphi_2\rangle. \quad (14.22)$$

Como el sistema se puede encontrar en un estado con energía E_1 ó E_2 , la incertidumbre en la energía es,

$$\Delta E \simeq |E_1 - E_2|. \quad (14.23)$$

Consideremos ahora un observable arbitrario \mathcal{A} , que no conmuta con el Hamiltoniano. La probabilidad de encontrar al sistema en un autoestado a_i del observable \mathcal{A} al tiempo t , es,

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(a_i, t) = |\langle u_i | \psi(t) \rangle|^2 &= |c_1|^2 |\langle u_i | \varphi_1 \rangle|^2 + |c_2|^2 |\langle u_i | \varphi_2 \rangle|^2 + \\ &2\text{Re}[c_2^* c_1 e^{i(E_2 - E_1)t/\hbar} \langle u_i | \varphi_2 \rangle^* \langle u_i | \varphi_1 \rangle]. \end{aligned} \quad (14.24)$$

Esto nos dice que el sistema oscila entre los dos niveles con una frecuencia dada por,

$$\nu_{12} = \frac{|E_1 - E_2|}{\hbar}. \quad (14.25)$$

Por lo tanto, el tiempo característico es,

$$\Delta t = \frac{\hbar}{|E_1 - E_2|}. \quad (14.26)$$

Empleando ahora la ec. (14.23), tenemos finalmente,

$$\Delta t \Delta E \simeq \hbar. \quad (14.27)$$

Una justificación similar se puede hacer para un sistema continuo. No ahondaremos más en este tipo de desarrollos.

Para terminar este punto, notemos que si tenemos una partícula en un cierto nivel de energía y decae, podemos asociar el tiempo de decaimiento con Δt . Esto significa que tendremos una incertidumbre en la energía de $\Delta E \simeq \hbar/\Delta t$. El modo de estudiar el espectro de los átomos es midiendo la radiación que emiten por las transiciones entre sus niveles. Como vemos que existe una incertidumbre intrínseca ΔE , esto significa que las líneas espectrales siempre tendrán un cierto grosor, que no tiene que ver con el instrumento, sino que es intrínseco del sistema cuántico.

14.4. Sección eficaz de dispersión: la aproximación de Born

En primer lugar, vamos a reescribir la Regla de Oro de Fermi de un modo algo más primitivo. Para ello, tomamos la expresión (13.62), pero no sumamos sobre los estados finales. De este modo, es inmediato obtener,

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \varphi_f | V(\mathbf{r}) | \varphi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i). \quad (14.28)$$

Expresamos la Regla de Oro de Fermi de este modo, pues para lo que sigue es conveniente mostrar la suma sobre los estados finales.

Ahora, vamos a pensar en una situación física particular. Supongamos que tenemos una partícula en un estado de momento $\hbar\mathbf{k}$, dentro de una caja cúbica grande, de volumen ℓ^3 . Se enciende un potencial $V(\mathbf{r})$ y deseamos calcular la probabilidad por

unidad de tiempo de que la partícula realice una transición a otro estado de momento $\hbar\mathbf{k}'$. El elemento de matriz de la transición es,

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{k}' | V(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle &= \int d^3r \frac{e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}}{\ell^{3/2}} V(\mathbf{r}) \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\ell^{3/2}} \\ &= \frac{1}{\ell^3} \int d^3r V(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} \equiv \frac{1}{\ell^3} V_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}},\end{aligned}\quad (14.29)$$

donde como puede verse, hemos considerado ondas planas normalizadas dentro de la caja para dar cuenta de las funciones de onda. Notemos que de hecho, $V_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}$, es la transformada de Fourier del potencial $V(\mathbf{r})$. Debemos notar que como estamos normalizando dentro de una caja de volumen finito, estas funciones de onda representan auténticamente un estado físico.

Reemplazamos esta expresión en la Regla de Oro de Fermi, ec. (14.28):

$$\Gamma_{\mathbf{k}\rightarrow\mathbf{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{\ell^6} |V_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}),\quad (14.30)$$

donde,

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}.$$

Ahora evaluaremos la probabilidad de transición por unidad de tiempo de que los estados finales se encuentren dentro de un cierto rango del ángulo sólido $d\Omega$ del espacio de impulso. De este modo, debemos sumar,

$$d\Gamma = \sum_{\mathbf{k}' \in d\Omega'} \Gamma_{\mathbf{k}\rightarrow\mathbf{k}'},\quad (14.31)$$

antes de reemplazar la suma, notamos que,

$$d\mathbf{k}' = d\Omega' dk' k'^2 = d\Omega' d\varepsilon_{\mathbf{k}'} k' \frac{m}{\hbar^2}.$$

Con lo cual, tenemos para la suma,

$$\sum_{\mathbf{k}' \in d\Omega} \rightarrow d\Omega' \frac{\ell^3 m}{(2\pi)^3 \hbar^2} \int_0^\infty d\varepsilon_{\mathbf{k}'} k'.$$

Reemplazando esta expresión en las ecs. (14.30) y (14.31), tenemos,

$$d\Gamma = \frac{d\Omega'}{\ell^3} \frac{m k}{4\pi^2 \hbar^3} |V_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}|^2.\quad (14.32)$$

Notemos que el vector \mathbf{k}' indica la dirección del diferencial de ángulo sólido $d\Omega'$.

.....

Quien no tenga dudas, omita este trozo del texto. Mostremos un detalle de la integral:

$$\int_0^\infty d\varepsilon_{\mathbf{k}'} k' \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}),$$

con,

$$k' = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m\varepsilon_{\mathbf{k}'}}.$$

Empleando la delta de Dirac, reemplazamos k' por k , con lo cual tenemos,

$$\int_0^\infty d\varepsilon_{\mathbf{k}'} k' \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m\varepsilon_{\mathbf{k}}} = k.$$

Es por ello que en la expresión (14.32) tenemos k , en lugar de k' .

.....

Ahora queremos calcular la sección eficaz diferencial de dispersión de partículas dentro del volumen ℓ^3 , en el que estamos trabajando. La sección eficaz, es la probabilidad de transición por unidad de tiempo, dividido por el flujo de partículas incidentes. Ya tenemos la probabilidad y ahora debemos calcular el flujo incidente. Recordemos que la función de onda incidente es,

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\ell^{3/2}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)},$$

donde $\omega_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}}/\hbar$. Con esta función de onda, calculamos el módulo del flujo incidente empleando la ec. (1.14) (capítulo 1). Por conveniencia, repetimos la expresión,

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) - \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t)),$$

con lo cual, obtenemos,

$$|\mathbf{J}_{inc}| = \frac{\hbar k}{m \ell^3}, \tag{14.33}$$

dividiendo la ec. (14.32), por este flujo y por el diferencial de ángulo sólido, tenemos la sección eficaz de dispersión,

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega'} = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} |V_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}|^2} \tag{14.34}$$

Esta forma de calcular la sección eficaz, se denomina "aproximación de Born". Repasemos qué calculamos: tenemos una partícula incidente con número de onda \mathbf{k} . Formalmente, se

“enciende” el potencial $V(r)$. Este hecho de encender el potencial, también lo podemos pensar como un potencial de corto alcance que actúa sólo cuando la partícula se aproxima a un centro dispersor. De este modo, la partícula sufre una transición a otro estado cuántico caracterizado por k' , y calculamos la sección eficaz diferencial de dicho proceso.

14.5. Reseña del método

La teoría de perturbaciones dependiente del tiempo se inscribe en un método algo diferente al de los capítulos anteriores. Durante todos esos capítulos, la energía era un buen número cuántico y de hecho, era la cantidad que más nos interesaba. La conservación de la energía implica que el sistema cuántico está cerrado. Al incluir potenciales que dependen del tiempo, lo que hacemos es ampliar el espacio de Hilbert. En lugar de trabajar con un espacio de Hilbert muy grande, lo cual es impráctico, lo que hacemos es quedarnos con nuestro espacio de Hilbert anterior y modelar el efecto de ese espacio de Hilbert más grande por medio de un potencial que ahora depende del tiempo. La idea de un espacio de Hilbert más grande es sugestiva y tiene un ejemplo interesante. Supongamos un átomo de hidrógeno aislado y además, pensemos en que el electrón se encuentra en un estado excitado. Esta situación nos debe hacer dudar un poco: por una parte, sabemos que el electrón eventualmente decaerá hasta llegar al estado fundamental. Por otra parte, todo lo que mostramos hasta ahora nos dice que el electrón debería permanecer en su estado excitado indefinidamente a menos que alguna acción externa al sistema (eventualmente un potencial), se encienda e induzca el decaimiento. El problema se resuelve cuantificando el campo electromagnético, que hemos tomado siempre como un campo clásico. De este modo, el espacio de Hilbert del átomo es más grande de lo que pensamos, ya que debemos sumar los estados cuánticos del campo electromagnético. En este trabajo, no estudiaremos el decaimiento espontáneo del átomo de hidrógeno; pero al menos nombramos que es el paso siguiente en nivel de dificultad.

Al estudiar una probabilidad de transición, estamos estudiando la dependencia con el tiempo de un sistema físico. Estudiamos el vínculo entre la probabilidad de transición y la vida media. Mientras que la probabilidad de transición se refiere a un sistema

cuántico particular, la vida media nos da información sobre muchos sistemas cuánticos. Regresando a nuestro análisis, la variable relevante no es que introducimos un potencial que depende del tiempo. Lo importante es que al poner nuestro espacio de Hilbert original en contacto con un espacio de Hilbert más grande, modelamos el efecto del espacio de Hilbert externo por medio de alguna dependencia temporal. Esta dependencia puede consistir en un potencial que depende del tiempo, como hemos mostrado en estos dos capítulos. Supongamos que encendemos un campo magnético externo en un cierto instante. Claramente tendremos un problema dependiente del tiempo, pero como el campo magnético no deriva de un potencial escalar, deberemos usar un esquema diferente al que mostramos.

La mayoría de los problemas físicos reales, implican transiciones. Estudiando las transiciones, comprendemos al sistema. Luego, la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo nos abre la puerta a la aplicación de la Mecánica Cuántica a los problemas de mayor interés. Como dijimos, el método es diferente: partimos del conocimiento de un conjunto de autoenergías y sus estados correspondientes (que provienen del Hamiltoniano no perturbado) y queremos saber con qué probabilidad puede ocurrir una transición entre estos estados. Este tema es el comienzo de un análisis muy interesante. Sin embargo, no debemos perder de vista que solo podemos avanzar en esa dirección si comprendemos bien el sistema de referencia, el del espacio de Hilbert cerrado.

CAPÍTULO 15

Entrelazamiento cuántico e información cuántica

Introducción

Debemos tener en mente que el objetivo de este escrito es el de un libro de cátedra. No se busca agotar ningún tema; pero en el área del conocimiento que ocupa este capítulo eso es particularmente cierto. El Entrelazamiento Cuántico y la Información Cuántica son temas abiertos y extremadamente complejos. En los capítulos anteriores discutimos conceptos, junto a los elementos de cálculo que nos permiten resolver problemas físicos asociados a esos conceptos. El objetivo era el de lograr cierta relación dialéctica entre la discusión de un concepto y la resolución de problemas: primero presentamos los conceptos elementales de un tema, luego al dar ciertas herramientas de cálculo, resolvemos algunos problemas. Al hacerlo, ponemos a prueba nuestra comprensión de los conceptos. Si regresamos a los conceptos y los revisamos a la luz de los resultados de los problemas, habremos avanzado en la comprensión conceptual del tema; avanzando con problemas más difíciles y conceptos más sólidos.

Este capítulo no sigue esa metodología de trabajo, sino que se busca exponer brevemente un conjunto de conceptos ahora accesibles gracias a los conocimientos adquiridos en los capítulos anteriores. Durante la mayor parte del curso trabajamos sobre la física de una sola partícula. Hacia el final, analizamos dos partículas en casos simples. Todos sabemos de la Mecánica Clásica, que el problema de dos cuerpos tiene una solución

exacta, mientras que para resolver el problema de tres o más cuerpos, debemos recurrir a métodos numéricos. Luego, la primera pregunta que debemos formularnos es cómo abordar el problema de muchos cuerpos en Mecánica Cuántica. El entrelazamiento cuántico, junto a la información cuántica, son temas que requieren de alguna aproximación al problema de muchos cuerpos.

En resumen, este capítulo busca mostrar algunos temas complejos, de enorme impacto científico, que podemos discutir ahora gracias a lo visto anteriormente. El capítulo debe ser pensado como una introducción a estos temas. El enfoque de este capítulo está basado en los libros de D. Bes [2] y E. Rieffel y W. Polak [11]; donde se desarrollan estos temas con más detalles.

15.1. El problema de muchos cuerpos

Para llegar al análisis de un problema de muchos cuerpos, es conveniente comenzar por dos. Consideremos un Hamiltoniano de dos partículas $\hat{\mathcal{H}}$:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}(1) + \hat{\mathcal{H}}(2), \quad (15.1)$$

donde tenemos dos partículas, que indicamos como 1 y 2. Los Hamiltonianos $\hat{\mathcal{H}}(1)$ y $\hat{\mathcal{H}}(2)$ corresponden a la partícula 1 y 2, respectivamente y cumplen con $\hat{\mathcal{H}}(1)\varphi(1) = E_1\varphi(1)$ y $\hat{\mathcal{H}}(2)\varphi(2) = E_2\varphi(2)$. De este modo, tenemos,

$$\begin{aligned} \varphi(1,2) &= \varphi(1)\varphi(2), \\ \hat{\mathcal{H}}\varphi(1,2) &= (E_1 + E_2)\varphi(1,2). \end{aligned} \quad (15.2)$$

Estas energías y funciones de onda se denominan de *partícula independiente*, pues no incluimos un término de interacción entre las partículas entre sí, de la forma $\hat{\mathcal{V}}(1,2)$; sino dos Hamiltonianos independientes, uno que actúa solo sobre la partícula 1 y el otro sobre la partícula 2. De este modo, podemos evaluar el conjunto de posibles valores de la energía y de las funciones de onda para una de las partículas en forma independiente de la otra.

Hasta ahora nos referimos a dos partículas. Estas partículas pueden ser idénticas (dos electrones) o diferentes (un protón y un electrón). Surge aquí un concepto importante,

que es el de partículas idénticas. En nuestra experiencia macroscópica, no existen dos objetos iguales. Podemos tener dos objetos parecidos e indiferenciables a simple vista, pero un análisis cuidadoso permitirá diferenciarlos. Solo en el mundo cuántico surge el concepto de partícula idéntica. Las propiedades que definen (masa, carga, spin, etc.) a partículas como el electrón, protón, neutrón, etc, son las mismas para todos los electrones, protones y neutrones del Universo. No existen protones con apenas un poco más de masa y otros con solo un poco menos de masa. Todos son *exactamente* idénticos.

La idea de dos objetos exactamente idénticos tiene enormes implicaciones desde el punto de vista cuántico. Supongamos ahora dos partículas idénticas (no importa cuáles), que se encuentran próximas la una de la otra. Cuando escribimos que "se encuentran próximas" lo que se indica es que la separación entre las partículas es lo suficientemente pequeña como para que el Principio de Incertidumbre de Heisenberg nos impida seguir la trayectoria de cada partícula en forma individual. Solo para ser claros, si tenemos dos partículas separadas por unos 20 cm, la incertidumbre en la posición de las partículas va a ser siempre mucho menor que la separación entre ellas. Pero si la separación entre las partículas es del orden de la incertidumbre en la posición que resulta del principio de Heisenberg, entonces no solo tenemos partículas idénticas, sino que no podemos seguir la trayectoria de cada partícula; por lo cual, la operación de permutar las partículas debería dejar el sistema invariante.

Quizás estemos empleando un poco más de espacio a este punto de lo que es habitual. Lo que ocurre es que el punto es algo sutil. Podemos resumir el concepto escribiendo: *en Mecánica Cuántica el Principio de Heisenberg impide distinguir las partículas idénticas*. Esto parece una obviedad, pues si son idénticas, entonces no las podemos distinguir. Sin embargo, se está diciendo otra cosa. Imaginemos dos esferas macroscópicas idénticas, en que asumimos su existencia con el fin de dar la explicación. Tenemos una esfera en la mano derecha y la otra en la mano izquierda. Si bien son idénticas, podemos hablar de la esfera de la mano derecha o de la mano izquierda. Cuánticamente, si dos partículas están próximas, no podemos identificar a las partículas por su posición.

15.1.1. Simetría en la función de onda total

Continuamos con el problema de dos partículas idénticas, denominadas 1 y 2. Como describimos en los párrafos anteriores, no podemos diferenciar a estas partículas, suponiendo que se encuentran lo suficientemente cerca la una de la otra. Esto es, la física de estas partículas debe ser la misma cuando intercambio la partícula 1 con la 2 ($1 \rightleftharpoons 2$). Definimos el operador que permuta las partículas 1 y 2, como $\hat{\mathcal{P}}(12)$. Consideremos ahora un operador cualquiera $\hat{\mathcal{O}}(1, 2)$ que representa algún observable del sistema de las partículas 1 y 2. La acción de $\hat{\mathcal{P}}(12)$, debe dejar invariante a este operador,

$$[\hat{\mathcal{P}}(12), \hat{\mathcal{O}}(1, 2)] = 0. \quad (15.3)$$

Esta relación nos dice que los operadores $\hat{\mathcal{P}}(12)$ y $\hat{\mathcal{O}}(1, 2)$ tienen una base común. Además, el autovalor de $\hat{\mathcal{P}}^2(12)$ vale 1, pues permutar dos veces equivale a no haber hecho nada. Luego, los autovalores de $\hat{\mathcal{P}}(12)$ son 1 y -1 . Decimos que un autoestado con autovalor $+1$ de $\hat{\mathcal{P}}(12)$ es *simétrico*; mientras que para el caso del autovalor -1 es *antisimétrico*.

Consideremos dos estados ortonormales de partícula independiente¹⁹, que designaremos como φ_p y φ_q . Para el sistema de dos partículas, con dos estados de partícula independiente, podemos construir cuatro funciones de onda. Las primeras tres son simétricas, que indicaremos con un superíndice (+):

$$\Psi_{pp}^{(+)} = \varphi_p(1) \varphi_p(2), \quad (15.4)$$

$$\Psi_{qq}^{(+)} = \varphi_q(1) \varphi_q(2), \quad (15.5)$$

$$\Psi_{pq}^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_p(1) \varphi_q(2) + \varphi_q(1) \varphi_p(2)]. \quad (15.6)$$

Mientras que la única combinación antisimétrica (-), es,

$$\Psi_{pq}^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_p(1) \varphi_q(2) - \varphi_q(1) \varphi_p(2)]. \quad (15.7)$$

Resulta inmediato comprobar que $\hat{\mathcal{P}}(12)\Psi_{pp}^{(+)} = \Psi_{pp}^{(+)}$ (vale lo mismo para $\Psi_{qq}^{(+)}$ y $\Psi_{pq}^{(+)}$), mientras que $\hat{\mathcal{P}}(12)\Psi_{pq}^{(-)} = -\Psi_{pq}^{(-)}$.

Debemos notar algo sugestivo. Si en las combinaciones simétricas (ecs.15.4-15.6), imponemos que $p = q$, luego de renormalizar $\Psi_{pq}^{(+)}$, vemos que las tres funciones de

¹⁹Recordemos que la idea de una función de onda de una partícula independiente es que aún cuando dicha partícula está rodeada de otras partículas, posee una función de onda propia.

onda se reducen a una sola. Pero si hacemos lo mismo con la combinación antisimétrica, encontraríamos que $\Psi_{pq}^{(-)} = 0$, lo cual indica que no existe una función de onda antisimétrica con dos partículas con los mismos números cuánticos.

Existe otra propiedad que solo comparten los estados $\Psi_{pq}^{(+)}$ y $\Psi_{pq}^{(-)}$. Estos estados se denominan *estados entrelazados*, ya que los estados cuánticos p y q no se corresponden con una única partícula, sino que son compartidos por las dos.

No ahondaremos mucho en el punto que sigue, pero vale la pena al menos nombrarlo. Por simplicidad, introducimos un pequeño cambio de notación:

$$\begin{aligned}\Psi_{pq}^{(+)} &\rightarrow |pq\rangle_+, \\ \Psi_{pq}^{(-)} &\rightarrow |qp\rangle_-.\end{aligned}$$

Calculamos ahora la distancia promedio entre las partículas de dos estados entrelazados,

$$\left[\langle pq | (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2 | pq \rangle_{\pm} \right]^{1/2} = \left(\langle p | r^2 | p \rangle + \langle q | r^2 | q \rangle - 2 \langle p | r^2 | p \rangle \langle q | r^2 | q \rangle \mp 2 |\langle p | \mathbf{r} | q \rangle|^2 \right)^{1/2}. \quad (15.8)$$

Los primeros tres términos de la derecha de esta expresión representan la distancia promedio esperada; pero el último término es una interferencia cuántica presente solo entre estados entrelazados. Este término de interferencia cuántica hace que las partículas de los estados simétricos se encuentren más próximas, mientras que ocurre lo opuesto para las partículas correspondientes a estados antisimétricos.

Volvamos al tema que nos ocupa, que es la simetría de la función de onda para un sistema de dos o más partículas. Del experimento, resulta que en la Naturaleza un sistema de partículas idénticas tiene una simetría definida para su función de onda total. Esto da lugar a un nuevo postulado:

Octavo Postulado: En la Naturaleza, existen solo dos tipos de partículas: los bosones que tienen spin entero y los fermiones que tienen spin semientero. La función de onda de un sistema de bosones idénticos es simétrica; mientras que la función de onda de un sistema de fermiones idénticos es antisimétrica.

Los *bosones* son las partículas de spin entero, como los mesones, el fotón, etc. Los *fermiones* son partículas de spin semientero, como el electrón, protón, neutrón, etc. El construir funciones de onda simétricas o antisimétricas para muchas partículas no es una labor simple. Debido a ello, se desarrolló un esquema formal denominado *segunda cuantificación* que permite trabajar con sistemas de muchas partículas idénticas

respetando su simetría. No discutiremos la segunda cuantificación, ya que corresponde a un segundo curso de Mecánica Cuántica.

15.1.2. El principio de exclusión de Pauli

Aunque ya lo habíamos dicho, vale la pena mostrarlo. Hagamos $p = q$ en la ec. (15.7),

$$\Psi_{pp}^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_p(1)\varphi_p(2) - \varphi_p(2)\varphi_p(1)] = 0. \quad (15.9)$$

Si bien también ya fue comentando, una duda válida es qué representan p y q . Estas cantidades son los estados cuánticos del sistema, lo cual indica el conjunto de números cuánticos que definen al estado. Por ejemplo, para un átomo de hidrógeno, podemos escribir al estado cuántico del electrón como $|nlm_\ell sm_s\rangle = |e\rangle$. En este ket “ e ” representa al conjunto de números cuánticos $nlm_\ell sm_s$. En forma análoga p , q , etc., representan algún conjunto de número cuánticos. Si solo uno de los números cuánticos es diferente, alcanza para que la función de onda antisimétrica no sea nula.

Solo un sistema de fermiones idénticos tiene una función de onda antisimétrica. Al tomar dos cualesquiera de ellos, comprobamos que dos fermiones no pueden tener el mismo conjunto de números cuánticos en el mismo instante de tiempo. Esta afirmación es lo que se conoce como *principio de exclusión de Pauli*.

Naturalmente, cuando escribimos que un sistema de fermiones debe tener una función de onda completamente antisimétrica, por “sistema” indicamos un conjunto de partículas cuya distancia entre las ellas es comparable con la incertidumbre en la posición que resulta del principio de incertidumbre de Heisenberg. Por ejemplo, si tenemos un átomo de helio, la función de onda total de los dos electrones del átomo debe ser antisimétrica. Pero podemos tener dos o más átomos de helio, cuyo par de electrones se encuentren en el mismo estado cuántico. Esto no implica ninguna contradicción, pues cuando los átomos están lo suficientemente separados, aún tratándose de sistemas idénticos, podemos distinguir un átomo del otro.

Un modo alternativo para saber cuándo debemos simetrizar o antisimetrizar la función de onda, es viendo el grado de “solapamiento” entre las funciones de onda de cada partícula: la función de onda de partícula independiente, tiene una extensión espacial. Si

esta función de onda tiene un trozo que se superpone con la función de onda de otra partícula idéntica, entonces debemos tener en cuenta la simetría de la función de onda.

El carácter fermiónico o bosónico de las partículas está dado por el spin de las mismas. Cuando tenemos un sistema de partículas, éstos muestran un comportamiento cuasi-fermiónico o cuasi-bosónico dependiendo el momento angular total. Por ejemplo, el 3He tiene un momento angular total semi-entero y se comporta como un líquido cuántico de fermiones. Por otra parte, el 4He con momento angular entero, lo hace como bosón. Cuando nos referimos al carácter cuasi-fermiónico, tenemos un conjunto de fermiones que se comportan como un todo (por ej. 3He), ya que esa suma de partículas posee un momento angular total semi entero. En el caso del 4He , tenemos un conjunto de fermiones que se comportan como un todo, como un bosón. Como los bosones tienen spin entero, nunca un conjunto de bosones puede formar un todo como un sistema de cuasi-fermiones.

15.2. Entrelazamiento cuántico

Volvamos a los estados simétricos y al estado antisimétrico de un sistema de dos partículas. Ahora, los agruparemos como sigue,

$$\Psi_{pp}^{(+)} = \varphi_p(1) \varphi_p(2), \quad (15.10)$$

$$\Psi_{qq}^{(+)} = \varphi_q(1) \varphi_q(2). \quad (15.11)$$

Estos dos estados no están entrelazados, mientras que los estados,

$$\Psi_{pq}^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_p(1) \varphi_q(2) + \varphi_q(1) \varphi_p(2)], \quad (15.12)$$

$$\Psi_{pq}^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_p(1) \varphi_q(2) - \varphi_q(1) \varphi_p(2)], \quad (15.13)$$

muestran lo que se denomina “entrelazamiento cuántico”. En forma más específica, en el estado $\Psi_{pp}^{(+)}$ la partícula 1 se encuentra en el estado p , al igual que la partícula 2. Como es una función de onda producto, podemos separar las partículas 1 y 2, manteniendo cada una su estado cuántico. Análogamente para $\Psi_{qq}^{(+)}$ para el estado q . Pero en los estados entrelazados $\Psi_{pq}^{(+)}$ y $\Psi_{pq}^{(-)}$, tanto la partícula 1 como la 2, comparten los estados p y

q . Naturalmente, las consideraciones de la sección anterior siguen siendo válidas y de ahí vemos que el único estado cuántico para un sistema de dos fermiones es un estado entrelazado. En lo que sigue y por simplicidad, pensaremos que tenemos un sistema de dos fermiones idénticos.

Quizá el mejor ejemplo de estado entrelazado es el de dos electrones (o cualquier otro fermión de $\text{spin}=1/2$). Recordemos posibles estados de spin para un sistema de este tipo (ver las ecs. 11.23),

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= |1/2, 1/2\rangle, \\ |1, -1\rangle &= |-1/2, -1/2\rangle, \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1/2, -1/2\rangle + |-1/2, 1/2\rangle), \\ |0, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1/2, -1/2\rangle - |-1/2, 1/2\rangle). \end{aligned} \quad (15.14)$$

Las tres primeras son simétricas, mientras que la última es antisimétrica. Existe aquí un punto que puede conducir a un equívoco: como tenemos un sistema formado por dos fermiones idénticos, la función de onda total debe ser antisimétrica. La función de onda total es el producto de la parte espacial, angular y de spin. Si la parte de spin es simétrica, entonces nos queda la parte espacial y angular: una de las dos debe ser antisimétrica y la restante simétrica. Si tenemos una función de onda producto, cada factor del producto debe tener una simetría definida y el producto en sí, debe ser antisimétrico. De modo que debemos considerar los cuatro estados que mostramos en las ecs. (15.14).

Si tomamos el estado $|1, 1\rangle$ (o el estado $|1, -1\rangle$) y separamos las partículas, sabemos de antemano que la proyección de spin de cada partícula es $+1/2$ (o $-1/2$ para el estado $|1, -1\rangle$). Si tenemos el estado $|1, 1\rangle$ y medimos la proyección de spin de las partículas individuales, solo podemos tener como resultado una proyección de spin igual a $+1/2$. Si consideramos ahora el estado $|1, 0\rangle$ (o $|0, 0\rangle$), es porque medimos el spin total y su proyección y obtenemos los valores 1 y 0. Ahora bien, si separamos las partículas y medimos su proyección de spin, podemos obtener $+1/2$ ó $-1/2$, con una probabilidad de un 50% para cada proyección. A diferencia de lo que ocurre con los estados $|1, 1\rangle$ y $|1, -1\rangle$, los estados $|1, 0\rangle$ y $|0, 0\rangle$ se encuentran entrelazados, la partícula "1" puede tener proyección de spin $1/2$ ó $-1/2$, con la misma probabilidad. Lo mismo para la partícula "2".

En cierta forma, pensamos a un estado entrelazado como una nueva entidad, donde la identidad individual de cada partícula se diluye en un sistema nuevo, el estado entre-

lazado.

15.2.1. Discusión del entrelazamiento cuántico - La paradoja EPR

Hasta este punto, hemos tratado de explicar qué entendemos por un estado cuántico entrelazado. Cuando trabajamos con suma de spines encontramos naturalmente estados cuánticos entrelazados y eso no nos llamó la atención. El lector debe advertir que detrás del entrelazamiento cuántico existe alguna dificultad que aún no hemos expuesto. Veremos enseguida que se trata quizá del tema más complejo de la Mecánica Cuántica. El término fue nombrado por primera vez en alemán *Quantenverschränkung*. Para el hispanohablante la palabra alemana se ve complicada, pero debemos advertir que la física del problema lo es aún más.

Consideremos el siguiente experimento hipotético²⁰. Dado un sistema de dos electrones, cuya función de onda de spin viene dada por $|0, 0\rangle$, analizamos la desintegración de dicho sistema. Pensamos que los electrones se mueven en la misma dirección, pero con sentidos opuestos. Sabemos que la función de onda de spin está dada por un estado entrelazado, en que cada partícula puede tener una proyección de spin $+1/2$ ó $-1/2$, con la misma probabilidad. Una vez que los electrones se separan una distancia considerable (pueden ser algunos metros o algunos millones de parsecs, a los efectos del experimento es lo mismo), medimos la proyección de spin de uno de los electrones. Supongamos que obtenemos el valor $1/2$. En el otro extremo, un observador solo puede obtener el valor $-1/2$ para la proyección del otro electrón. Este experimento se conoce como la paradoja de Einstein, Podolsky y Rosen (en lo sucesivo EPR).

Quizá el lector impaciente sigue preguntándose dónde está el problema. Cuando se propuso la paradoja EPR se debatía sobre dos interpretaciones de la mecánica cuántica. La interpretación denominada ortodoxa, afirma que al medir el primer electrón cada

²⁰A veces se habla de experimento mental. Por experimento hipotético o mental, nos referimos a la interpretación de la teoría sobre un posible experimento, aún cuando la realización práctica de dicho experimento no fue hecha. Como ejemplo, durante mucho tiempo se discutió el experimento de la doble rendija con electrones como un experimento mental, pero como hemos discutido en el Cap. 2, el experimento pudo ser realizado

proyección de spin tiene la misma probabilidad y es el acto de medir lo que determina el colapso de la función de onda y por lo tanto la proyección de spin. Cuando eso ocurre, el resultado de la medida para el segundo electrón está predeterminado. Supongamos que un observador realiza la medida de la proyección de spin del segundo electrón y además que este segundo electrón se encuentra lo suficientemente lejos como para que, aún transmitiendo la información a la velocidad de la luz, no haya tiempo para que la información de la medida del primero llegue antes de la medida del segundo. Si el primero tiene proyección de spin $+1/2$, ¿cómo se entera el segundo que debe tener proyección $-1/2$? El transmitir la información en forma instantánea viola el principio de localidad.

La segunda interpretación, que era la de Einstein, es que en todo momento el spin de cada electrón estaba determinado. En ese caso, no existe ninguna contradicción entre el resultado y la velocidad de transmisión de la información. Esta interpretación supone que la Mecánica Cuántica es una teoría incompleta, ya que no puede predecir el valor de la proyección de spin antes de medirlo. Durante muchos años, la visión ortodoxa y la de una teoría incompleta, convivieron en el mundo científico, con adherentes para cada interpretación. Hacia los años sesenta, John S. Bell realizó un análisis muy refinado de la Mecánica Cuántica, escribiendo un conjunto de desigualdades que por medio del experimento permiten dirimir cuál de las dos interpretaciones es la correcta. El resultado experimental debió esperar hasta los años setenta, pero el resultado fue categórico y respaldó la visión ortodoxa.

De lo escrito, resulta que los estados entrelazados poseen este extremadamente peculiar comportamiento. Ya hemos visto que ciertas propiedades cuánticas son contraintuitivas. Sin embargo, el comportamiento cuántico de los estados entrelazados es por mucho el más difícil de digerir. Notemos que el entrelazamiento cuántico es la base de tecnologías en fase de desarrollo, como la computación cuántica, la criptografía cuántica y lo que se da en llamar teleportación cuántica.

15.2.2. Noción de sistema cuántico

A lo largo de todo el libro, hemos empleado el término “sistema cuántico” (y muchas veces por simplicidad se escribió solo “sistema”). La idea de un sistema cuántico es intuitiva: se trata de un conjunto de partículas que requieren de un tratamiento cuántico

para su estudio. Sin embargo, como casi todo en Mecánica Cuántica, al profundizar en su comprensión, se torna más intrincado y requiere de una discusión específica.

Expongamos la dificultad en el concepto de sistema cuántico. Al comienzo de este capítulo se estableció que la función de onda de un sistema (cuántico) de partículas era simétrica o antisimétrica, dependiendo de si el sistema estaba integrado por bosones o fermiones, respectivamente. Sin embargo, si tenemos dos átomos de helio la función de onda de los dos electrones de cada átomo debe ser antisimétrica, pero no debemos antisimetrizar una función de onda del conjunto de los cuatro electrones de los dos átomos. Nuestro argumento es que como los átomos se encuentran lo suficientemente lejos entre sí, no existe solapamiento entre sus funciones de onda y de este modo pensamos que cada átomo forma un sistema cuántico independiente. Luego, discutimos el entrelazamiento cuántico y encontramos que un sistema de dos partículas mantienen su entrelazamiento aún cuando se encuentran considerablemente separadas. Esto suena contradictorio: decimos que los átomos de helio forman dos sistemas independientes, pues están separados; pero para el estado entrelazado la separación no importa y siguen formando un único sistema.

Una vez más, la explicación de esta aparente contradicción resulta de un juego sutil de conceptos, donde la medida juega un papel importante. Un sistema cuántico resulta de un conjunto de partículas cuya proximidad es similar o menor a la incertidumbre en la posición que resulta del principio de Heisenberg. Una vez establecido el sistema se mantiene como tal, aún cuando las partículas se separan. Separadas o no, la correlación cuántica, esto es lo que determina que debemos construir una función de onda simétrica o antisimétrica cuando se trata de partículas idénticas; se mantiene hasta que las partículas son medidas.

Demos un ejemplo. Supongamos dos electrones próximos entre sí, cuya función de onda es antisimétrica. Separamos los electrones 10 cm y siguen teniendo una función de onda antisimétrica. Ahora los comparamos con otros dos electrones separados por 10 cm, pero que provenían de dos fuentes lejanas la una de la otra. Estos últimos no tienen una función de onda antisimétrica. Ahora medimos a los electrones de la función de onda antisimétrica y separados por 10 cm. Al hacerlo, se pierde la correlación cuántica entre las partículas y el estado final es comparable al del segundo par de electrones. El análisis de este ejemplo debe aclarar la aparente contradicción entre los dos átomos de

helio y el par de partículas entrelazadas.

En resumen, un sistema cuántico se forma por un conjunto de partículas próximas entre sí. El criterio de proximidad lo da el principio de incertidumbre de Heisenberg. El carácter de sistema cuántico se mantiene aún cuando las partículas se separan, pero se pierde al medir las partículas, esto es, cuando el sistema cuántico entra en contacto con un sistema clásico, que es el instrumento de medida.

15.3. Elementos de información cuántica

Al colocar en el título la palabra “elementos”, se buscó advertir al lector sobre lo modesta de la descripción que sigue, a pesar de la enorme importancia del tema. No se pretende dar una visión general o abarcativa del tema, sino más bien un fragmento parcial de una disciplina relevante y potencialmente central de la investigación científica. Debe indicarse que todo lo escrito hasta ahora en este libro, fueron temas que se discuten desde hace casi cien años. Por ejemplo, la paradoja EPR fue propuesta en 1935. Cuando un tema es discutido durante mucho tiempo, el tema pasa por una cierta depuración en que se pueden diferenciar claramente los elementos esenciales de los accesorios. Cuando un tema está en plena discusión, no sabemos aún cuáles son las variables relevantes y eso hace que el tema se encuentre aún en un estado de cierta anarquía. Es por ello que fue el tema elegido para cerrar este trabajo, pues muestra que luego del aprendizaje que supuso el curso, se puede llegar a un tema abierto, donde todos son bienvenidos a participar de la crítica y la discusión.

En el presente, muchos de los desafíos científicos más relevantes implican discusiones interdisciplinarias. Las discusiones interdisciplinarias son generalmente difíciles pues es poco probable que una persona sea experta en dos o más disciplinas. Tanto la teoría de la Información, como la Mecánica Cuántica son áreas del conocimiento complejas en sí mismas y combinadas lo son aún más. La idea de qubit que sigue, es un excelente ejemplo de ello.

15.3.1. Qubit y estados de Bell

En la computación convencional (o no-cuántica) la menor unidad de información es el bit. Un bit puede valer 0 ó 1. En abstracto lo podemos caracterizar así. Pero una computadora es un objeto físico real y existen diferentes modos de implementar un bit. El más simple e intuitivo es que el “1” sea un pequeño pulso de corriente y el “0” sea la ausencia de corriente.

Nota para electrónicos: en el párrafo de arriba decimos que un bit puede implementarse físicamente por medio de un pulso de corriente para el “1” y ausencia de la misma para el “0”. En el párrafo sólo se quiso expresar un modo posible para realizar físicamente los ceros y unos. En una computadora real, los unos y ceros se materializan por tensión, no por corriente. El sistema maneja una tensión máxima. Solo para fijar ideas, digamos que es de 3 volt. Llevados por un análisis teórico, diríamos que 3 volt es un “1” y 0 volt es un “0”. Sin embargo, un sistema físico real no es tan perfecto. En la práctica, una tensión de entre 0 a 0.7 volt se toma como “0”, más de 2 volt como “1” y los valores intermedios son descartados. Una computadora real repite y compara los resultados varias veces hasta lograr consistencia en los mismos. Digamos que se compara a sí misma. Este sistema de realimentación es lo que determina que bajo las mismas condiciones, se obtenga siempre el mismo resultado.

El menor elemento de información en computación cuántica es el qubit (*q*uatum bit, bit cuántico). Un qubit es cualquier estado de un sistema cuántico de dos niveles. Dados,

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (15.15)$$

Definimos un qubit como,

$$\boxed{|q\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad \text{con} \quad \alpha^2 + \beta^2 = 1} \quad (15.16)$$

Al lector le debe resultar obvio que en lo formal, las expresiones son idénticas al de un sistema de spin-1/2 (ver las ecs. 10.22). No usamos “up” y “down”, pues como dijimos, el qubit es un estado cuántico de cualquier sistema cuántico que tenga dos niveles. El de spin-1/2 es el que hemos estudiado, pero no es el único. Buscamos una notación amigable con la computación convencional y por ello en lugar de up y down, designamos los estados puros como 0 y 1. De este modo, así como en la computación convencional el bit puede ser un pulso de corriente; en la computación cuántica el qubit puede ser un

estado mezcla de spin de un sistema de spin-1/2. Los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$ son qubits en sí mismos, pues representan el caso particular de $\alpha = 1 \wedge \beta = 0$ y $\alpha = 0 \wedge \beta = 1$, respectivamente. Es obvio que el estado $|q\rangle$ representa tanto a estados puros, como a estados mezcla.

Vale la pena enfatizar lo que hemos aprendido sobre los estados cuánticos. Si medimos un qubit $|q\rangle$, éste colapsará en un estado $|0\rangle$, con una probabilidad de $P_0 = |\alpha|^2$ ó en un estado $|1\rangle$, con una probabilidad de $P_1 = |\beta|^2$.

Construyamos ahora la base de un sistema de dos qubits. Para ello, realizamos el producto directo de los estados de la base de un qubit:

$$|0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |0\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (15.17)$$

Solo a título informativo, al primer ket de este producto se lo suele designar como “qubit de control”, mientras que al segundo como “qubit blanco”.

Los estados dados por las expresiones (15.17), constituyen una base. Otra base posible resulta de una combinación lineal de estos estados, que se denominan “estados de Bell”, dados por,

$$|B0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |B1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad |B2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |B3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (15.18)$$

Notemos que los estados de Bell son ortonormales, por lo cual cualquier estado de dos qubits se puede expresar como una combinación lineal de estados de Bell. A diferencia de los estados puros, los de Bell son estados entrelazados. Una de las particularidades de estos estados es que son diagonales para los operadores $\hat{S}_z(1)\hat{S}_z(2)$ y $\hat{S}_x(1)\hat{S}_x(2)$. Si bien no ahondaremos en esta línea de trabajo, estos operadores se emplean para manipular los qubits.

15.3.2. Notación para dos o más qubits

En las ecs. (15.17) y (15.18), mostramos dos bases posibles para un sistema de dos qubits. Como hemos mostrado varias veces, las diferentes notaciones fueron desarrolladas por conveniencia, ya que resultan más cómodas para ciertos problemas particulares. La elección obvia de la base está dada por las ecs. (15.17); mientras que para los cálculos que conducen a las llamadas desigualdades de Bell, que permiten una comprobación experimental del entrelazamiento cuántico, es más conveniente la base dada por las ecs. (15.18).

En lo que sigue, es conveniente mostrar una tercera base, donde se muestra en forma explícita el estado cuántico de cada qubit que integra el par.

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |01\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |11\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (15.19)$$

En el resto de este capítulo, emplearemos siempre esta base. Notemos que los estados $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$ y $|11\rangle$ son estados puros. Al igual que estos estados, una combinación lineal adecuadamente normalizada de estos estados puede ser el estado físico de dos qubits. En este último caso, se trataría de un estado mezcla.

La extensión a un número n de qubits es obvia. La notación naturalmente resulta,

$$|i_1, i_2, \dots, i_n\rangle.$$

Estos estados puros deben estar normalizados. Ejemplos de estos estados pueden ser, $|0, 0, 1, 0, \dots, 1\rangle$, $|1, 1, 1, 1, \dots, 0, \dots, 0\rangle$, etc.

15.3.3. Puertas cuánticas

Debemos mostrar un conjunto de herramientas para manipular los qubits. Es conveniente introducir parte del vocabulario de la información cuántica. En el vocabulario puramente cuántico, hablamos de *operadores* que actúan sobre estados. Al operador lo llamaremos ahora *puerta cuántica*. Esta puerta cuántica u operador, puede o no tener un

observable asociado. La sucesión de un conjunto de puertas cuánticas (acción de varios operadores sobre el mismo estado) se denomina *circuito cuántico*. Veamos ahora algunas puertas cuánticas que actúan sobre un qubit:

- *Identidad y puerta de Pauli*

$$\begin{aligned}
 I &= |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|, \\
 X &= |1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1|, \\
 Y &= -|1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1|, \\
 Z &= |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|.
 \end{aligned}
 \tag{15.20}$$

Notemos que en notación matricial, las puertas cuánticas X , Y y Z están vinculadas con las matrices de Pauli de las ecs. (10.40), según: $\sigma_x = X$, $\sigma_y = -iY$ y $\sigma_z = Z$. También, para ser consecuentes con la notación del tema, omitimos el “sombrero” ($\hat{}$) en los operadores.

- *Puerta de Hadamard*

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| - |1\rangle\langle 1|).$$

Alternativamente, en notación matricial,

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.
 \tag{15.21}$$

- *Puerta NOT controlada (Controlled-NOT gate)*. Esta puerta actúa sobre dos qubits. Dado un sistema de dos qubits, $|i, j\rangle$ con $i, j = 0$ ó 1 . El valor de i no cambia. Si $i = 0$ entonces j no cambia; pero si $i = 1$, entonces j se invierte (si valía 1 pasa a 0, y si valía 0 pasa a 1). La expresión explícita de esta puerta es,

$$C_{\text{NOT}} = |00\rangle\langle 00| + |01\rangle\langle 01| + |11\rangle\langle 10| + |10\rangle\langle 11|.$$

En notación matricial,

$$C_{\text{NOT}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.
 \tag{15.22}$$

Cuando tenemos un sistema de n -qubits y una puerta cuántica U actúa sobre el qubit i , escribimos la acción del operador como sigue:

$$I \otimes I \otimes \dots \otimes U \otimes I \otimes I \otimes I,$$

donde es obvio que tenemos el producto de n -puertas cuánticas, ocupando U el lugar i .

Existe un punto sobre la notación y su interpretación física que es mejor aclarar para evitar errores. Consideremos estados de dos qubits. Los estados,

$$|00\rangle, \quad |10\rangle, \quad |01\rangle \quad \text{y} \quad |11\rangle,$$

son estados no entrelazados. La primera posición corresponde a la partícula 1 y la segunda a la 2. Cada partícula tiene un único estado cuántico, por lo cual no existe entrelazamiento.

Consideramos ahora combinaciones lineales de estos estados. Sin pérdida de generalidad, consideramos solo combinaciones simétricas. Dados los estados,

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) \quad \text{y} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle),$$

son estados entrelazados. Tomemos el primero: si medimos la partícula 1 y obtenemos el valor 0, la partícula 2 solo puede valer 0. Pero la partícula 1 puede tomar también el valor 1 (en este caso con la misma probabilidad de tomar el valor 0).

Finalmente, los estados,

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle + |11\rangle) \quad \text{y} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle + |00\rangle),$$

al igual que,

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |11\rangle) \quad \text{y} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |00\rangle),$$

son estados no entrelazados. Cuando tenemos la suma de dos términos, si una de las partículas está en un único estado cuántico, entonces no hay entrelazamiento cuántico. Tomemos un caso para explicarlo mejor. Dado el estado,

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |11\rangle),$$

la partícula 2, está en el estado cuántico 1. Si mido el estado cuántico de la partícula 2, solo podemos obtener 1 y no podemos decir nada del valor de la partícula 1, cuyos valores pueden ser 0 ó 1, con la misma probabilidad.

15.3.4. Teletransportación cuántica

El lector frente al título de esta sección puede experimentar cierta suspicacia, pues la teletransportación remite a la ciencia ficción. Luego, en este primer párrafo es conveniente explicar por qué se trata del título correcto. En primer lugar, en la teletransportación cuántica lo que se transmite es *información cuántica*, no materia. Sin embargo, lo verdaderamente relevante resulta del llamado *Teorema de no clonación* de la mecánica cuántica [14]. Este teorema data del año 1982, y establece que es imposible crear una copia idéntica de un estado cuántico desconocido. De este modo, como resultado de la teletransportación cuántica el estado cuántico del sistema original es destruido y la información es transmitida a otro conjunto de partículas idénticas, cuyo resultado final es *exactamente* el del sistema original. Debe notarse que cuánticamente la idea de dos partículas idénticas no es una abstracción, sino un hecho real. De este modo, el estado cuántico de un sistema de partículas se transmite a otro conjunto de partículas, que terminan en el mismo estado cuántico que el del sistema original, que debió ser destruido para poder crear el sistema nuevo. Es por ello que se habla de teletransportación.

Vayamos al ejemplo más simple de teletransportación. Debemos considerar los siguientes elementos:

- Observador A
- Observador B
- Un estado cuántico de una partícula que deseamos teletransportar
- Una fuente que genere un estado entrelazado de dos qubits (dos partículas).

Por “observador” nos referimos a personas. Los observadores A y B se encuentran separados varios metros, al igual que de la fuente del estado entrelazado.

En primer lugar, el observador A posee un estado cuántico de una partícula que desea teletransportar. Escribimos dicho estado como,

$$\boxed{|r\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle} \quad (15.23)$$

La fuente genera un estado entrelazado de dos partículas dado por,

$$|ff\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle). \quad (15.24)$$

Aunque debería ser obvio, es conveniente enfatizar que las tres partículas puestas en juego, son partículas idénticas.

La fuente del estado entrelazado envía una de las partículas al observador A y la otra al observador B. La partícula que llega al observador A, se aproxima al estado cuántico $|r\rangle$ lo suficiente como para que exista un solapamiento entre las funciones de onda del estado $|r\rangle$ y del estado entrelazado $|ff\rangle$.

$$|r\rangle \otimes |ff\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha|000\rangle + \alpha|011\rangle + \beta|100\rangle + \beta|111\rangle). \quad (15.25)$$

Notemos en este punto, que esta función de onda es una función de onda producto entre el estado de una partícula $|r\rangle$ y el estado entrelazado $|ff\rangle$, pero el sistema de tres partículas no se encuentra entrelazado. Dos de estas tres partículas, son controladas por el observador A y una por el observador B ²¹. Cualquiera de los dos observadores puede actuar sobre su sistema, ocasionando obviamente un cambio en la función de onda. Recordemos que el objetivo es teletransportar el estado cuántico $|r\rangle$ de A a B. Lo debemos enfatizar: se transporta el estado cuántico, no la partícula. Físicamente, la partícula en poder de B, provino de la fuente del estado entrelazado $|ff\rangle$.

Para comenzar la teletransportación, el observador A actúa sobre el estado $|r\rangle \otimes |ff\rangle$ empleando un conjunto de puertas cuánticas. No discutiremos la lógica que nos lleva a usar esas puertas cuánticas, sino que lo tomaremos como una prescripción para llegar al resultado correcto. El lector interesado puede encontrar una discusión más completa en el libro de E. Rieffel y W. Polak [11]. El observador A actúa sobre el estado $|r\rangle \otimes |ff\rangle$, con el fin de lograr *un entrelazamiento cuántico particular para el sistema de tres partículas*. Realiza las siguientes operaciones:

$$\begin{aligned} (H \otimes I \otimes I)(C_{\text{NOT}} \otimes I)|r\rangle \otimes |ff\rangle &= (H \otimes I \otimes I)\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha|000\rangle + \alpha|011\rangle + \beta|110\rangle + \beta|101\rangle) \\ &= \frac{1}{2}[\alpha(|000\rangle + |011\rangle + |100\rangle + |111\rangle) \\ &\quad + \beta(|010\rangle + |001\rangle - |110\rangle - |101\rangle)] \\ &= \frac{1}{2}[|00\rangle(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) + |01\rangle(\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle) \\ &\quad + |10\rangle(\alpha|0\rangle - \beta|1\rangle) + |11\rangle(\alpha|1\rangle - \beta|0\rangle)], \quad (15.26) \end{aligned}$$

²¹Ya hemos advertido que este es un tema interdisciplinario y como tal, mezcla el vocabulario de las dos disciplinas. Cuando escribimos que el observador “controla” una o dos partículas, indicamos simplemente que puede actuar sobre ellas.

por conveniencia, llamamos $|ttt\rangle$ a este estado,

$$|ttt\rangle = \frac{1}{2} [|00\rangle(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) + |01\rangle(\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle) + |10\rangle(\alpha|0\rangle - \beta|1\rangle) + |11\rangle(\alpha|1\rangle - \beta|0\rangle)]. \quad (15.27)$$

Ahora tenemos un estado entrelazado de tres partículas. Este es un punto central y algo sutil: el observador A al actuar sobre sus *dos* partículas, logra un estado entrelazado de *tres* partículas.

En el paso siguiente, el observador A **mide** el estado cuántico de sus dos partículas. Los estados cuánticos que puede obtener son: $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$ o $|11\rangle$; todos con la misma probabilidad.

Nota para distraídos: Supongamos que medimos el estado cuántico $|r\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$. Al medir, colapsa la función de onda y los estados que podemos obtener son $|0\rangle$ con probabilidad $|\alpha|^2$ o $|1\rangle$ con probabilidad $|\beta|^2$. De este modo, si medimos el estado cuántico de dos partículas correspondientes a la función de onda $|ttt\rangle$, todos los posibles estados son los que se indican en el párrafo de arriba.

Ahora, el observador A comunica por medios clásicos el resultado de su medida al observador B. Por ejemplo, esto lo puede hacer enviándole un mensaje de texto desde su celular. Supongamos que el resultado es $|00\rangle$. Entonces parte de la función de onda de tres partículas $|ttt\rangle$ colapsó y ahora sabemos que vale,

$$|ttt\rangle_{\text{después de la medida}} = |00\rangle(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle). \quad (15.28)$$

Esto significa que la función de onda de la partícula en poder del observador B, es,

$$|r\rangle_B = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle,$$

que es exactamente la función de onda original de A (ver ec. 15.23). El observador A ya no tiene ninguna de sus partículas en ese estado, pues acabamos de afirmar que se encuentran en el estado $|00\rangle$.

Supongamos ahora que el observador A, mide $|01\rangle$. De la ec. (15.27), resulta entonces que la partícula en poder del observador B, se encuentra en el estado cuántico:

$$|r\rangle_B = \alpha|1\rangle + \beta|0\rangle.$$

Pero el observador B (quien es un experto en mecánica cuántica), conoce la fórmula dada por la ec. (15.27) y ya leyó el mensaje de texto que le envió A, con la información

Cuadro 15.1: Acción del observador B para obtener el estado cuántico teletransportado. Notemos que los decodificadores o puertas cuánticas fueron definidas en las ecs. (15.20).

Estado de B	información de A	Decodificador	Estado final
$\alpha 0\rangle + \beta 1\rangle$	$ 00\rangle$	I	$\alpha 0\rangle + \beta 1\rangle$
$\alpha 1\rangle + \beta 0\rangle$	$ 01\rangle$	X	$\alpha 0\rangle + \beta 1\rangle$
$\alpha 0\rangle - \beta 1\rangle$	$ 10\rangle$	Z	$\alpha 0\rangle + \beta 1\rangle$
$\alpha 1\rangle - \beta 0\rangle$	$ 11\rangle$	Y	$\alpha 0\rangle + \beta 1\rangle$

de que su estado es $|01\rangle$. Entonces, el observador B actúa con la puerta cuántica X , obteniendo,

$$X|r\rangle_B = X(\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle) = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle,$$

y de este modo logra que su partícula se encuentre nuevamente en el estado dado por la ec. (15.23). Llamemos a la puerta cuántica “decodificador”, en el Cuadro 15.1, mostramos la acción que debe realizar el observador B, para que su partícula termine en el mismo estado cuántico de la partícula original de A.

Es importante hacer un resumen del procedimiento para entender qué ocurrió y por qué. Inicialmente A tiene una partícula en el estado cuántico $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$. Luego una fuente envía una partícula a A y otra a B, tal que esas dos partículas son parte de un estado cuántico entrelazado. Estas partículas son enviadas por medios convencionales y salvo que se trate de fotones, se mueven con una velocidad menor a la de la luz. Ahora A tiene dos partículas y B tiene una. Enseguida A pasa sus dos partículas por un conjunto ingeniosamente elegido de puertas cuánticas. Comienza entonces la parte cuántica indigerible desde el punto de vista clásico: la partícula entrelazada que le llega a A, se entrelaza con la partícula original del mismo observador, pero mantiene su entrelazamiento con la tercera partícula, la que está en manos de B. Luego A, mide el estado cuántico de sus dos partículas, causando el colapso de la función de onda. Cuando eso ocurre, conocemos el estado cuántico de la tercera partícula, la que está en mano de B. Y usando un decodificador adecuado, B puede transformar el estado cuántico de su partícula, en la original de A.

Alguien aún puede dudar: ¿si la partícula de B no era la partícula de A, ni tuvo contacto con ella, cómo pudo llegar a ella la información de α y β ? La respuesta es:

por el entrelazamiento cuántico. Es el entrelazamiento cuántico, algo que no podemos entender clásicamente, el responsable de que la partícula en manos de B, tenga esa información. Notemos que la partícula original en manos de A, sigue en manos de A, pero con otro estado cuántico, ya que el original fue destruido para transmitir la información. La partícula de B, provino de una fuente y lo que se transmitió fue información cuántica de "A a B". Pero ninguna partícula viajó de A a B.

A lo largo de estas líneas hemos hecho una descripción de la teletransportación cuántica sobre la base de nuestros conocimientos teóricos. La teletransportación cuántica fue verificada experimentalmente y podemos afirmar que estos resultados y su interpretación son correctos.

Corolarios:

- El teorema de no clonación dice que *dado* un estado cuántico desconocido, no podemos hacer una copia de él. Pero podemos preparar un conjunto de sistemas, todos en el mismo estado cuántico que también es desconocido.
- Supongamos que el Observador A, fabrica un número muy grande de sistemas todos en el mismo estado cuántico, que escribiremos como $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$. Mide la mitad de todos los sistemas. De esta medida, tiene un valor aproximado para $|\alpha|^2$ y para $|\beta|^2$. Con la otra mitad, se realiza el proceso de teletransportación. Si el número de sistemas es lo suficientemente grande, al medir el Observador B, obtendrá los mismos valores que A para $|\alpha|^2$ y para $|\beta|^2$.
- Si el observador B se impacienta y mide el estado cuántico de su partícula antes de que lo haga el observador A, B no tendrá ninguna información sobre los valores de $|\alpha|^2$ y $|\beta|^2$.
- *Comentario final:* Los valores de α y β , llegan a B, por la acción de A al medir el estado cuántico de sus dos partículas; como consecuencia del entrelazamiento cuántico.

15.3.5. Computación cuántica

Es casi inevitable que esta sección no satisfaga las expectativas del lector. La teletransportación cuántica es un tema particular que pudo ser abordado en su aspecto teórico. Por otra parte, la computación cuántica es una disciplina científica en sí misma y una introducción a la misma requiere de un curso como lo es el de Mecánica Cuántica. En lo que sigue, daremos algunos elementos y solo nombraremos un problema particular. Se busca ofrecer al lector una guía particular para estudiar el problema, en el caso de que se encuentre interesado en el mismo. Esta sección se basa en los trabajos de Mermin [8] y de Gerjuoy [5].

Como hemos mencionado, la computación convencional se basa en el sistema de dos valores denominado bit. La computación cuántica por su parte, se basa también en un sistema de dos valores denominado qubit. La diferencia entre ambas es que en un instante dado, un bit sólo puede tomar un valor; mientras que el qubit antes de ser medido tiene las dos componentes con una cierta probabilidad. Ésta última afirmación, empleando el vocabulario de la computación cuántica, suele indicarse como que “el qubit puede tener dos valores en el mismo instante”. Además, cuando se mide un bit, sólo se puede obtener 0 ó 1, en forma independiente del modo en que se efectúa la medida. Si medimos el bit y obtenemos el valor 1, al repetir la medida obtendremos el mismo valor. En el caso cuántico, supongamos que empleamos un sistema de dos niveles de spin para la implementación del qubit. Si medimos la proyección de spin sobre el eje $-z$, podemos obtener los valores $1/2$ ó $-1/2$. Supongamos que obtenemos el valor $1/2$. Si medimos nuevamente la proyección de spin sobre el eje $-z$ sólo podremos obtener el valor ya medido. Pero si medimos ahora la proyección de spin sobre el eje $-y$, nuevamente podremos obtener $1/2$ ó $-1/2$. Debe ser obvio para el lector que si llevamos adelante la medida sobre el eje $-y$ y volvemos a medir la proyección del spin sobre el eje $-z$, podemos obtener como resultado $1/2$ ó $-1/2$.

Hechas estas consideraciones, debemos señalar que por fines prácticos, el modo en que se mide el qubit debe ser siempre el mismo. Dicho esto, tiene sentido entonces nuestra expresión original para el qubit, dada por la ec. (15.16),

$$|q\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad \text{con} \quad \alpha^2 + \beta^2 = 1.$$

En la sec. 15.3.2, mostramos la base de estados puros de dos qubits. Para trabajar con

una potencial computadora cuántica, se debe elegir el número total de qubits. El estado cuántico de los qubits no tiene por qué ser un estado puro. En general, debemos pensar en un estado mezcla de los qubits de la base, una vez elegido el número de qubits. Llamemos $|\Psi_n\rangle$ a este estado mezcla formado por n -qubits. La evolución temporal del estado cuántico está dado por la ecuación de Schrödinger. Podemos dar cuenta de la evolución temporal del estado cuántico del sistema empleando el operador de evolución temporal (ver ec. 5.47),

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}, \quad (15.29)$$

de este modo,

$$\hat{U}(t)|\Psi_n\rangle_{t=0} = |\Psi_n\rangle_t. \quad (15.30)$$

En computación cuántica los operadores que actúan sobre el estado cuántico $|\Psi_n\rangle$, sólo pueden ser operadores unitarios, esto es, aquellos que conservan la norma del estado. De este modo la acción de estos operadores o puertas cuánticas como ya las hemos definido, son las operaciones que nos permiten construir el estado cuántico adecuado para resolver algún problema particular. La lógica es similar a la de un problema computacional convencional: se establecen condiciones iniciales, sobre estas condiciones se realizan un conjunto de operaciones que nos llevan al resultado que buscamos y finalmente se mide dicho resultado. En la preparación de $|\Psi_n\rangle_{t=0}$, se encuentran las condiciones iniciales, la acción de las puertas cuánticas nos llevan al resultado esperado y finalmente la medida nos da el resultado final. En la teletransportación cuántica empleamos esta lógica, aunque en ese caso el sustento no era una computadora cuántica, sino un sistema de tres partículas idénticas. Aún así, es una buena analogía pues en ese caso empleamos un sistema de tres partículas, donde para el estado de partícula independiente de cada una, teníamos solo dos posibles niveles cuánticos.

Para terminar, la encriptación de la información es un tema central del funcionamiento de las computadoras. Este procedimiento supone como elemento central el poder descomponer un número en factores primos. Esta operación, trivial para número pequeños, es difícil para los número “grandes” requeridos en la encriptación. La descomposición en factores primos empleando el llamado *algoritmo de Shor*, diseñado para su uso por medio de una futura computadora cuántica, es quizá el mejor ejemplo de la posible superioridad de las computadoras cuánticas sobre las computadoras convencionales. El lector interesado puede ver el artículo de Gerjuoy arriba citado, para encontrar una descripción

detallada de dicho algoritmo y su implementación por medio de una computadora cuántica. Desde el punto de vista teórico, se muestra que una computadora cuántica haría los cálculos de la descomposición en factores primos en un tiempo considerablemente menor que el de una computadora convencional.

Comentario final

Ya en primera persona, quisiera hacer un comentario como cierre de esta labor. Al comenzar a escribir este libro, mi objetivo fue brindar al alumno una herramienta para simplificar su búsqueda de información. Al escribir, noté que naturalmente surgían preguntas que valían la pena ser analizadas. Muchas veces, esas preguntas surgen en las clases mismas. Sin embargo, por muy interesantes que sean, generalmente no son registradas y terminan en el olvido. Estas dudas, hacen que uno revise la literatura y eso es muy interesante. En algunos casos, ciertos autores emplean algún ardid ingenioso para evadir el problema. Otras veces, solo se da una pista de la solución. Insistiendo un poco, siempre se encuentra algún autor que da la respuesta. Como escribí al comienzo, es muy difícil que del enorme caudal de libros de Mecánica Cuántica quede un problema sin ser abordado.

Pero no es este mi comentario final. Mi comentario final es lo maravilloso y afortunados que somos en poder dedicarnos al conocimiento. Al comenzar a escribir este libro, entendí que iba a volcar algunos años de los conocimientos adquiridos de mi experiencia al dictar la asignatura. Sin embargo, del análisis para escribirlo aprendí muchas cosas nuevas para mí. Fue reconfortante hacerlo e invito al estudiante a ser crítico y saber que cada vez que respondemos a una pregunta, surgen otras preguntas nuevas, más interesantes y más difíciles. Y es el perseverar en las preguntas, lo que nos hace humanos. Por cierto, lo interesante son las preguntas. Con el tiempo siempre encontraremos las respuestas.

Bibliografía

- [1] Baym, G. (1990). *Lectures on Quantum Mechanics*. Westview Press.
- [2] Bes, D. (2012). *Quantum Mechanics*. Berlín: Springer-Verlag.
- [3] Cohen-Tannoudji, C. y Diu By Laloë, F. (1977). *Quantum Mechanics*. Hermann and John Wiley & Sons.
- [4] Feynman, R. P. Leighton, R. B. y Sands, M. (2011). *The Feynman Lectures on Physics, Quantum Mechanics*. Basic Books.
- [5] Gerjuoy, E. (2005). Shor's factoring algorithm and modern cryptography. An illustration of the capabilities inherent in quantum computers. *American Journal of Physics* (73) 521-540.
- [6] Jackson, J. D. (1999). *Classical Electrodynamics*. John Wiley & Sons.
- [7] Landau, L. D. y Lifshitz, E. M. (1978). *Mecánica Cuántica no-relativista*. Editorial Reverté.
- [8] Mermin, N. D. (2003). From Cbits to Qbits: Teaching computer scientists quantum mechanics. *American Journal of Physics* (71) 23-30.
- [9] Merzbacher, E. (1970). *Quantum Mechanics (Second Edition)*. John Wiley & Sons.
- [10] Messiah, A. (1967). *Quantum Mechanics*. North-Holland.
- [11] Rieffel, E. y Polak, W. (2011). *Quantum Computing, a gentle introduction*. Massachusetts Institute of Technology.
- [12] Schaposnik, F. *Mecánica Cuántica I*. <https://sites.google.com/site/schaposnik/home>

- [13] Shankar, R. (1994). *Principles of Quantum Mechanics (second edition)*. Berlín: Springer-Verlag.
- [14] Wootters, W. y Zurek, W. (1982). A single quantum cannot be cloned. *Nature* (299) 802-803. Dieks, D. (1982). Communication by EPR devices. *Physics Letters A* (92) 271-272.

El autor

Bauer, Eduardo.

Licenciado en Física (1985), Facultad de Ciencias Exactas, UNLP y Doctor en Física (1990) por la misma institución. Estudios post doctorales (1992-1993) en el Instituto de Física Teórica de la Universidad de Tübingen, Rep. Fed. de Alemania. Actualmente es profesor adjunto de Mecánica Cuántica de la Fac. de Cs. Astronómicas y Geofísicas de la UNLP e Investigador Independiente del CONICET, con lugar de trabajo en el Instituto de Física La Plata. Su área de investigación es en el presente la física nuclear teórica aplicada a la astrofísica de objetos compactos.

Bauer, Eduardo

Mecánica cuántica para alumnos de Astronomía / Eduardo Bauer. - 1a ed. - La Plata : Universidad Nacional de La Plata ; EDULP, 2023.

Libro digital, PDF - (Libros de cátedra)

Archivo Digital: descarga

ISBN 978-950-34-2259-5

1. Física. 2. Mecánica Cuántica. I. Título.
CDD 520.7

Diseño de tapa: Dirección de Comunicación Visual de la UNLP

Universidad Nacional de La Plata – Editorial de la Universidad de La Plata

48 N.º 551-599 / La Plata B1900AMX / Buenos Aires, Argentina

+54 221 644 7150

edulp.editorial@gmail.com

www.editorial.unlp.edu.ar

Edulp integra la Red de Editoriales Universitarias Nacionales (REUN)

Primera edición, 2023

ISBN 978-950-34-2259-5

© 2023 - Edulp

e
exactas


edulp
EDITORIAL DE LA UNLP



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA