

FÍSICA CUÁNTICA



UNIVERSIDAD DE MURCIA

Departamento de Física

Miguel Ortuño Ortín

moo@um.es

Miguel Albaladejo Serrano

mikiman@fisimur.org



Índice general

Índice	III
Figuras	IV
Bibliografía	IV
Notas del autor	VI
1. Orígenes de la Física Cuántica	1
1.1. Radiación del cuerpo negro. Postulado de Planck	1
1.2. Efecto fotoeléctrico. Efecto Compton	2
1.3. Postulado de De Broglie	3
1.4. Modelo atómico de Bohr	4
1.5. Experimento de la doble rendija	5
1.5.1. Experimento con proyectiles (clásicos)	6
1.5.2. Experimento con ondas	7
1.5.3. Experimentos con proyectiles (cuánticos): electrones	8
A. Átomo de Rutherford	10
A.1. Potencia radiada	10
A.2. Conclusión	13
2. Ecuación de Schrödinger	14

1.	Paquetes de ondas	14
2.	Ecuación de Schrödinger	15
3.	Interpretación probabilística	17
4.	Operadores. Valores esperados	18
5.	Representación de momentos	22
5.1.	Función de onda en p como transformada de Fourier	22
5.2.	Teorema de Parseval	22
6.	Autovalores y autovectores	22
7.	Evolución temporal	23
3.	Problemas unidimensionales	25
1.	Introducción. Generalidades	25
1.1.	Ecuación de Schrödinger para potenciales constantes. Continuidades y discontinuidades	25
1.2.	Simetrías. Operador paridad	27
2.	Potencial escalón	28
2.1.	Reflexión parcial	28
2.2.	Reflexión total	30
3.	Pozo de potencial finito	31
3.1.	Estados ligados	31
3.2.	Coefficientes de transmisión	33
4.	Barreras de potencial	36
5.	Pozo de potencial infinito	37
5.1.	Centrado en el origen	37
5.2.	Pozo asimétrico	39
6.	Potenciales delta	42
4.	Estructura y postulados	43
1.	Preliminares. Funciones de onda	44

2.	Espacio de estados. Notación de Dirac	47
A.	Resumen de los postulados	49
A.1.	Descripción del estado de un sistema	49
A.2.	Descripción de magnitudes físicas	49
A.3.	Teoría de la medida	49
A.4.	Valores posibles de una medida	50
5.	Espín. Momentos Angulares	51
1.	Introducción	51
2.	Evidencia experimental	52
2.1.	Estructura fina de las líneas espectrales	52
2.2.	Efecto Zeeman anómalo	52
2.3.	Existencia de momentos angulares semienteros	53
3.	Postulados de Pauli	53
4.	Espín 1/2	54
5.	Descripción	55
6.	Momento angular total	58
7.	Suma de espines	59
8.	Método general	62
8.1.	Introducción	62
8.2.	Cambio de base	63
8.3.	Autovalores de J_z	64
8.4.	Autovalores de \mathbf{J}^2	64
8.5.	Autovectores de \mathbf{J}^2 y J_z	66

Índice de figuras

1.1. Ondas estacionarias del electrón	5
1.2. Dispositivo para el experimento de la doble rendija	6
1.3. Experimento de la doble rendija con proyectiles macroscópicos	7
1.4. Experimento de la doble rendija para un fenómeno ondulatorio	8
1.5. Experimento de la doble rendija con los electrones.	9
1.6. Curvas con interferencias suavizadas	11
3.1. Potencial escalón	28
3.2. Representación del coeficiente de transmisión T en función de $\alpha = V_0/E$	30
3.3. Pozo cuadrado de potencial	32
3.4. Representación de estados ligados en un pozo cuadrado	34
3.5. Barrera cuadrada de potencial	36
3.6. Pozo de potencial infinito centrado en el origen	37
3.7. Primeros estados separados según su forma: $\cos k_n x$ o $\sin k_n x$	40
3.8. Los cuatro primeros estados	41
5.1. Valores de M y autovectores asociados.	65
5.2. Valores de M y degeneración asociada.	65

Bibliografía

- [1] C. Cohen-Tannoudji. *Quantum Mechanics*, volume I.
- [2] C. Cohen-Tannoudji. *Quantum Mechanics*, volume II.
- [3] R. Ferrer. Mecánica Cuántica I. Apuntes Universidad de Chile.
- [4] R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands. *The Feynman lectures on Physics*, volume I. Pearson, 1963.
- [5] R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands. *The Feynman lectures on Physics*, volume III. Pearson, 1963.
- [6] F. J. Ynduráin Muñoz. *Mecánica Cuántica*. Alianza Editorial, 2003.

Notas del autor

Estas notas de clase están sacadas de la asignatura Física Cuántica, del 3º curso de la Licenciatura en Física de la Universidad de Murcia, impartida por Miguel Ortuño Ortín, al que el autor está agradecidísimo. Concretamente, se basan en el desarrollo de la asignatura 2003-2004.

Por supuesto, están sin terminar, están en **continuo desarrollo**, y agradeceré todas las sugerencias y comentarios que me mandéis a la dirección de correo de la portada.

Sin más, os dejo con Feynman.

Dijo una vez un poeta: “El Universo entero está contenido en un vaso de vino”. Probablemente nunca sabremos lo que quería decir, ya que los poetas no escriben para ser comprendidos. Pero es cierto que si miramos un vaso de vino lo suficientemente cerca, vemos el Universo entero. Ahí están las cosas de la física: el líquido que se arremolina y se evapora dependiendo del viento y del tiempo, las reflexiones en el vidrio, y nuestra imaginación agrega los átomos. El vidrio es un destilado de las rocas terrestres y en su composición vemos los secretos de la edad del universo y la evolución de las estrellas. ¿Qué extraño arreglo de elementos químicos hay en el vino? ¿Cómo llegaron a ser? Están los fermentos, las enzimas, los sustratos y los productos. Allí en el vino se encuentra la gran generalización: toda vida es fermentación. Nadie puede descubrir la química del vino sin descubrir, como lo hizo Louis Pasteur, la causa de muchas enfermedades. ¡Cuán vívido es el vino tinto que imprime su existencia dentro del conocimiento de quien lo observa! ¡Si nuestras pequeñas mentes, por alguna conveniencia, dividen este vaso de vino, este universo, en partes – física, biología, geología, astronomía, psicología, etc. . . , recuerden que la naturaleza no lo sabe! Así, reunamos todo de nuevo sin olvidar en última instancia para qué sirve. Dejemos que nos dé un último placer: ¡bébanselo y olvidense de todo!

Richard P. Feynman, 1918-1988

Orígenes de la Física Cuántica

Vamos a comenzar describiendo los experimentos que hicieron patente la necesidad de una nueva teoría física, que hoy en día conocemos como Física Cuántica, para explicar los fenómenos de la naturaleza.

1.1. Radiación del cuerpo negro. Postulado de Planck

Un *cuerpo negro* es, por definición, una cavidad que absorbe completamente toda la luz que llega a ella. Se trata de un concepto ideal, pero una buena realización del mismo es una cavidad con las paredes de negro y un pequeño orificio al exterior. Imaginemos dicho cuerpo negro con las paredes a una temperatura absoluta T . Podemos medir la intensidad de la radiación que sale de él por el pequeño orificio en función de la temperatura T y la frecuencia ν . En muy buena aproximación, dicha intensidad será igual a la que incide en las paredes del cuerpo negro.

A través de dos conceptos clásicos muy generales podemos predecir cómo debería de ser la intensidad en el marco de la teoría clásica. En primer lugar, el teorema de equipartición nos dice que la energía media por grado de libertad ha de ser igual a $k_B T$, siendo k_B la constante de BOLTZMANN. En segundo lugar, el número de grados de libertad del campo electromagnético en el interior de un cuerpo negro viene dado por el número de modos estacionarios. Teniendo en cuenta estos dos ingredientes, RAYLEIGH-JEANS dedujeron la ley que lleva su nombre y que nos dice que la intensidad de la radiación en función de la frecuencia es

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T \quad (1.1)$$

Esta teoría coincidía con los experimentos para frecuencias bajas ($T/\nu g_{j_1, j_2} 10^{-10}$ K s), pero fallaba para frecuencias altas. Además, la teoría tenía que ser incorrecta ya que predecía una energía total infinita, pues el número de modos diverge en el límite de altas frecuencias, mientras que la energía por modo se mantiene constante. Este resultado se conoce como *divergencia o catástrofe ultravioleta*.

PLANCK (1900,1901) propuso una fórmula de la intensidad de la radiación del cuerpo negro que se ajustaba perfectamente a los datos experimentales. Estaba basada en la proposición de que el intercambio energético entre las paredes del cuerpo negro y el campo electromagnético sólo podía realizarse en *cuantos de energía*, no de forma continua. PLANCK no llegó a proponer que la radiación electromagnética en sí estuviera cuantizada. El *cuanto de energía* o unidad energética elemental sería proporcional a la frecuencia ν y vendría dado por

$$\Delta E = h\nu \quad (1.2)$$

en donde h es una constante universal conocida como *constante de Planck*, cuyo valor es

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js.}$$

Cada modo propio de oscilación del campo electromagnético puede vibrar con una energía múltiplo entero del cuanto de energía. A una temperatura T , la probabilidad de que un modo tenga una energía E es proporcional al factor de Boltzmann $\exp\{-E/k_B T\}$ de modo que su energía media será:

$$E(\nu) = N(\nu) \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_n e^{-E_n/k_B T}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-E_n/k_B T}}, \quad E_n = nh\nu$$

Sumando la serie llegamos a:

$$E(\nu) = N(\nu) \frac{h\nu}{e^{h\nu/K_B T} - 1}$$

Esta expresión está de acuerdo con la teoría clásica, ecuación (1.1), en el límite de ν pequeño y, como hemos dicho, reproduce perfectamente los resultados experimentales.

1.2. Efecto fotoeléctrico. Efecto Compton

Fue EINSTEIN (1905) quien realmente propuso la cuantización de las ondas electromagnéticas para explicar el *efecto fotoeléctrico*.

Si se ilumina un metal (hacemos incidir radiación electromagnética sobre él), podemos observar que se “arrancan” electrones, es decir, son emitidos. Podemos variar la frecuencia con la que la luz–radiación incide y medir la energía y la dependencia de la energía con la frecuencia. Experimentalmente se observan los siguientes hechos:

- Existe una *frecuencia umbral*, más hacia abajo de la cual no se emiten electrones
- El número de electrones que se emiten, una vez superada dicha frecuencia umbral, es proporcional a la intensidad de la radiación incidente, pero la energía de los electrones emitidos no.

Estos dos hechos serían lógicos si la luz estuviese compuesta de entidades individuales, partículas (llamadas *fotones*) de energía $E = h\nu$ cada una. Esta fue, precisamente, la propuesta de EINSTEIN. Esta propuesta era revolucionaria¹. Las interacciones se producirían así de manera individual. Cuánticamente, se tiene $I = Nh\nu$. Una intensidad alta puede deberse a que N o ν sean altos, pero clásicamente no se sabía distinguir esto.

Tenemos entonces los siguientes resultados:

- Si lanzamos fotones de muy baja energía, da igual cuantos lancemos (es decir, el tiempo que transcurra desde que empezamos a lanzarlos), ninguno de ellos conseguirá que sean arrancados electrones.
- Para una intensidad dada, la energía del electrón emitido depende proporcionalmente de la frecuencia.

$$\frac{1}{2}mv_{\max}^2 = h\nu - W, \quad W = h\nu_c \text{ donde } \nu_c \text{ es la frecuencia umbral}$$

Otra de las principales evidencias del carácter corpuscular de la luz fue el *efecto COMPTON*. Al “golpear” con fotones la materia (generalmente electrones) se obtienen unos resultados que no son explicables clásicamente. Si lo son, sin embargo, al considerar que la interacción fotón–electrón se produce como un choque elástico (este punto es el que pone de manifiesto que la luz está compuesta por partículas). Se tiene, para la energía del fotón, según la teoría de la relatividad restringida:

$$E = \sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2} = pc = h\nu \Rightarrow p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

COMPTON usó lo que EINSTEIN ya había dicho para explicar su experimento. A las siguientes relaciones se las llama *relaciones de PLANCK–EINSTEIN*:

$$E = h\nu \tag{1.3a}$$

$$p = \frac{h}{\lambda} \tag{1.3b}$$

En la física clásica se distinguía perfectamente entre las partículas y las ondas. Con estos experimentos mencionados se puso de manifiesto que, de algún modo, las ondas electromagnéticas estaban compuestas por partículas. Es decir, las ondas electromagnéticas (la luz) tienen ambos caracteres: ondulatorio y corpuscular.

1.3. Postulado de De Broglie

Puesto que el campo electromagnético, que desde el siglo XIX (a partir de las leyes de MAXWELL) se había considerado como un fenómeno ondulatorio, mostraba ahora

¹Desde los experimentos de Young, que estudiamos más adelante, en torno a 1800, nadie dudaba acerca de la naturaleza ondulatoria de la luz

también un carácter corpuscular, DE BROGLIE postuló (1923) que las partículas materiales pueden tener también un comportamiento ondulatorio. Propuso que toda partícula tiene una *onda asociada* cuya longitud de onda es $\lambda = h/p$, en analogía con la fórmula de COMPTON–relaciones de PLANCK–EINSTEIN. Por ejemplo, un electrón, bajo determinadas circunstancias podría tener comportamientos ondulatorios tales como la difracción, que fueron observados poco después de haberlos predicho DE BROGLIE.

1.4. Modelo atómico de Bohr

Los experimentos de RUTHERFORD, en 1911, demostraron que la materia debe estar compuesta por *átomos*, y también permitieron discriminar la naturaleza de estos². Bombardeando con partículas α unas láminas de oro muy delgadas, observó que algunas se desviaban, debido a la existencia de fuertes campos eléctricos, mientras que la gran mayoría de las partículas α atravesaban las láminas de oro. Esto le permitió deducir la siguiente estructura en el átomo:

Núcleo El núcleo central debería estar compuesto por una carga positiva, y en el debería concentrarse la mayor parte de la masa.

Corteza electrónica Los electrones, de carga negativa (en total, el átomo ha de ser neutro) que se encontrarían orbitando alrededor del núcleo.

Una amplia zona de vacío entre ambos.

Esta imagen estaría en principio de acuerdo con la imagen clásica (newtoniana) de la mecánica: los electrones orbitan alrededor del núcleo como los planetas alrededor del Sol. El desacuerdo surgía con las leyes de MAXWELL: según éstas, una carga en movimiento acelerado (y el movimiento circular lo es) debería radiar energía de forma continua, y acabar precipitando en el núcleo, es decir, el átomo debería ser inestable, cosa que es a todas luces falso³. Además, en los espectros de absorción–emisión se observaban líneas discretas, es decir, que las energías eran “tomadas” o emitidas en forma de cuantos, y no de manera continua.

Esto condujo a BOHR a postular la existencia de órbitas estables para los electrones en los átomos, sin saber muy bien a que podría deberse la existencia de dichas órbitas. Al pasar un electrón de una órbita a otra lo hace absorbiendo o emitiendo un cuanto de energía, un *fotón*, lo que permitiría explicar las líneas espectrales discretas observadas. Las

²Él mismo afirma:

“Un cálculo simple demuestra que el átomo debe de ser asiento de un intenso campo eléctrico para que se produzca una gran desviación en una colisión simple...”

³Para un cálculo más detallado ver apéndice A, pág. 10.

órbitas son estables cuando la onda asociada al electrón es estable, esto es, estacionaria:

$$2\pi r = n\lambda \quad (1.4)$$

Los múltiplos de la longitud de onda han de “caber” exactamente en la longitud de la circunferencia de la órbita, y esto implica la cuantización del momento angular:

$$L = pr \stackrel{\text{deBroglie}}{=} \frac{h}{\lambda} r = \frac{h}{2\pi r/n} = \frac{h}{2\pi} n = n\hbar \Rightarrow \boxed{L = n\hbar} \quad (1.5)$$

Así pues, añadiendo este ingrediente a la fórmula clásica de un movimiento orbital, se tienen ciertas órbitas posibles, con sus correspondientes energías, y no cualquier órbita.

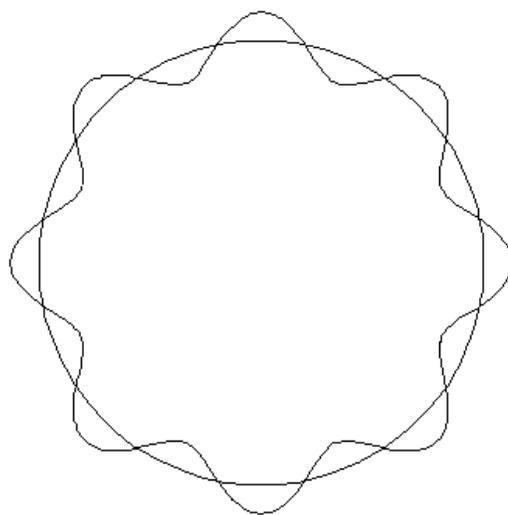


Figura 1.1: Ondas estacionarias del electrón

Pero extender esto a otros sistemas resultaba muy complicado. Pronto quedó patente que eran necesarias ciertas renovaciones profundas a nivel fundamental en la física, y no sólo la adición de una serie de recetas como podía ser la ecuación (1.5). Se hizo necesario la formulación axiomática de una nueva Mecánica, la Mecánica Cuántica, que revolucionaría (y aún hoy se siente ese revuelo) los conceptos y las aplicaciones de la Física.

1.5. Experimento de la doble rendija

En esta sección seguiremos básicamente el libro de Feynman [4]. Para tratar de entender el comportamiento cuántico de los electrones (usaremos los electrones para nuestros ejemplos), compararemos su comportamiento en un dispositivo experimental especial, con el comportamiento habitual que tendrían otros fenómenos físicos de carácter ondulatorio (las ondas en el mar, o cosas similares). Dicho experimento se encuentra esquematizado en la figura 1.2.

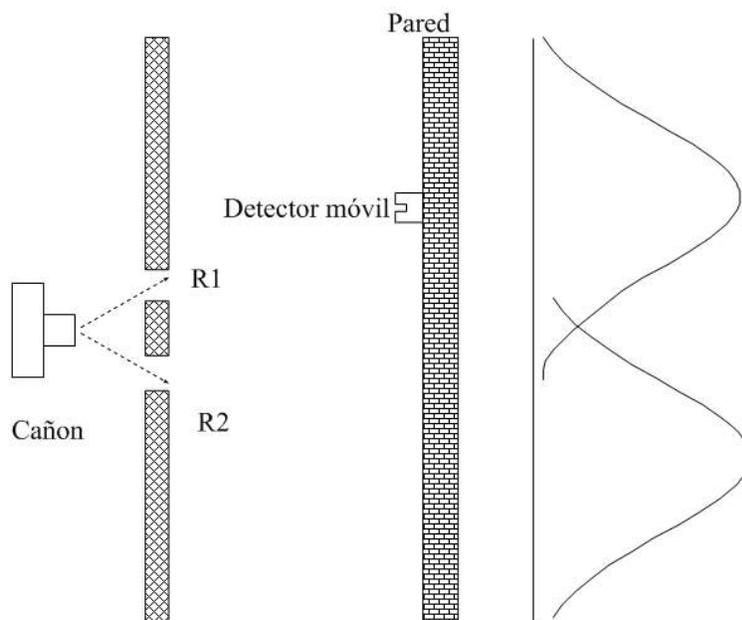


Figura 1.2: Dispositivo para el experimento de la doble rendija

1.5.1. Experimento con proyectiles (clásicos)

Para este experimento, nuestro dispositivo consiste en un cañón que dispara proyectiles. Entre el cañón que dispara y la pared que detecta los proyectiles hay otra pared con dos rendijas intermedias R_1 y R_2 , que podemos tener abiertas y cerradas, independientes entre sí. En la pared final, de contención, disponemos de un detector, algo que permite controlar cuántos proyectiles y donde exactamente golpean la pared, o, lo que es lo mismo, determinar la probabilidad de que un proyectil golpee la pared en un punto concreto, en función de posición en la pared, digamos, la coordenada x . Trataremos ahora con cuerpos macroscópicos, como pudieran ser pelotas de tenis o balas, que no puedan partirse por la mitad, ni hacer cosas extrañas. Observaremos entonces, en nuestro experimento, que los proyectiles llegan al detector individualmente, y pasan, como esperábamos, por una y solo una de las rendijas intermedias. Si hacemos el experimento con R_1 abierta y R_2 cerrada, encontraremos un diagrama de probabilidad como el que se recoge en la figura 1.3. Si lo hacemos al revés, con R_1 abierta y R_2 cerrada, el diagrama es equivalente pero desplazado. No nos extraña, tampoco, que al hacer el experimento con ambas rendijas abiertas, el diagrama que obtenemos se parece mucho a los anteriores, pero ahora está centrado, y en realidad, es la suma de ambos resultados. Es decir, se tiene $P_{12}(x) = P_1(x) + P_2(x)$. Decimos entonces que en este experimento no hay *interferencia*.

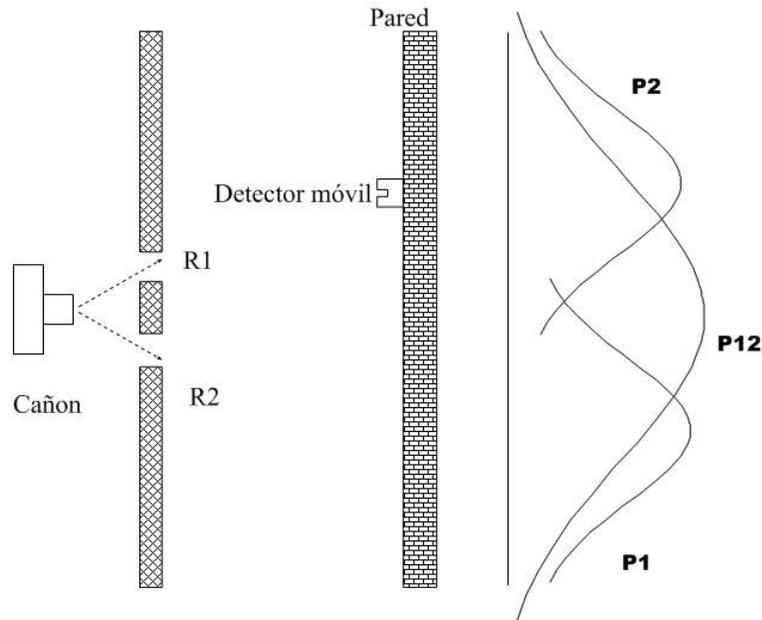


Figura 1.3: Experimento de la doble rendija con proyectiles macroscópicos

1.5.2. Experimento con ondas

Ahora deseamos hacer esencialmente el mismo experimento, pero con ondas de agua, o algo parecido. Evidentemente, ya no tendremos un cañón, sino una fuente puntual de ondas, que se propaguen por igual en todas las direcciones, en particular hacia nuestro sistema. Ahora ya no tendremos un detector que nos sirva para contar el número de proyectiles que chocan con la pared, sino un detector de intensidad, o algo que nos permita medir la intensidad de la onda al llegar a la pared. De nuevo hacemos el experimento con una y después otra rendijas abiertas, pero cuando hacemos el experimento con ambas rendijas abiertas, el resultado que obtenemos no es la suma de los dos resultados anteriores, por lo que decimos que existe *interferencia* entre ambas ondas. ¿Qué es lo que ocurre? En algunos lugares, donde I_{12} tiene sus máximos, las ondas provenientes de una y otra rendija están en fase, y las ondas se suman para dar una gran amplitud. Por contra, hay algunos lugares, justo allí donde la amplitud de I_{12} es mínima, en los que las ondas van desfasadas con una diferencia justamente de π . La intensidad es proporcional al cuadrado de la amplitud de la onda, es decir:

$$\begin{aligned} I(x) &= |A(x)|^2 = |A_1(x) + A_2(x)|^2 = |A_1(x)|^2 + |A_2(x)|^2 + 2|A_1(x)||A_2(x)| = \\ &= I_1(x) + I_2(x) + 2\sqrt{I_1(x)I_2(x)} \neq I_1(x) + I_2(x) \end{aligned}$$

En definitiva, en los experimentos con ondas, la intensidad puede tomar cualquier valor, no llega en cuantos, y se obtienen interferencias.

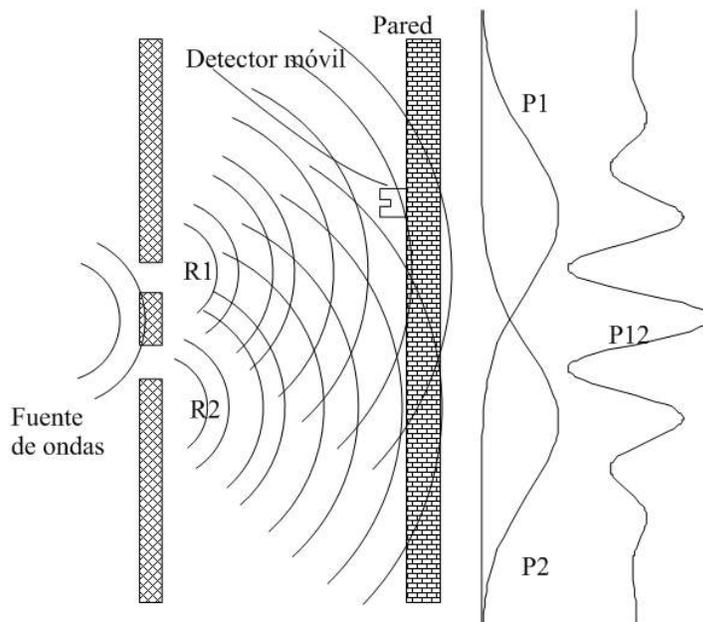


Figura 1.4: Experimento de la doble rendija para un fenómeno ondulatorio

1.5.3. Experimentos con proyectiles (cuánticos): electrones

Ahora imaginamos un experimento similar al de la sección 1.5.1. Construimos un cañón de electrones, de modo que conseguimos (imaginariamente)⁴ que podamos disparar los electrones de uno en uno.

Al tener cada una de las rendijas abiertas por separado, al llegar los electrones a la pantalla, estos golpean por separado, golpean en un solo sitio: no son como una onda, o eso parece. Pero si abrimos ambas rendijas a la vez, entonces no obtenemos una gráfica para la probabilidad que sea la suma de ambos resultados por separado, sino que obtenemos una gráfica en la que se observa *interferencia*: $P_{12} \neq P_1 + P_2$. La situación se encuentra representada en la figura 1.5. Esto no es lo que esperaríamos si cada electrón pasase por una y sólo una de las rendijas R_1 o R_2 . Podríamos pensar entonces que los electrones no van por una y sólo una de las dos rendijas, que a lo mejor van en formas más complicadas: a lo mejor el electrón se divide en dos mitades... aunque esto es imposible, porque hemos visto que llegan de uno en uno a la pantalla... Podemos intentar explicar, y de hecho mucha gente lo ha intentado ya, la curva de probabilidad para el golpeo del electrón, y no tendremos éxito. Sin embargo, la matemática necesaria para explicarla es muy simple, pues es la misma que la de la figura 1.4, y aquella figura era simple, pues describía una onda. Concluimos entonces que los electrones llegan a la pantalla como

⁴Este experimento, descrito como lo hemos hecho, es en realidad impensable, pues el dispositivo debería ser muy pequeño para apreciar los efectos que queremos ver. Sabemos lo que pasará porque se han hecho experimentos distintos, pero esencialmente idénticos, en los que suceden estos fenómenos que describimos

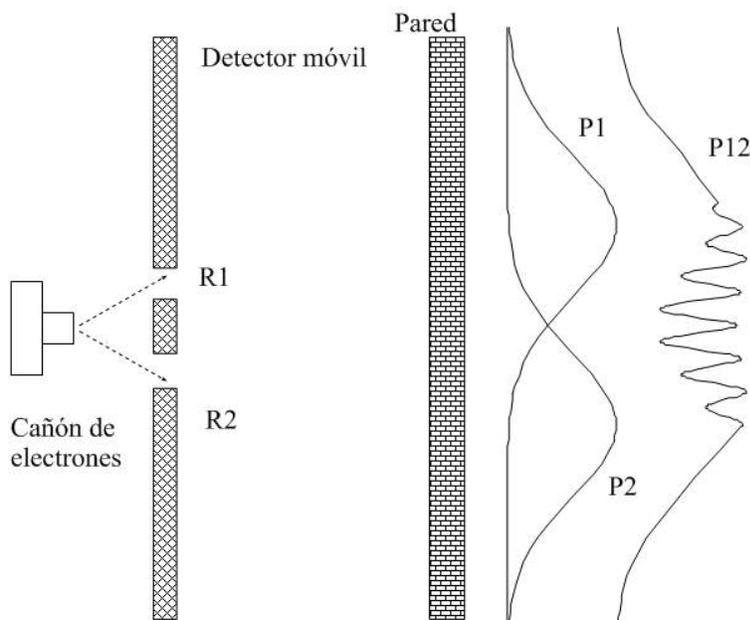


Figura 1.5: Experimento de la doble rendija con los electrones.

partículas, pero la probabilidad de llegar a un punto u otro de la pantalla se distribuye como si fuera una onda. Por esto decimos que los electrones a veces se comportan como una onda y otras veces como partículas, y esto es llamado por todos y con razón, la *dualidad onda-partícula*.

Ahora podremos interesarnos un poco más acerca de por donde pasa el electrón en realidad: por la rendija R_1 , por R_2 , por ambas, o por ninguna. Podríamos poner a nuestro aparato un detector más, una fuente de luz, cuya intensidad podemos variar, que nos ayude a decir por donde ha pasado el electrón. Así, si ponemos dicha fuente de luz entre ambas rendijas, al pasar un electrón por la rendija R_1 obtendremos un destello luminoso en sus alrededores, si pasa por R_2 , un destello cerca de dicha rendija, si el electrón se divide, dos destellos, o algo así, lo importante es que esto nos ayudará a saber que hace realmente el electrón. Si llevamos a cabo este experimento, resulta que justo antes de cada golpeo de un electrón en la pantalla obtenemos un destello luminoso que llega desde la rendija R_1 o desde R_2 , pero nunca de ambas a la vez, ni nada por el estilo. Debemos concluir, en contra de lo que dijimos anteriormente, que cada electrón pasa por una y sólo una de las rendijas, pero esto ya es desconcertante, pues hemos obtenido dos conclusiones contradictorias.

Si hacemos el experimento como hemos dicho, con este otro detector, cerrando una y luego otra rendija, obtenemos los diagramas de probabilidad que obtuvimos en la figura 1.5. Ahora bien, ¿que obtenemos para la probabilidad total, con ambas rendijas?. Ya no tenemos lo que obtuvimos en esa figura, ahora tenemos algo como la figura 1.3, con proyectiles macroscópicos. Ahora que observamos los electrones detenidamente, parecen

comportarse bien, ya no generan interferencias. Y si apagamos la luz, volvemos a obtener interferencia. Como vimos, la luz efectivamente lleva un cantidad de movimiento, de valor $p = h/\lambda$. Podríamos intentar usar luz con una longitud de onda mayor, intentando evitar perturbar tanto los electrones, de modo que obtengamos interferencia, pero a la vez sepamos perfectamente por donde pasó el electrón. Pero no obtendremos éxito, pues encontraremos que es imposible conseguir que la luz no perturbe los electrones y no perturbar el diagrama de interferencia, y a la vez determinar con exactitud a través de cual de las dos rendijas ha pasado todos y cada uno de los electrones. Y básicamente en esto consiste el *principio de incertidumbre de Heisenberg*, que imponen de algún modo una limitación a nuestra capacidad experimental, no una limitación de nuestros aparatos o de nuestras capacidades, sino una limitación intrínseca a la naturaleza: hay cosas que no se pueden determinar con exactitud absoluta al mismo tiempo. Por el momento, nadie ha encontrado una manera de esquivar este principio de incertidumbre o de indeterminación propio de la naturaleza.

Quedan algunas preguntas a las que no hemos respondido totalmente, y ahora responderemos a ellas, al menos, tan “totalmente” como podamos. Los electrones, ¿pasan por una y solo una de las dos rendijas, o siguen otros caminos alternativos?. Lo único que podemos decir para no caer en contradicción con los experimentos es que, cuando los observamos de cerca, el electrón pasa efectivamente por una y sólo una de las rendijas, y entonces se observa interferencia. Pero si no los observamos, si no colocamos un aparato que nos pueda decir esto, entonces no sabemos si el electrón atraviesa una rendija, las dos o ninguna, es más no sabemos ni siquiera que camino sigue de forma general, y se obtiene una interferencia.

Por otro lado, si todo en la naturaleza tiene un carácter ondulatorio, ¿por qué al hacer el experimento con proyectiles grandes, sin ningún detector, no obteníamos interferencias?. Bueno, es que en realidad si las obteníamos, pero ni nosotros ni nuestros detectores éramos capaces de detectarlas, por eso creíamos que no teníamos interferencias. Las longitudes de las ondas asociadas a tales objetos son tan pequeñas que ningún detector sería capaz de distinguir los máximos y los mínimos, sino que presentaría en realidad un promedio, una curva de interferencia muy suavizada, algo parecido a lo que se representa en la figura 1.6.

A. Decaimiento del electrón al núcleo en el átomo de Rutherford

A.1. Potencia radiada

De las leyes de Maxwell se deduce que una carga en movimiento acelerado irradia una energía por unidad de tiempo (potencia) que viene dada por la fórmula de Larmor.

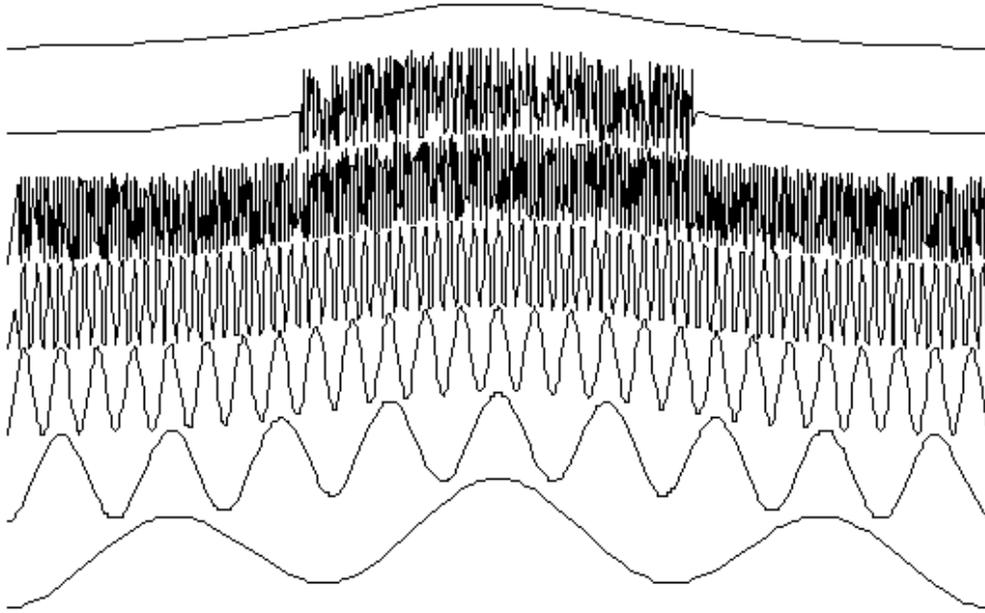


Figura 1.6: Curvas con interferencias suavizadas

Para el caso de la carga del electrón, esta es:

$$\frac{dW}{dt} = \frac{e^2 a^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \quad (1.6a)$$

Aquí a representa la aceleración de la carga, c la velocidad de la luz, y e la carga del electrón. Usaremos esta fórmula más tarde para considerarla en la conservación de la energía.

Por otro lado las fuerzas que intervienen son las de la propia atracción eléctrica (según la Ley de Coulomb) y la “fuerza centrífuga” para un movimiento circular, como se supone en este caso. Es decir:

$$\begin{aligned} F_{cent} &= \frac{m_e v^2}{r} \\ a_{cent} &= \frac{v^2}{r} \\ F_{coul} &= -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \end{aligned} \quad (1.6b)$$

El equilibrio que se supone implica que el balance de fuerzas sea nulo:

$$F_{cent} + F_{coul} = \frac{m_e v^2}{r} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = 0 \quad (1.6c)$$

De aquí se deduce que

$$mv^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (1.6d)$$

Además, la energía para una órbita de este tipo, análogamente a las órbitas planetarias, viene dada por:

$$E = \frac{1}{2}m_e v^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \frac{e^2}{r} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \frac{e^2}{r} \quad (1.6e)$$

Esta ecuación, derivada, nos da la variación de la energía orbital de la partícula:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \frac{dr}{dt} \quad (1.6f)$$

Conviene definir una constante, k_0 , de la forma

$$k_0 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$$

para mayor simplicidad en los cálculos posteriores.

Si tenemos en cuenta que debe cumplirse:

$$\frac{dW}{dt} + \frac{dE}{dt} = 0 \quad (1.6g)$$

llegamos, dados los valores para a y v dados respectivamente por las condiciones (1.6b) y (1.6d), a la siguiente ecuación:

$$-\frac{3}{4} \frac{m_e^2 c^3}{k_0^2 e^4} r^2 dr = dt \quad (1.6h)$$

Ahora integramos esta ecuación:

$$-\frac{3}{4} \frac{m_e^2 c^3}{k_0^2 e^4} \int_{r=r_0}^0 r^2 dr = +\frac{3}{4} \frac{m_e^2 c^3}{k_0^2 e^4} \int_0^{r=r_0} r^2 dr = \int_0^\tau dt \quad (1.6i)$$

Esto significa que:

$$\tau = \frac{3}{4} \frac{m_e^2 c^3}{k_0^2 e^4} r_0^3 \quad (1.6j)$$

Ahora tomaremos unos valores para los datos que aparecen en la ecuación (1.6j). Estos valores serán aproximados, pues tampoco queremos un valor exacto de este tiempo, sino simplemente demostrar que es de un orden de magnitud tan pequeño, que si este cálculo se correspondiera con la realidad, no existirían átomos estables.

Así pues, aplicando dichos valores a la expresión (1.6j), tendremos que el tiempo en que se esperaría que el electrón precipite sobre el núcleo es:

Cuadro 1.1: Valores de las magnitudes

Magnitud	Valor	Unidades
Masa del electrón m_e	$9,1 \cdot 10^{-31}$	kg
Velocidad de la luz c	$3 \cdot 10^8$	m/s
Constante culombiana k_0	$9 \cdot 10^9$	Nm^2C^{-2}
Carga del electrón e	$1,6 \cdot 10^{-19}$	C
Radio de la órbita del electrón r_0	$\simeq 10^{-10}$	m

$$\tau \simeq 3 \cdot 10^{-10} \text{ s}$$

Efectivamente, el tiempo en que supuestamente el electrón caería sobre el núcleo no nos da un valor infinito, o similar, sino un valor concreto, finito, y muy pequeño, en contra de la evidencia experimental.

A.2. Conclusión

De este sencillo cálculo se deduce que aunque las predicciones hechas por Rutherford acerca de la estructura de la materia son en general acertadas, el modelo que se plantea según la física clásica es incompleto, esto es, necesita ser revisado con una nueva teoría, que es la mecánica cuántica. La hipótesis de Bohr acerca de la existencia de órbitas estables cuantizadas (no puede existir cualquier órbita) en las cuales se puede localizar el electrón, y la emisión discreta de energía en forma de cuantos al pasar aquellos de una órbita a otra puso de manifiesto, junto a otros hechos experimentales, la validez de la mecánica cuántica a nivel atómico.

Mecánica ondulatoria. Ecuación de Schrödinger

1. Paquetes de ondas

Ahora veremos algunas propiedades generales de las ondas, no importará de que tipo.

La exponencial compleja e^{ikx} es una *onda plana*. Según la fórmula de Euler, $e^{ikx} = \cos kx + i \sin kx$. kx ha de ser adimensional, luego $[k] = L^{-1}$. k es el *número de ondas*, es inversamente proporcional a la longitud de onda. El módulo de la exponencial compleja es 1, $|e^{ikx}|^2 = e^{-ikx} e^{ikx} = 1$.

El uso de números complejos es una conveniencia matemática útil en algunas ramas de la física clásica, pero es que resulta ser fundamental, una propiedad intrínseca, en la física cuántica¹.

Una onda plana está totalmente extendida. Si sumamos dos ondas (o un número finito de ellas) de distinta frecuencia, parece que se vayan localizando. Para localizarlas totalmente, sumamos un número infinito de ellas, es decir, las integramos. Formamos entonces un *paquete de ondas*. Tenemos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk \quad (2.1)$$

En la anterior expresión, $g(k)$ es una *función de peso*, que tomará valores en una zona determinada, normalmente (Esto hará que se pueda encontrar la onda localizada). Lo más normal es que $g(k)$ sea una gaussiana, teniendo entonces un paquete de ondas gaussiano:

$$\Psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha(k-k_0)^2} e^{ikx} dk \quad (2.2)$$

¹Por ejemplo, el estado de un sistema se describe mediante un vector de un espacio vectorial cuyo cuerpo de escalares es el plano complejo, \mathbb{C}

La función $\Psi(x)$ es una función de onda (no necesariamente cuántica). La constante α estará relacionada con la anchura del paquete gaussiano. Para hacer esta integral, hacemos la siguiente transformación: $k - k_0 = k'$, por lo que $dk = dk'$, y queda:

$$\Psi(x) = e^{ik_0x} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha k'^2} e^{ik'x} dk'$$

Como aparece un término en k' y otro en k'^2 , lo que intentamos es completar el cuadrado perfecto.

$$\Psi(x) = e^{ik_0x} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha(k' - \frac{ix}{2\alpha})^2} e^{-\frac{x^2}{4\alpha}} dk'$$

El término en x vuelve a salir, y hacemos otro cambio de variables, $k' - \frac{ix}{2\alpha} = k''$, luego $dk' = dk''$, y obtenemos:

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{ik_0x} e^{-\frac{x^2}{4\alpha}} \quad (2.3)$$

Por tanto:

$$\begin{aligned} |\Psi(x)|^2 &= \frac{\pi}{\alpha} e^{-x^2} 2\sigma \\ \sqrt{\text{var}(x)} &= \sigma_x = \sqrt{\alpha} \end{aligned}$$

2. Ecuación de Schrödinger

Vimos en el tema anterior que la función de onda para el electrón libre viene dada por:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} g(p) \exp\left(\frac{i(px - Et)}{\hbar}\right) dp$$

En general, se tendrá $\exp(ikx - wt)$, solo que hemos sustituido las propiedades particulares (cuánticas) que hemos visto. Por motivos de interés matemático, y sin ninguna implicación física, hacemos:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) \exp\left(\frac{i(px - Et)}{\hbar}\right) dp$$

Así conseguiremos que $\psi(x, t)$ y $\phi(p, t)$ serán las funciones de onda en x y p , respectivamente.

Vamos a ver la ecuación diferencial que satisface la anterior ecuación:

$$\begin{aligned}\frac{\partial\psi}{\partial t} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{iE}{\hbar} \phi(p) \exp\left(\frac{i(px - Et)}{\hbar}\right) dp \\ \frac{\partial\psi}{\partial x} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ip}{\hbar} \phi(p) \exp\left(\frac{i(px - Et)}{\hbar}\right) dp \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p^2}{2m} \phi(p) \exp\left(\frac{i(px - Et)}{\hbar}\right) dp\end{aligned}$$

Si consideramos que el electrón tiene solo energía cinética, $E = p^2/2m$, se cumple entonces que:

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \quad (2.4)$$

Schrödinger generalizó² 2.4, pensando que debería existir también un término que contribuyera con energía potencial, V , de la forma:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial\psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t)} \quad (2.5)$$

De esta ecuación son de destacar varios hechos:

- La energía total aparece como una derivada temporal de un función, la función de onda.
- El momento, sin embargo, es introducido como una variación espacial de dicha función.
- El tiempo, t , es un simple parámetro, se introduce exactamente igual que en la física clásica, y no como en teorías como la Relatividad, general o especial, en las que aparece como una coordenada más, intrínsecamente relacionado con la estructura del espacio-tiempo.

Además, estos pasos que hemos presentado no son una demostración, sino una motivación, si acaso. La ecuación de Schrödinger no se deduce, se postula.

²En realidad publicó primero una versión relativista de la ecuación, la de Klein-Gordon ??

3. Interpretación probabilística de la mecánica cuántica

La interpretación estadística de la mecánica cuántica³ data de los inicios de ésta. Hemos visto que toda estado de una partícula viene definido por una función de onda, que representa su carácter ondulatorio. ¿Cómo se da cuenta del comportamiento material?. Para esto se interpreta la cantidad:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \psi(\mathbf{r}, t)^* \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.6)$$

como la **densidad de probabilidad** de encontrar la partícula en el instante de tiempo t en la posición \mathbf{r} . La función de onda permite pues determinar completamente el estado de un sistema, tanto su carácter material como su carácter ondulatorio. Este concepto es, sin duda, una de las grandes revoluciones de la mecánica cuántica: no somos capaces de afirmar que la partícula esté en un punto concreto en un cierto instante, sino que lo único que sabemos – y no siempre – la *probabilidad* de que una partícula esté aquí y la *probabilidad* de que esté allá⁴.

Vamos a demostrar ahora que **la probabilidad total se conserva**. Para ello vamos a establecer una ecuación de continuidad de forma análoga a las que encontramos en electromagnetismo o en la mecánica de los fluidos.

Definimos la *corriente de probabilidad* como:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m} (\psi(\mathbf{r}, t) \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t) - \psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t)) \quad (2.7)$$

Para obtener la evolución temporal de la densidad de probabilidad debemos hacer su derivada (omitimos las dependencias temporales por simplicidad), y tener en cuenta que la evolución temporal de la función de onda viene dada en función de su hamiltoniano por la ecuación (2.5), donde las derivadas de segundo orden en x han de ser generalizadas

³Veáse el discurso de MAX BORN al recibir el premio Nobel (11 de Diciembre de 1954):

“The work, for which I have had the honour to be awarded the Nobel Prize for 1954 contains no discovery of a fresh natural phenomenon, but rather the basis for a new mode of thought in regard to natural phenomena.”

“El trabajo por el que he tenido el honor de recibir el Premio Nobel de 1954 no presenta el descubrimiento de un nuevo fenómeno natural, sino más bien continene las bases de un nuevo modo de pensamiento en relación a los fenómenos naturales.”

⁴Este concepto tan anti-intuitivo es lo que produjo más estupor entre los científicos de la época, hasta el punto de que el mismo EINSTEIN, que propuso la necesaria cuantización de la radiación electromagnética en fotones, escribiera su famosa frase, asegurando que “Dios no puede estar jugando a los dados”, a lo que BOHR respondió: “Deja de decirle a Dios lo que tiene que hacer”.

a operadores laplacianos:

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) \quad (2.8)$$

Ahora bien, de la definición de \mathbf{j} , y teniendo en cuenta que $f \nabla^2 f^* - f^* \nabla^2 f = \nabla \cdot (f \nabla f^* - f^* \nabla f)$, podemos llegar a la ecuación:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.9)$$

Esta es la ecuación de continuidad que andábamos buscando. Podemos integrarla sobre un volumen V encerrado en una superficie (real o imaginaria) ∂V para obtener:

$$\int_V \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} dv + \int_V \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) dv = 0 = \int_V \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} dv + \int_{\partial V} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \cdot d\mathbf{s} = 0$$

Esto nos permite interpretar $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ como la probabilidad por unidad de tiempo de que la partícula atravesase la superficie ∂V . Así pues, podemos visualizar la partícula como si fuera un fluido con densidad $\rho(\mathbf{r}, t)$, que, como tal, cumple una/la ecuación de continuidad.

Ahora, para demostrar, como anunciábamos, que la probabilidad total se conserva, pasaremos al caso unidimensional, por ser más cómodo e intuitivo, aunque la solución será general. Para ello, escribimos la ecuación de continuidad en una dimensión (x) y la integramos:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_a^b \rho(x, t) dx = - \int_a^b \frac{\partial j}{\partial x} dx = j(a, t) - j(b, t)$$

Pero, en el límite en que $a \rightarrow -\infty$ y $b \rightarrow \infty$, como la función de onda no puede diverger (se debe hacer cero en los infinitos), tenemos que $j(-\infty, t) = j(\infty, t) = 0$, y por tanto:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, 0)|^2 dx = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad \forall t$$

Este hecho, como hemos dicho varias veces, se puede enunciar diciendo que la probabilidad total se conserva.

4. Operadores. Valores esperados

Un **operador** es un objeto matemático que actúa sobre un vector devolviendo otro. En el caso de la mecánica cuántica, dichos operadores serán funciones, las funciones de onda⁵ Para calcular magnitudes, es decir, para obtener algún resultado tangible (un

⁵Todo esto se verá con mayor detenimiento en el capítulo 4. Aquí solo presentaremos algunos resultados útiles que nos permitan trabajar sobre ciertos problemas sencillos, como haremos en el capítulo 3.

número, algún valor de una cantidad física), ¿qué debemos hacer en mecánica cuántica?. Bien, las magnitudes llevan asociados operadores, que actúan sobre las funciones de onda. Un ejemplo de magnitudes calculables son los **valores medios**. Por ejemplo el valor medio de la magnitud x , la posición, que lleva asociada el operador X , que consiste simplemente en multiplicar la función por x , vendría dado por:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx \quad (2.10)$$

Obsérvese la abismal diferencia entre la física clásica y la nueva física, la física cuántica. Con la operación anteriormente indicada, una integral de una función, tan complicada como se requiera en cada caso, multiplicada por x , nos da simplemente un valor medio de x . En la física clásica, una simple sustitución de algún parámetro, como el tiempo, nos daría inmediatamente el valor de la posición exacto, no en promedio.

En general, los operadores no consistirán en una simple multiplicación, sino que implicarán, dentro de este ámbito, derivadas, integraciones, etc. Entonces, el valor medio de una magnitud no se calcularía como hemos anunciado anteriormente, sino de una forma similar, pero con una diferencia sutil. El valor medio de la magnitud \mathcal{A} , cuyo operador asociado es A , viene dado por:

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) A \psi(x, t) dx \quad (2.11)$$

Hasta ahora hemos visto, sin darnos cuenta de ello, dos operadores: el operador posición, x , y el operador energía potencial, $V(x)$. Hemos trabajado con ellos sin saber nada sobre como operar con ellos precisamente porque solo implican multiplicar la función de onda por las magnitudes necesarias. El siguiente operador que vamos a ver, sin embargo, ya no es tan trivial; se trata del operador momento, p , que está relacionado con el momento cinético clásico. Su expresión la podemos intuir de la forma general del hamiltoniano (viendo cual es la aportación de la energía cinética a éste), según la ecuación (2.5):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} \equiv \frac{p^2}{2m} \psi(x, t)$$

o viendo que (como caso particular) para una onda plana:

$$\frac{\partial \exp\left(\frac{i(px - Et)}{\hbar}\right)}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p \exp(\dots) \Rightarrow p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

Como hicimos con la ecuación de Schrödinger, debemos señalar que esto no es ni mucho menos una deducción, solo una orientación, o una motivación. Definimos, en general, el operador momento (para la variable x , solamente) como:

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{operador momento lineal} \quad (2.12)$$

Así, por ejemplo, el valor medio del momento lineal es:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (\psi(x, t)) dx$$

De los operadores de la energía, ya conocemos el operador energía potencial, y tenemos cierto conocimiento del operador hamiltoniano, pero no conocemos la energía cinética. Por la analogía con la física clásica, donde $E_c = \pi^2/2m$, con π el momento cinético, se tendrá que el operador energía cinética está dado por el término $1/2m$ multiplicado por p^2 . Pero ahora p es un operador. Surge la pregunta ¿qué es el “cuadrado” de un operador?. El “cuadrado” de un operador es este mismo actuando sobre el resultado de hacer actuar dicho operador sobre una función, por ejemplo, $T^2(\psi) = T(T(\psi))$. Así, para el caso de p , se tiene:

$$E_c = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Podemos escribir la ecuación de Schrödinger de forma más compacta definiendo H , el operador hamiltoniano, como:

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

de modo que la ecuación fundamental de la mecánica cuántica queda como:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = H\psi(x, t)} \quad \text{Ecuación de Schrödinger} \quad (2.13)$$

Es importante observar que la dependencia temporal está contenida de forma explícita en la función de onda, y no en los operadores. Así, los valores medios evolucionarán con el tiempo no por la magnitud que representan, sino por como dependa del tiempo la función de onda. Es por eso que, macroscópicamente, encontramos una dependencia de x , por ejemplo, con el tiempo: es porque lo que en realidad medimos en la física clásica son promedios temporales de las magnitudes.

Por otro lado, como seguramente habrá percibido el lector, parece posible que el valor esperado de una magnitud sea un número complejo, atendiendo a la definición dada en (2.11). Esto no sucede así en la realidad, y se debe a que todo operador asociado a una magnitud física observable es **hermítico**, es decir, cumple la relación:

$$\int_a^b \psi_2^* A \psi_1 dx = \left[\int_a^b \psi_1 A \psi_2 dx \right]^* = \int_a^b \psi_1 (A \psi_2)^* dx \quad (2.14)$$

Es directo entonces comprobar que **el valor esperado de todo operador hermítico es real**. Para ello, tomamos sobre la definición de hermiticidad las funciones $\psi_1 = \psi_2 = \psi$, por lo que tenemos:

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) A \psi(x, t) dx = \left[\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) A \psi(x, t) dx \right]^* = \langle A \rangle^*$$

Es decir, se cumple $\langle A \rangle = \langle A \rangle^*$, por lo que $\langle A \rangle$ es real si A es hermítico. Como ejercicio, demuéstrese que los operadores x , V y p son hermíticos. Téngase en cuenta que los operadores x y V solo involucran multiplicaciones por números reales. En general, se observa que son hermíticos operadores en los que aparezcan:

- (multiplicaciones por) Funciones reales.
- Expresiones del tipo $i\frac{\partial}{\partial x}$, por la aparición de i .
- Expresiones del tipo $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$, a través de la integración por partes.

Por último, aparece entre los operadores una relación muy importante, la realción de conmutación. Es evidente que en esta mecánica que estamos desarrollando los operadores no tienen por qué conmutar entre sí, es decir, no es indiferente el orden en que se apliquen dos operadores sobre una misma función. Esta mecánica de funciones de onda es la *mecánica de Schrödinger*. Existe otra formulación, desarrollada en paralelo y al mismo tiempo que aquella, la *formulación matricial de Heisenberg*, que se demuestra totalmente equivalente a la primera, en la que también aparece de forma natural la no conmutación de los operadores, ya que en esta vienen dados por matrices, que, como se sabe de las nociones fundamental del Álgebra Lineal, no conmutan entre sí.

Se define el **conmutador** de dos operadores A y B , como:

$$[A, B] = AB - BA \quad (2.15)$$

El conmutador es un nuevo operador. Aplicado sobre una función, se tiene:

$$[A, B] \psi = A(B\psi) - B(A\psi)$$

Como ejemplo, calculemos el conmutador de los operadores posición y momento:

$$[x, p] (\psi) = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial x \psi}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial x}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{i} (-\psi)$$

Por tanto, se tiene:

$$[x, p] = i\hbar \quad (2.16)$$

De esta relación tan simple depende gran parte de la teoría de la mecánica cuántica, y del asombro que esta produce, pues sobre ella está fundamentado el famoso *principio de incertidumbre de Heisenberg*.

5. Representación de momentos

5.1. Función de onda en p como transformada de Fourier

5.2. Teorema de Parseval

6. Autovalores y autovectores

Supongamos que tenemos un operador A , asociado a una magnitud física \mathcal{A} . Supongamos que, al aplicarlo sobre una función, se tiene lo siguientes:

$$A\psi_{n,i}(x) = \lambda_n \cdot \psi_{n,i}(x) \quad (2.17)$$

Las funciones que cumplen la anterior relación, para algún valor λ , se llaman **autofunciones** o **funciones propias** del operador A , así como los λ se llaman **autovalores** o **valores propios**. Pueden existir muchos autovalores de un operador A (por ello colocamos un subíndice n en los autovalores). Además, el conjunto de los autovalores puede ser continuo o degenerado. Para un mismo valor de λ pueden existir varias funciones que cumplan (2.17): decimos entonces que el espectro de A es **degenerado** (Por esto hay un subíndice i en las funciones). Hay varias propiedades generales, que serán demostradas en el capítulo 4, que resultan interesantes y que por ello adelantamos aquí:

- Los valores propios de un operador hermítico son reales.
- Si un operador tiene dos o más valores propios distintos, se cumple que las funciones asociadas a cada uno de dichos autovalores son ortogonales entre sí (incluso las que corresponden a un mismo autovalor). Es decir, $\lambda_n \neq \lambda_m \Rightarrow \langle \psi_n | \psi_m \rangle = 0$ (La expresión $\langle | \rangle$ denota el producto escalar).
- El conjunto de las funciones propias de *casi*⁶ cualquier operador hermítico forma una base en el espacio vectorial correspondiente.

Los postulados de la mecánica cuántica afirman que, al realizar una medida de un observable, los posibles valores que se pueden obtener son los valores propios del operador asociado. Si tenemos un operador cuyas funciones propias forman una base, podemos escribir cualquier función de estado del sistema en esa base de la forma:

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x)$$

⁶En los espacios vectoriales de dimensión infinita, que aparecen a menudo en mecánica cuántica, existe una sutil diferencia entre operadores *hermíticos* y operadores *auto-conjugados*, y de este hecho proviene este *casi*.

de manera que los coeficientes c_n adquieren una especial relevancia: están relacionados con las probabilidades de obtener los distintos valores propios (recordemos, los valores posibles de una medida) del operador asociado a la base en la que está desarrollada la función de onda del sistema. Es decir:

$$\mathcal{P}(\lambda_n) = |c_n|^2$$

De nuevo nos encontramos con el hecho de que en mecánica cuántica solo podemos dar probabilidades de que un cierto acontecimiento suceda. Vemos aquí una nueva manera de obtener *valores esperados*. En la sección 4 estudiábamos como obtener valores esperados para una *distribución de probabilidad continua*. Con la ecuación anterior tenemos una *distribución de probabilidad discreta*. Sustituyendo las integrales por sumas, podemos obtener el valor esperado de la magnitud \mathcal{A} de la siguiente manera:

$$\langle A \rangle = \sum_n \lambda_n |c_n|^2 \quad (2.18)$$

Esta ecuación sería la análoga a la ecuación (2.10).

7. Evolución temporal

Vamos a estudiar aquí la solución más general de la ecuación de Schrödinger. Partimos de la ecuación:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t) \quad \text{Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo} \quad (2.19)$$

Lo primero que podemos hacer es intentar probar con un cambio de variables, de la forma:

$$\psi(x, t) = \xi(t)\varphi(x)$$

Si aplicamos lo anterior a la ecuación y dividimos por la función dada en la forma anterior, obtenemos:

$$\frac{i\hbar}{\xi(t)} \frac{\partial \xi(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\varphi(x)} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + V(x) \equiv \text{cte.} = E_n$$

Como el primer miembro depende exclusivamente de t y el segundo de x , es lógico que para que ambos términos sean iguales deberán ser una constante, que no dependa ni de x ni de t . Esa constante viene dada por la energía E . Esto se debe a que los autovalores del operador hamiltoniano, como se muestra en la siguiente ecuación, vienen dados por las posibles energías del sistema:

$$H\psi(x, t) = E_n\psi(x, t) \quad (2.20)$$

Hemos pasado de tener una ecuación con dos incógnitas a tener dos ecuaciones de una incógnita. La ecuación que queda para $\xi(t)$ tiene como solución:

$$\xi(t) = Ce^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$$

Para $\varphi(x)$ no sabemos nada, solo que en general será una solución de la ecuación de autovalores:

$$H\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \quad \text{Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo} \quad (2.21)$$

Esta es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. La solución mas general vendrá dada por el una combinación lineal del producto de estas dos funciones, combinación lineal que dependerá del índice n :

$$\boxed{\psi(x, t) = \sum_n \alpha_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \varphi_n(x)} \quad (2.22)$$

Problemas unidimensionales

1. Introducción. Generalidades

1.1. Ecuación de Schrödinger para potenciales constantes. Continuidades y discontinuidades

Vamos a estudiar ahora problemas unidimensionales, para resolver la ecuación de Schrödinger en casos sencillos, ya que fuera de estos es de difícil solución analítica. Además muchos de estos casos sencillos son modelos que sirven para aproximar casos físicos reales, como los núcleos atómicos. El hecho de que se estudien en una sola dimensión es porque son de fácil generalización a más dimensiones, y también porque a veces la dependencia es efectivamente unidimensional (radial, por ejemplo).

Si consideramos la ecuación de Schrödinger en varias dimensiones, dependiente del tiempo (por ejemplo, (2.5)), al aplicarla al caso unidimensional tendremos que el operador ∇^2 pasa a ser simplemente $\frac{d^2}{dx^2}$. Además buscaremos *soluciones estacionarias* de la ecuación, es decir, independientes del tiempo. Tenemos pues la siguiente ecuación:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x, t)}{dx^2} + \psi(x, t)V(x) \quad (3.1)$$

Si introducimos una separación de variables en la anterior ecuación de la forma $\psi(x, t) = \xi(t)\varphi(x)$, y dividimos toda la ecuación por $\psi(x, t)$ en la forma dada, se obtiene (omitimos las dependencias respecto a las variables por simplicidad):

$$\frac{i\hbar}{\xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\varphi} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + V(x) \equiv \text{cte.}$$

La dos miembros de la ecuación anterior tienen que ser iguales a una constante porque el miembro de la izquierda depende solo de t , mientras que el segundo depende solo de

x . Así pues, llamando a esa constante E , que será la energía (ahora veremos por qué), tenemos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad (3.2)$$

Esta es la ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo. Decimos que esa constante E representa la energía porque es el autovalor (en realidad podrá haber varios) de la ecuación $\hat{\mathbf{H}}\varphi = E\varphi$, que es una ecuación de autovalores, y donde $\hat{\mathbf{H}}$ es el operador hamiltoniano. Todo esto se verá con más detalle y quedará mejor entendido en el capítulo dedicado a la estructura y postulados de la mecánica cuántica.

Si consideramos, como haremos en este capítulo, potenciales en los que, de una manera u otra, el potencial es constante, $V(x) = V$, podemos resolver directamente la ecuación, considerando los casos en los que $E > V$ ó $E < V$. Podemos escribir la ecuación de la forma (omitiendo las dependencias¹):

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0 \quad (3.3)$$

Según los casos, la solución será:

$E - V > 0$ En este caso la solución será una combinación lineal de exponenciales imaginarias:

$$\psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) \quad (3.4a)$$

definiendo k como:

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)} \quad (3.4b)$$

$E - V < 0$ En este otro caso la solución será una combinación lineal de exponenciales normales:

$$\psi(x) = A \exp(qx) + B \exp(-qx) \quad (3.5a)$$

donde hemos definido q como:

$$q = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)} \quad (3.5b)$$

También es importante como ha de ser la función de onda en las discontinuidades. Deberá de ser siempre continua, y su derivada también², salvo en el caso de un potencial

¹Escribiremos a partir de ahora la parte espacial de la función de onda como $\psi = \psi(x)$, y no como φ , como hicimos antes en la separación de variables, y no tomaremos ψ como la función de onda total, $\psi = \psi(x, t)$

²Una forma de entender esto es que, si no lo fuera, tendríamos que su derivada segunda tendría un valor infinito, mientras que en la ecuación de Schrödinger aparece igualada a algo finito.

delta (definido mediante una delta de Dirac, como veremos más adelante). Esto se puede ver integrando la ecuación de Schrödinger en las cercanías de una discontinuidad, situada arbitrariamente, por comodidad en la notación, en $x = 0$. Se tiene, para el caso de un potencial constante, $V(x) = V$:

$$-\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} dx = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} (E - V)\psi(x) dx \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0 \Rightarrow \left(\frac{d\psi(x)}{dx} \right)_{\varepsilon} = \left(\frac{d\psi(x)}{dx} \right)_{-\varepsilon}$$

Sin embargo, si el potencial viene definido no por una constante sino por una función delta, de intensidad λ , $V(x) = \lambda\delta(x)$, se tendrá, usando los mismos cálculos que en el apartado anterior:

$$\left(\frac{d\psi(x)}{dx} \right)_{+\varepsilon} - \left(\frac{d\psi(x)}{dx} \right)_{-\varepsilon} = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{2m\lambda}{\hbar^2} \delta(x)\psi(0) dx = \frac{2m\lambda}{\hbar^2} \psi(0)$$

Esto deriva en la siguiente condición, para una discontinuidad situada en un punto a :

$$\left(\frac{d\psi(x)}{dx} \right)_{a+\varepsilon} - \left(\frac{d\psi(x)}{dx} \right)_{a-\varepsilon} = \frac{2m\lambda}{\hbar^2} \psi(a) \quad (3.6)$$

Otra cosa importante que tendremos que tener en cuenta serán las condiciones de contorno, es decir, las condiciones específicas que tendrá que cumplir la ecuación de onda, que serán precisamente lo que dará origen a fenómenos interesantes, tales como la cuantización de la energía y la aparición de estados discretos, el efecto túnel, resonancias, estados ligados, etc.

1.2. Simetrías. Operador paridad

Definimos el *operador paridad*, Π , mediante la siguiente ecuación:

$$\Pi |\psi(x)\rangle = |\psi(-x)\rangle$$

Para ver los posibles autovalores de Π en la ecuación $\Pi\varphi(x) = \lambda_{\pi} |\varphi\rangle$ sólo tenemos que hacer actuar dos veces sobre un vector propio $\varphi(x)$:

$$\Pi^2 |\varphi(x)\rangle = \lambda_{\pi}^2 |\varphi\rangle = \Pi |\Pi\varphi(x)\rangle = \Pi |\varphi(-x)\rangle = |\varphi(x)\rangle \Rightarrow \lambda_{\pi} = \sqrt{1} = \pm 1$$

Por otro lado, veremos más adelante (capítulo 4) que la variación del promedio temporal de una magnitud asociada a un operador A varía como $\partial_t \langle A \rangle \propto [H, A]$. Es decir, una cantidad se conserva si su operador asociado conmuta con el hamiltoniano. Para el caso de nuestro operador Π se tiene que:

$$[P^2, \Pi] = 0$$

$$[V(x), \Pi] = \begin{cases} = 0, & \text{si } V(x) \text{ es par, } V(x) = V(-x); \\ \neq 0, & \text{si } V(x) \text{ no es par.} \end{cases}$$

Es decir, si el potencial es par, $V(x) = V(-x)$, entonces $[H, \Pi] = 0$, y la paridad se conserva. Esto es importante, porque, si el potencial es par, permite elegir como funciones propias del hamiltoniano funciones que sean pares o impares, que permitirán resolver con más facilidad los distintos problemas, según como sea el espectro de H :

Estados no degenerados La función ha de ser necesariamente impar o par.

Estados degenerados Se pueden elegir funciones propias pares o impares (y con ellas establecer una combinación lineal para obtener una solución general)

2. Potencial escalón

Vamos a estudiar el comportamiento de una partícula en un potencial escalón (véase figura 3.1), definido matemáticamente de la siguiente forma:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0; \\ V_0 & \text{si } x > 0. \end{cases}$$

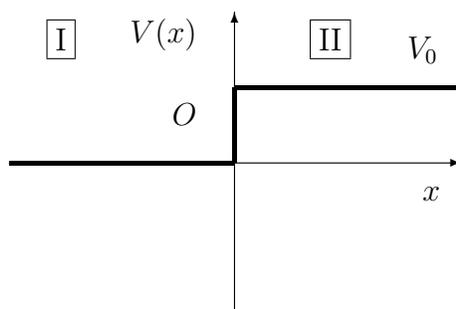


Figura 3.1: Potencial escalón

Habrá que considerar soluciones en uno y otro lado del salto de potencial, y después unirlos. Según que la energía sea $E < V_0$ ó $E > V_0$ tendremos distintos tipos de solución.

2.1. $E > V_0$. Reflexión parcial

En este caso, la solución en uno y otro lado del salto de potencial es exponencial imaginaria, y escribimos:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A_I e^{ik_I x} + B_I e^{-ik_I x} \\ \psi_{II}(x) &= A_{II} e^{ik_{II} x} + B_{II} e^{-ik_{II} x} \end{aligned}$$

$$k_I = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad k_{II} = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

Elegimos arbitrariamente $B_{II} = 0$. Esto lo hacemos queriendo indicar que no hay ondas que provengan desde $+\infty$. Estableciendo las condiciones de que la función de onda y su derivada sean continuas en $x = 0$ obtenemos estas condiciones:

$$\begin{aligned} A_I + B_I &= A_{II} \\ ik_I(A_I - B_I) &= ik_{II}A_{II} \end{aligned}$$

De aquí, y atendiendo a las definiciones de k_I y k_{II} , se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{A_{II}}{A_I} &= \frac{2k_I}{k_I + k_{II}} \\ \frac{B_I}{A_I} &= \frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}} \end{aligned}$$

Ahora vamos a definir dos magnitudes y conceptos que usaremos con frecuencia. El *coeficiente de transmisión*, T , representa la probabilidad de que una onda incidente sea transmitida a través del salto de potencial, mientras que el *coeficiente de reflexión*, R , es la probabilidad de que una onda incidente se refleje. Si tenemos en cuenta como hemos escrito las funciones de onda, podemos definirlos de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} T &= \frac{k_{II}}{k_I} \left| \frac{A_{II}}{A_I} \right|^2 \\ R &= \left| \frac{B_I}{A_I} \right|^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T &= \frac{k_{II}}{k_I} \frac{4k_I^2}{(k_I + k_{II})^2} \\ R &= \frac{(k_I - k_{II})^2}{(k_I + k_{II})^2} \end{aligned}$$

Es directo comprobar que se cumple $T + R = 1$, es decir, la onda incidente ciertamente se transmite o se refleja. Esto es un resultado que resulta chocante en comparación con la física clásica: un partícula que llegase a un salto de potencial de esta manera, siendo su energía mayor que el potencial, jamás rebotaría, siempre sería transmitida. Cuánticamente cabe la posibilidad de que la onda/partícula se refleje. En la figura 3.2 hay una representación del coeficiente T frente a α , donde hemos definido $E - V_0 = E(1 - \alpha)$, es decir, $\alpha = V_0/E$.

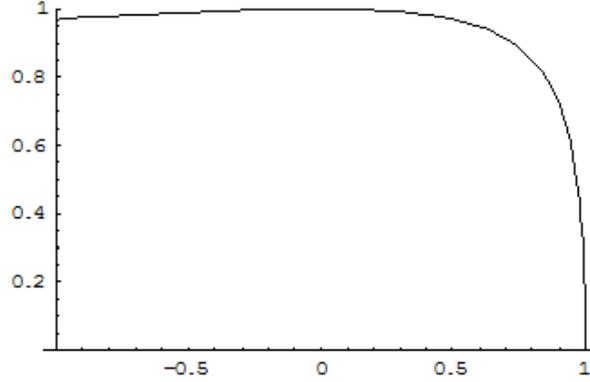


Figura 3.2: Representación del coeficiente de transmisión T en función de $\alpha = V_0/E$.

2.2. $E < V_0$. Reflexión total

En este caso se tiene que la solución en un lado (izquierdo) se corresponde con combinación de exponenciales imaginarias, mientras que en el otro la solución viene dada por una exponencial real. Escribimos:

$$\begin{aligned}\psi_I(x) &= A_I e^{ikx} + B_I e^{-ikx} \\ \psi_{II}(x) &= A_{II} e^{qx} + B_{II} e^{-qx} \\ k &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad q = \sqrt{-\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}\end{aligned}$$

Para que la función de onda sea normalizable, y la integral no diverja, es necesario hacer $A_{II} = 0$. En estas circunstancias, y estableciendo las mismas condiciones de empalme que antes, se llega a un resultado muy parecido al anterior (solo hay que cambiar $k_I \rightarrow k$ y $k_{II} \rightarrow iq$):

$$\begin{aligned}\frac{B_{II}}{A_I} &= \frac{2k}{k + iq} \\ \frac{B_I}{A_I} &= \frac{k - iq}{k + iq}\end{aligned}$$

Si intentamos hallar el coeficiente de reflexión, R , y operamos con él, obtenemos $R = 1$. Esto quiere decir que la partícula siempre se refleja. Sin embargo, dado que la función de onda es no nula en la zona II, existe una cierta probabilidad de encontrar a la onda “dentro” del escalón.

Es inmediato comprobar que la corriente de probabilidad se conserva. Si definimos j_e

como la corriente entrante, y j_s como corriente saliente, se tendrá:

$$\begin{aligned} j_e &= \frac{\hbar k}{m} (|A_I|^2 + |B_I|^2) \\ j_s &= \frac{\hbar q}{m} |C|^2 \end{aligned}$$

Si operamos y atendemos a los resultados obtenidos anteriormente:

$$j_e = |A_I|^2 \frac{\hbar k}{m} \left(1 - \frac{(k-q)^2}{(k+q)^2} \right) = \frac{\hbar q}{m} \frac{4k^2}{(k+q)^2} = \frac{\hbar q}{m} |A_{II}|^2 = j_s.$$

Además, se puede observar, teniendo en cuenta los resultados de los coeficientes que acompañan a las exponenciales complejas, que la reflexión produce un cierto *desfase*.

Si hallamos las constantes en el límite $V_0 \rightarrow \infty$ encontramos:

$$\begin{aligned} \frac{B_I}{A_I} \xrightarrow{V_0 \rightarrow \infty} -1 &\Rightarrow B_I \longrightarrow -A_I \\ \frac{B_{II}}{A_I} \xrightarrow{V_0 \rightarrow \infty} -1 &\Rightarrow B_{II} \longrightarrow 0 \end{aligned}$$

Esto es, cuando el potencial se hace muy grande, toda la onda se refleja, si desfase alguno, y además no hay probabilidad de que la onda/partícula penetre en el escalón.

3. Pozo de potencial finito

Vamos a estudiar un pozo cuadrado de potencial, cuya definición matemática está dada en (3.7). Una representación esquemática viene dada en la figura 3.3.

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } |x| \geq a; \\ -V_0, & \text{si } |x| \leq a. \end{cases} \quad (3.7)$$

3.1. $-V_0 < E < 0$. Estados ligados

Las soluciones de este caso vienen dadas por:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A \exp(qx) + B \exp(-qx) \\ \psi_2(x) &= C \exp(ikx) + D \exp(-ikx) \\ \psi_3(x) &= F \exp(qx) + G \exp(-qx) \end{aligned}$$

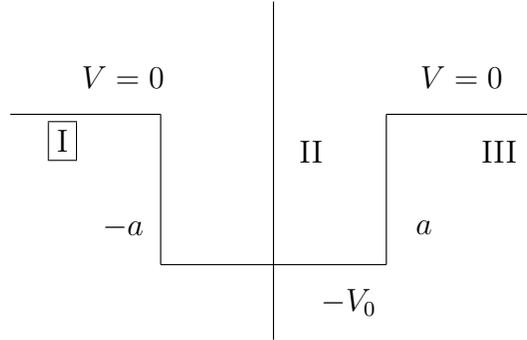


Figura 3.3: Pozo cuadrado de potencial

$$q = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \quad k = \sqrt{\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}} \quad (3.8)$$

Para evitar la divergencia en la normalización tendremos que tomar $G = A = 0$.

A los estados que aparecerán en la zona II se les llama *estados ligados*: el pozo cuadrado atrae, liga a los electrones. Si éstos van con mucha energía pasan por él sin ser muy perturbados, pero si van con poca energía, pueden quedar ligados al pozo.

La complicación que puede aparecer al solucionar el sistema de ecuaciones anterior se resuelve mediante las consideraciones de paridad del potencial.

Funciones propias pares

En este caso se tiene $B = F$ y $C = D$. Esto implica que las consideraciones de empalme serán las mismas en $-a$ y en a . Se tiene:

$$\begin{aligned} C(\exp(ika) + \exp(-ika)) &= B \exp(-qx) \\ ikC(\exp(ika) - \exp(-ika)) &= -qB \exp(qx) \end{aligned}$$

Las anteriores ecuaciones nos dicen implícitamente para que energías hay solución. Atendiendo a la fórmula de Euler sobre la exponencial compleja, se tiene la siguiente condición:

$$\tan(ka) = \frac{q}{k} \quad \text{condición de estado ligado} \quad (3.9)$$

Pero la anterior ecuación es una ecuación implícita, no podemos despejar analíticamente E para saber para que energías existe solución. Vamos a hallarlas mediante un método gráfico. Atendiendo a la definición de k y q , en la ecuación (3.8), y si hacemos estas otras definiciones:

$$y = k \cdot a \quad \lambda = a^2(k^2 + q^2) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2$$

llegamos fácilmente a la expresión:

$$\tan(y) = \frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} \quad (3.10)$$

Los niveles de un pozo dependen del producto de a^2 y V_0 , es decir, de la profundidad energética y la anchura espacial del pozo.

Funciones propias impares

Si realizamos las mismas operaciones que en el caso anterior, obtenemos:

$$\cot(-y) = \frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} \quad (3.11)$$

Representación

Ahora representamos las posibles soluciones, para soluciones pares e impares, en una única gráfica. En realidad, en la gráfica están representadas las funciones $\cot(-\pi x)$, $\tan(\pi x)$, $f(x) = \frac{\sqrt{n^2 - x^2}}{x}$, hemos hecho $y = \pi x$, y $n = \frac{\sqrt{\lambda}}{\pi}$. Las soluciones –los posibles estados ligados– vienen dados por los cortes de cualquiera de las funciones trigonométricas con la función $f(x)$. Podemos ver que el número de soluciones es:

$$\nu = 1 + \text{int} \left(\frac{2\sqrt{\lambda}}{\pi} \right) = 1 + \text{int}(2n)$$

3.2. $E > 0 > -V_0$. Coeficientes de transmisión

Lo que se pretende en este caso es calcular los coeficientes de transmisión y reflexión. Tenemos las funciones de onda:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) \\ \psi_2 &= C \exp(iqx) + D \exp(-iqx) \\ \psi_3 &= E \exp(ikx) + F \exp(-ikx) \end{aligned}$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad q = \sqrt{\frac{2m(E - |V_0|)}{\hbar^2}}$$

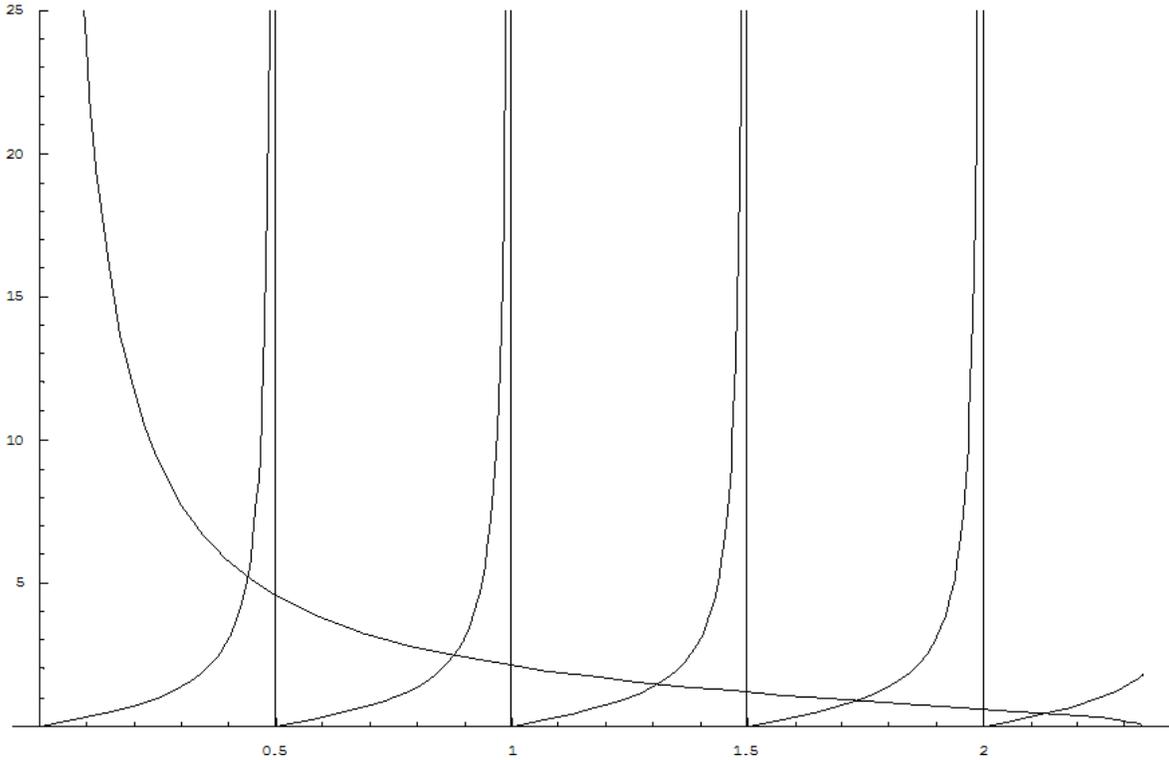


Figura 3.4: Representación de estados ligados en un pozo cuadrado

En este caso hay que usar también la paridad, pero es algo más complicado. Podemos elegir funciones propias del hamiltoniano pares o impares, pero no quiere decir que todas las soluciones tengan que serlo. Lo mejor será encontrar soluciones pares e impares, y establecer una combinación lineal que nos dé la solución general.

Funciones propias pares

En este caso, consideramos $A = G = A_+ = 1$, $B = F = B_+$, y $C = D = C_+$. Las condiciones de empalme en $-a$, que serán las mismas que en a , son:

$$\begin{aligned} B_+ \exp(ika) + \exp(-ika) &= C_+ (\exp(ika) + \exp(-ika)) \\ k(B_+ \exp(ika) - \exp(-ika)) &= qC_+ (\exp(ika) - \exp(-ika)) \end{aligned}$$

Estas condiciones nos dan:

$$B_+ = \exp(-2ika) \frac{i \frac{k}{q} \cot(qa) - 1}{i \frac{k}{q} \cot(qa) + 1} \quad (3.12)$$

Funciones propias impares

Ahora consideramos $A = -G = A_- = 1$, $B = -F = B_-$ y $C = -D = -C_-$. Haciendo los mismos pasos que en el apartado anterior, obtenemos:

$$B_- = \exp(-2ika) \frac{i \frac{k}{q} \tan(qa) - 1}{i \frac{k}{q} \tan(qa) + 1} \quad (3.13)$$

Solución general

Ahora, como dijimos con anterioridad, tenemos que encontrar una combinación lineal que nos dé una solución general con las condiciones que nosotros le imponamos. Como hay una constante global que siempre permanecerá por determinar, podemos considerar arbitrariamente $A = 1$ ³. Además imponemos que $G = 1$, queriendo significar con ello que no consideramos ondas que provengan desde $+\infty$. En definitiva, queremos una solución $\psi = C_{\text{par}}\psi_{\text{par}} + C_{\text{impar}}\psi_{\text{impar}}$, donde las ψ_{par} , ψ_{impar} vienen dadas, en cada parte del potencial, mediante las ecuaciones generales con los coeficientes vistos en cada uno de los apartados anteriores, y los coeficientes C_{par} y C_{impar} se obtendrán imponiendo las condiciones anteriormente mencionadas:

$$\begin{aligned} C_{\text{par}}A_+ + C_{\text{impar}}A_- &= A = 1 \quad \rightarrow \quad C_{\text{par}} + C_{\text{impar}} = 1 \\ C_{\text{par}}G_+ + C_{\text{impar}}G_- &= G = 0 \quad \rightarrow \quad C_{\text{par}} - C_{\text{impar}} = 0 \end{aligned}$$

En definitiva, se obtiene:

$$C_{\text{par}} = C_{\text{impar}} = \frac{1}{2}$$

Como los coeficientes se obtendrán a partir de B y F , nos interesa expresar estos en función de B_- y B_+ :

$$\begin{aligned} B &= \frac{B_+ + B_-}{2} \\ F &= \frac{B_+ - B_-}{2} \end{aligned}$$

Coefficientes de transmisión y reflexión

Como de costumbre, hallamos:

$$\begin{aligned} R = |B|^2 &= \frac{1}{4} (B_+ + B_-)(B_+ + B_-)^* \\ T = |F|^2 &= \frac{1}{4} (B_+ - B_-)(B_+ - B_-)^* \end{aligned}$$

³Otra alternativa sería calcular los cocientes A/A , B/A , C/A , etc. . . como hicimos con anterioridad. Pero estos dos métodos son totalmente equivalentes

Desarrollando los cálculos anteriores, podemos llegar a las siguientes expresiones:

$$R = \frac{(q^2 - k^2)^2 \sin^2(2qa)}{4k^2q^2 + (q^2 - k^2)^2 \sin^2(2qa)}$$

$$T = \frac{4q^2k^2}{4k^2q^2 + (q^2 - k^2)^2 \sin^2(2qa)}$$

Es directo comprobar que $R + T = 1$. Decimos que hay *resonancias* cuando el coeficiente de transmisión es máximo, esto es, cuando $\sin^2(2qa) = 0 \Leftrightarrow 2qa = n\pi$, $n \in \mathbb{N}$.

4. Barreras de potencial

Vamos a estudiar ahora las soluciones de la ecuación de Schrödinger para los potenciales conocidos como *barreras de potencial*, definidos como (3.14), cuya representación esquemática se encuentra en la figura 3.5.

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } x < -a; \\ V_0, & \text{si } -a \leq x \leq a; \\ 0, & \text{si } x > a. \end{cases} \quad (3.14)$$

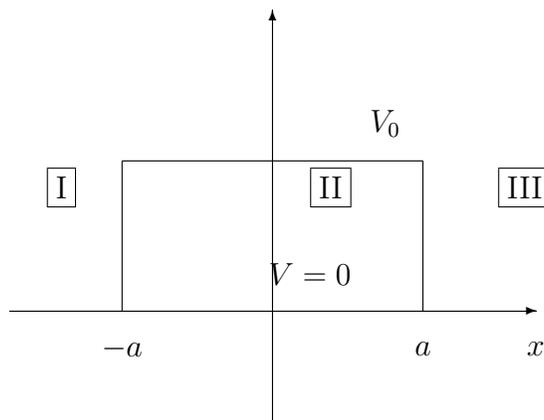


Figura 3.5: Barrera cuadrada de potencial

DESARROLLAR EL EFECTO TÚNEL.

5. Pozo de potencial infinito

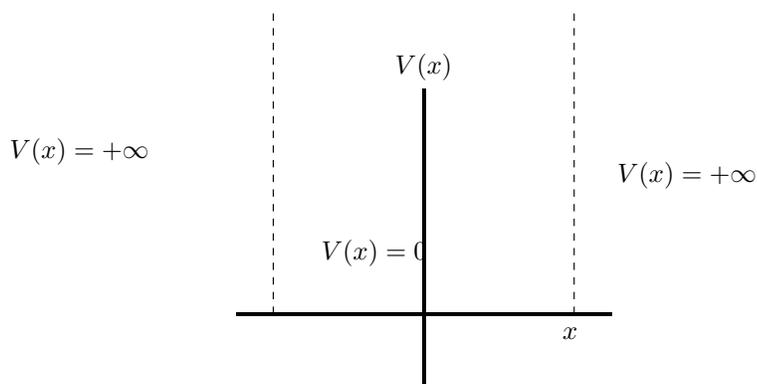
Vamos a estudiar este caso particularmente sencillo, un caso en el que, en realidad, lo único que se considera es que la función de onda no se extiende a todo el espacio, sino que se localiza en una región concreta del espacio. Fuera de ella se considera un *potencial infinito*, es decir, un potencial que la partícula no puede superar nunca, cualquiera que sea su energía.

5.1. Centrado en el origen

En la figura 3.6 podemos observar como es este potencial. Matemáticamente, viene descrito por las partes:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| < a \\ +\infty & \text{si } |x| > a \end{cases} \quad (3.15)$$

Figura 3.6: Pozo de potencial infinito centrado en el origen



La forma de potencial nos asegura tajantemente que la función de onda se anulará en los extremos del potencial, es decir, tendremos las condiciones de contorno:

$$\psi(-a) = \psi(a) = 0 \quad (3.16a)$$

$$\psi(x; |x| > a) = 0 \quad (3.16b)$$

En la zona central, como el potencial es cero, podremos escribir la ecuación de Schrödinger como ecuación diferencial ordinaria de segundo grado con coeficientes constantes de la manera siguiente:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \quad (3.17a)$$

Siendo

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (3.17b)$$

Las autofunciones de esta ecuación las podemos tomar como:

$$\psi(x) = Ae^{-ikx} + Be^{ikx} = C_1e^{ik(x-a)} + C_2e^{-ik(x-a)} \quad (3.18)$$

El cambio en la segunda igualdad lo podemos hacer sin pérdida de generalidad ninguna sin más que reabsorber la constante $e^{\pm ika}$ en las distintas constantes A y B . Aplicando las condiciones de contorno dadas por 3.16, obtenemos:

$$\psi(a) = C_1 + C_2 = 0 \Rightarrow C_1 = -C_2 \Rightarrow \psi(x) = C_1 (e^{ik(x-a)} - e^{-ik(x-a)}) \quad (3.19a)$$

Podemos reescribir la anterior expresión en forma sinusoidal:

$$\psi(x) = 2iC_1 \sin(k(x-a)) = \bar{C}_1 \sin(k(x-a)) \quad (3.19b)$$

Aplicando la otra condición de contorno, hallamos:

$$\psi(-a) = \bar{C}_1 \sin(-2ka) = 0 \Rightarrow 2ka = n\pi, \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.19c)$$

Esto quiere decir que *la energía está cuantizada*, dada la relación que existe entre k y E , según 3.17b:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.20)$$

Ahora normalizaremos la función de onda para obtener el valor de la constante \bar{C}_1 :

$$\begin{aligned} \int_{-a}^a |\bar{C}_1|^2 \sin^2(k(x-a)) dx &= |\bar{C}_1|^2 \int_{-2a}^0 \sin^2(k(z-a)) dz \\ &= |\bar{C}_1|^2 \left[\frac{z}{2} - \frac{\sin(2kz)}{4k} \right]_{-2a}^0 = |\bar{C}_1|^2 a = 1 \Rightarrow |\bar{C}_1| = \frac{1}{\sqrt{a}} \end{aligned} \quad (3.21)$$

Por lo tanto, podemos escribir la solución como sigue:

$$\psi(x) = \bar{C}_1 \sin(k(x-a)) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}(x-a)\right) \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.22)$$

Sin embargo, es más cómodo desarrollar el seno de la diferencia como una diferencia de senos y cosenos, pues la situación se simplifica. En efecto, tenemos:

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}(x-a)\right) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}x - \frac{n\pi}{2}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) - \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)\end{aligned}\quad (3.23)$$

Ahora tenemos en cuenta que:

$$\begin{aligned}n \text{ impar} &\Rightarrow \sin\frac{n\pi}{2} = 1 & \cos\frac{n\pi}{2} = 0 \\ n \text{ par} &\Rightarrow \cos\frac{n\pi}{2} = 1 & \sin\frac{n\pi}{2} = 0\end{aligned}$$

Podemos entonces separar la solución en los dos casos posibles señalados arriba, n par o impar, y obtener, como solución final (ver representación en las figuras 3.7 y 3.8):

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) & n = 1, 3, 5, \dots \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases}\quad (3.24)$$

Podemos calcular el valor del incremento relativo de energía entre dos niveles consecutivos:

$$\frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{\frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}(n+1)^2 - \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}n^2}{\frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}n^2} = \frac{2n-1}{n^2} \underset{n \rightarrow \infty}{\approx} \frac{2}{n}\quad (3.25)$$

Es decir, para números cuánticos suficientemente grandes, el espectro de energías parece casi continuo (*ley de los números grandes*).

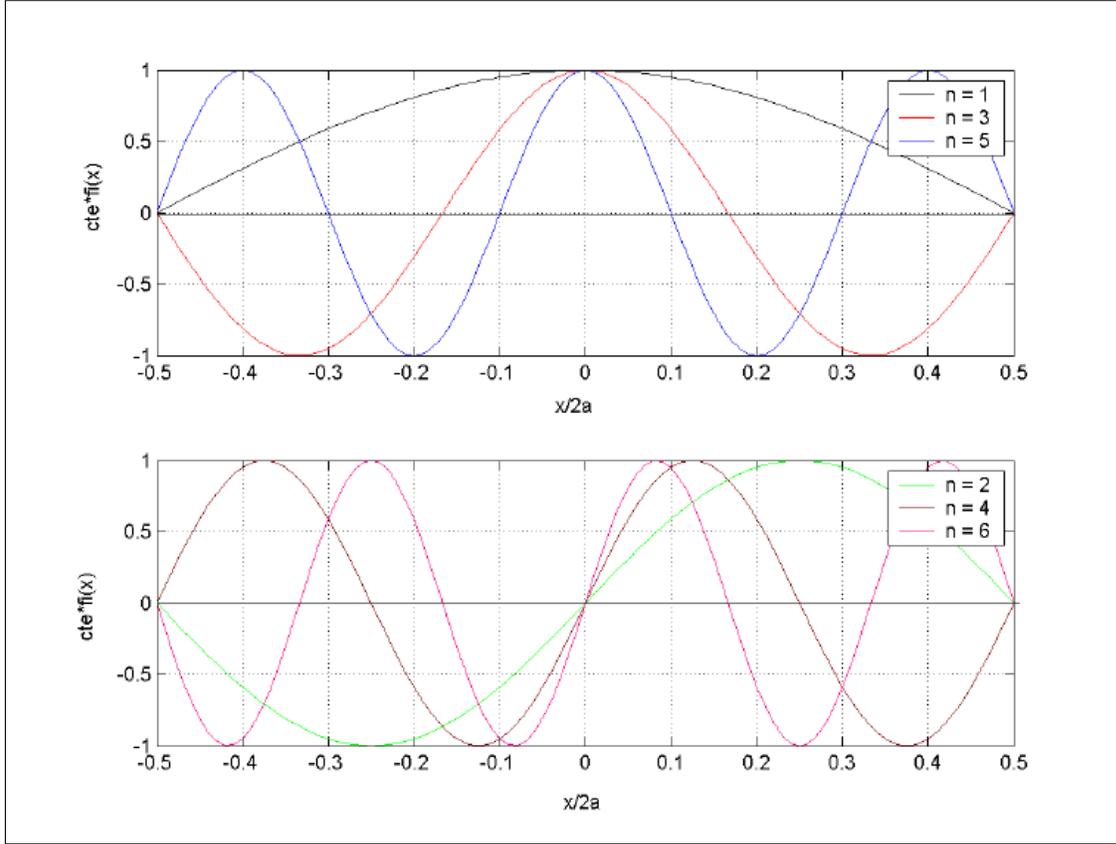
5.2. Pozo asimétrico

El potencial ahora es de la forma:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 < x < 2a \\ +\infty & \text{si } x < 0 \text{ ó } x > 2a \end{cases}\quad (3.26)$$

Las autofunciones son las mismas que antes, salvo que ahora no conviene tomar como argumentos de las exponenciales complejas los valores $x - a$, sino simplemente x :

$$\psi(x) = C_1 e^{-ikx} + C_2 e^{ikx}\quad (3.27)$$

Figura 3.7: Primeros estados separados según su forma: $\cos k_n x$ o $\sin k_n x$ 

Las condiciones de contorno son ahora:

$$\psi(0) = \psi(L) = 0 \quad (3.28a)$$

$$\psi(x; 0 < x < 2a) = 0 \quad (3.28b)$$

Aplicándolas, obtenemos de nuevo $C_1 = -C_2$, y por tanto:

$$\psi(x) = 2iC_1 \sin kx = \bar{C}_1 \sin kx \quad (3.29a)$$

Y también:

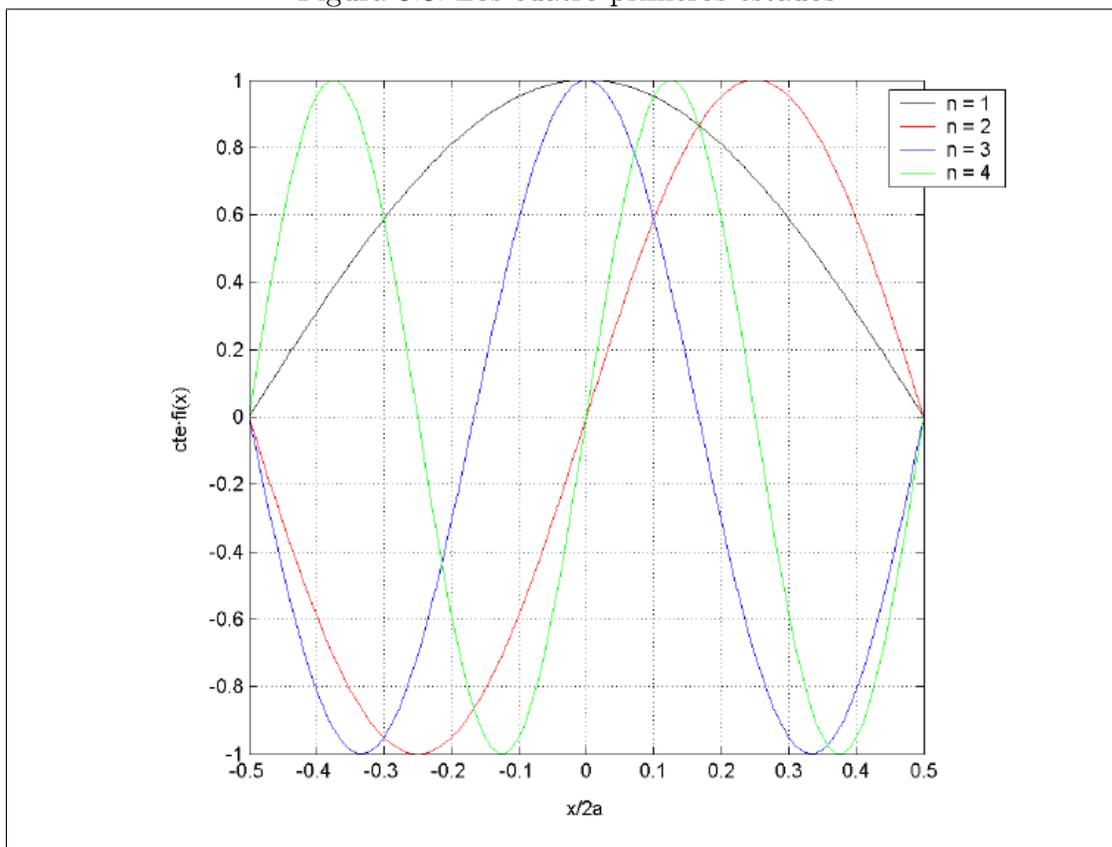
$$\psi(2a) = \bar{C}_1 \sin(2ka) = 0 \Rightarrow 2ka = n\pi, \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.29b)$$

Evidentemente, la energía también está cuantizada y los posibles valores que obtenemos para la energía son los mismos que en el caso anterior:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.29c)$$

La constante de normalización es también la misma, $|\bar{C}_1| = \frac{1}{\sqrt{a}}$. Y obtenemos, como

Figura 3.8: Los cuatro primeros estados



resultado final:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.30)$$

Todas las consideraciones hechas respecto al caso anterior son válidas en este caso, con la salvedad de la aparición de los estados “pares” e “impares”. Aquí obtenemos solo un tipo de resultados. En realidad, el resultado tampoco es tan distinto del que obtuvimos en el apartado 5.1. La equivalencia la tenemos que buscar entre esta expresión 3.30 y la ecuación 3.22 y no la 3.24. De hecho, si hacemos un cambio de variable $x \rightarrow x-a$ volvemos a obtener el caso anterior. Todo esto se debe a que en el primer caso el potencial tiene simetría par, por lo que el operador potencial conmuta con el operador hamiltoniano, y entonces podemos elegir (en ciertos casos y bajo ciertas condiciones) las soluciones como pares o impares. En este segundo caso, el potencial asimétrico, su operador no conmuta con el hamiltoniano, y no podemos hacer esta elección.

6. Potenciales delta

En muchas situaciones la forma matemática de un potencial viene dado por una función delta de Dirac, de la forma $V(x) = \lambda\delta(x - a)$, diciéndose entonces que existe un potencial delta en a de intensidad λ . Vamos a estudiar en detalle el caso de una barrera de potencial cuadrada (ver sección 4), en el que el valor de la “altura” del potencial tiende a infinito (consideramos $E < V_0$), y la anchura del mismo tiende a cero, manteniéndose constante el producto de ambos, es decir:

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & |x| \leq a; \\ 0, & |x| \geq a. \end{cases}$$

cumpléndose:

$$\lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ V_0 \rightarrow \infty}} 2aV_0 = V$$

Trataremos de comprobar que en este límite la función de onda en las dos partes es continua, mientras que su derivada es discontinua y satisface:

$$\frac{d\psi_1}{dx} - \frac{d\psi_2}{dx} = -\frac{2m}{\hbar^2} V\psi_1 \quad (3.31)$$

Por analogía con la sección 3, las soluciones en las regiones son⁴:

$$\psi_1(x) = \exp(ikx) + \frac{B_+ + B_-}{2} \exp(-ikx) \quad (3.32a)$$

$$\psi_2(x) = \frac{B_+ - B_-}{2} \exp(ikx) \quad (3.32b)$$

$$\psi_3(x) = C \exp(qx) + D \exp(-qx) \quad (3.32c)$$

donde los coeficientes B_+ y B_- son:

$$B_+ = \exp(-2ika) \frac{i\frac{k}{q} \coth(qa) - 1}{i\frac{k}{q} \coth(qa) + 1} \quad (3.32d)$$

$$B_- = \exp(-2ika) \frac{i\frac{k}{q} \tanh(qa) - 1}{i\frac{k}{q} \tanh(qa) + 1} \quad (3.32e)$$

$$q = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (3.32f)$$

⁴Para las expresiones de C y D ver 3

Estructura y postulados de la mecánica cuántica

Hemos avanzado en la descripción de la perspectiva de la física cuántica. Introducido el concepto de función de onda, y unas reglas para manejarse con ella, hemos resuelto varios problemas relativos a movimiento unidimensional de una partícula. Ahora vamos hacer una pausa para introducir las herramientas matemáticas y la notación necesarias para profundizar en la estructura de la mecánica cuántica.

Principalmente, todo consiste en hacer abstracción. Hemos considerado que una partícula venía descrita por una función de onda $\psi(x)$, que representaba como se distribuye la probabilidad de encontrar a ésta en el espacio. También hablamos de la función *en el espacio de momentos* $\phi(p)$, que nos daba lo equivalente para la densidad de probabilidad de su momento. Por último, veíamos que cuando tenemos un pozo infinito, o en los estados ligados de un pozo finito, obtenemos un conjunto de funciones propias. Puede escribirse entonces cualquier estado (ligado en el segundo caso) como combinación lineal de éstas. En este caso, basta una sucesión de números c_i para caracterizar el estado por completo.

Todas estas maneras de describir un sistema son igualmente válidas, y aquí subyace la motivación de la abstracción. Dada una de éstas caracterizaciones del estado del sistema, siempre es posible en principio encontrar las otras (haciendo la transformada de Fourier, obteniendo funciones propias, etc.). Es por eso que debemos intentar extraer lo que subyace en común a todas ellas al hablar del mismo estado físico.

1. Preliminares. Funciones de onda

Una función de onda básicamente ha de ser continua, derivable, y para guardar consistencia con su interpretación probabilística, ha de verificarse:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\mathbf{x})|^2 d^3\mathbf{x} = 1 \quad (\text{caso unidimensional}) \quad (4.1)$$

El conjunto de todas las funciones de \mathbb{R}^n en \mathbb{C} tal que existe la integral de su cuadrado extendida a todo \mathbb{R}^n (esto es, converge a un valor no infinito) se denomina el espacio de funciones de cuadrado integrable $L^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^n)$. En realidad una función de onda estará contenida en el subespacio de $L^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^n)$ de funciones continuas y derivables.

Para una partícula en el espacio tridimensional en principio tomaríamos $n = 3$, ya que la función de onda se evalúa en cada punto de éste, con coordenadas (x, y, z) . Sin embargo, continuaremos sin concretar este valor, ya que abre la posibilidad a grados de libertad inferiores (en problemas uni o bidimensionales p.ej.) o superiores (varias partículas). Denotaremos este espacio de funciones de onda L' .

Al ser L' un espacio vectorial, la combinación lineal de funciones de onda es una función de onda (sin tener en cuenta que la integral anterior valga 1 o no)¹. En este conjunto existe además un producto escalar definido por:

$$(\psi, \phi) = \int_{\mathbb{R}^n} \psi^* \phi = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) d^n \mathbf{x} \quad (4.2)$$

Este producto escalar cumple las propiedades que son de esperar en un espacio euclídeo complejo:

$$(\psi, \phi) = (\phi, \psi)^* \quad (\text{Hermiticidad}) \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} (\psi, \alpha\phi + \beta\chi) &= \alpha(\psi, \phi) + \beta(\psi, \chi) \\ (\alpha\psi + \beta\zeta, \phi) &= \alpha^*(\psi, \phi) + \beta^*(\zeta, \phi) \end{aligned} \quad (\text{Linealidad}) \quad (4.4)$$

$$(\psi, \psi) = |\psi|^2 \geq 0 \quad (\text{Norma}) \quad (4.5)$$

$$(\psi, \psi) = 0 \Leftrightarrow \psi \equiv 0 \quad (4.6)$$

Así, diremos que ψ y ϕ son ortogonales si $(\psi, \phi) = 0$. A partir de aquí podemos definir el concepto de base ortonormal. Un conjunto de funciones de onda $\{u_i\}_I$ (donde el conjunto de índices I en principio es infinito numerable o, de otra forma, \mathbb{N}) es una base ortonormal si:

¹Si no vale 1, no sucede nada, salvo que para calcular probabilidades, aparecerán multiplicadas por un factor igual al valor de esta integral. Si van a hacerse otras manipulaciones, lo que procede es normalizarla a 1 dividiendo por una constante real (la raíz cuadrada de su norma, véase más adelante).

- i) Toda función de onda puede desarrollarse como combinación lineal de las funciones de la base:

$$\psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i u_i \quad (4.7)$$

- ii) El conjunto es ortonormal, esto es :

$$(u_i, u_j) = \delta_{ij} \quad (4.8)$$

El espacio de funciones de onda se dice que es un *espacio de Hilbert separable*, y esto conlleva varias consecuencias interesantes. Una de ellas es el hecho de que las bases ortonormales de L^2 sean numerables (discretas), como hemos supuesto antes. Veamos la forma en que pueden calcularse los coeficientes c_i :

$$(u_j, \psi) = (u_j, \sum_{i=1}^{\infty} c_i u_i) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i (u_j, u_i) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \delta_{ji} = c_j$$

Así: $c_i = (u_i, \psi)$ (4.9)

Esto nos lleva inmediatamente a que el producto escalar puede expresarse como:

$$\psi = \sum_{i=1}^{\infty} a_i u_i \quad , \quad \phi = \sum_{j=1}^{\infty} b_j u_j$$

$$(\psi, \phi) = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} a_i^* b_j (u_i, u_j) = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} a_i^* b_j \delta_{ij} = \sum_{i=1}^{\infty} a_i^* b_i \quad (4.10)$$

Y también tenemos una expresión, pues, para la norma al cuadrado de una función:

$$|\psi|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} |(u_i, \psi)|^2 \quad (4.11)$$

A modo formal, se hace necesario introducir el concepto de *función de onda generalizada* y *base generalizada*. Como puede verse en el apéndice, mediante la distribución δ de Dirac, puede escribirse:

$$\psi(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^n} \psi(\mathbf{y}) \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}) d^n \mathbf{y} \quad (4.12)$$

También, dada la transformada de Fourier ϕ de ψ , ésta verifica por definición:

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} \phi(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} d^n \mathbf{p} \quad (4.13)$$

Estas expresiones nos inducen a considerar los conjuntos:

$$\{\delta_{\mathbf{y}}\}_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n}, \quad \delta_{\mathbf{y}} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (4.14)$$

$$\{v_{\mathbf{p}}\}_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n}, \quad v_{\mathbf{p}} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} \hbar} \quad (4.15)$$

como bases del espacio de funciones de onda. El problema es que esto en sí no tiene sentido: las bases de L' son numerables (éstas son no numerables), y lo que es más importante, están formadas por vectores de L' (en el caso de las $\delta_{\mathbf{y}}$ ni siquiera tenemos funciones). Sin embargo, aceptaremos estas bases *generalizadas* porque tienen su utilidad para la comprensión formal de la teoría. Esto es idéntico al proceso de introducción de la distribución δ : tiene un cierto significado y puede implementarse de un modo más riguroso a un nivel mucho más profundo.

De hecho esto ya lo hemos utilizado, en la resolución de problemas unidimensionales. Allí obteníamos como funciones propias del hamiltoniano combinaciones de ondas planas que no pertenecían a L' . Simplemente teníamos los *ladrillos* con los que se construyen los estados, una base generalizada asociada a la energía.

Para estas bases generalizadas, el conjunto de coeficientes es continuo, y la combinación lineal debe ser entendida como integral. Así, reproduciendo los resultados anteriores para bases ortonormales en sentido estricto:

$$\text{Base generalizada } \{u_i(\mathbf{x})\}_I \quad (u_t, u_s) = \int_{\mathbb{R}^n} u_t^*(\mathbf{x}) u_s(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \delta(t - s) \quad (4.16)$$

$$\psi(\mathbf{x}) = \int_I \phi(t) u_t(\mathbf{x}) dt, \quad \zeta(\mathbf{x}) = \int_I \chi(s) u_s(\mathbf{x}) ds \quad (4.17)$$

$$\phi(t) = (u_t, \psi) = \int_{\mathbb{R}^n} u_t(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) d^n \mathbf{x} \quad (4.18)$$

$$(\psi, \zeta) = \int_I \phi^*(t) \chi(t) dt \quad (4.19)$$

$$|\psi|^2 = \int_I |\phi(t)|^2 dt \quad (4.20)$$

Las dos primeras líneas son la definición definitiva de base ortonormal generalizada: la *ortonormalidad* y la posibilidad de desarrollar cualquier función de onda como una combinación (integral) de las funciones de la base. I es un conjunto de índices continuo cualquiera, en general, \mathbb{R}^m (no tiene por qué ser $m = n$)².

El último concepto fundamental para el desarrollo de esta teoría es el de operador. Ya hemos visto que podemos obtener valores medios de magnitudes como el momento o

²En el caso de índices “continuos”, nos referimos ciertamente a un subconjunto I de \mathbb{R}^n . Es importante destacar que todos los espacios \mathbb{R}^n tienen idéntico cardinal (*número de elementos*). En principio si la base no es numerable, la consideraremos continua.

la posición de la partícula, transformando la función de alguna forma (y luego haciendo una integral). En general, trabajaremos exclusivamente con operadores lineales, esto es, aplicaciones lineales en el espacio de funciones de onda³:

$$\mathcal{A} : L' \rightarrow L'$$

$$\mathcal{A}(\alpha\psi + \beta\phi) = \alpha\mathcal{A}\psi + \beta\mathcal{A}\phi, \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C} \quad \psi, \phi \in L' \quad (4.21)$$

Los operadores permiten manipular las funciones de onda para, entre otras cosas, obtener información sobre el estado del sistema. Esto ya se ha sugerido antes, pero avanzaremos más sobre ello. Notemos ahora que el valor medio de un operador \mathcal{A} para un estado ψ puede escribirse ahora como:

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} \psi^* \mathcal{A}\psi = (\psi, \mathcal{A}\psi) \quad (4.22)$$

Llegados a este punto hemos de mirar atrás y darnos cuenta de a dónde hemos llegado. Dado un estado mediante la función de onda ψ , ésta contiene toda la información sobre el sistema. Si especificamos una base $\{\varphi_i\}_{\mathbb{N}}$, conocer los coeficientes c_i del desarrollo de ψ nos proporciona el mismo conocimiento. También vale esto para una base continua $\{u_\alpha\}_A$. De hecho, dada $\{\delta_{\mathbf{y}}\}_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n}$, los coeficientes de ψ con respecto a esta base son precisamente $\psi(\mathbf{x})$, con lo que la propia función de onda se representa a sí misma. Los valores de la función de onda del espacio de momentos $\phi(\mathbf{p})$ no son sino los coeficientes respecto a la base de ondas planas $\{v_{\mathbf{p}}\}_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n}$.

Un mismo estado se ve representado por distintas funciones de onda (según trabajemos en el espacio de momentos, en el espacio natural de la posición, etc.), sucesiones de escalares complejos c_i, \dots . Debemos encontrar alguna manera entonces de reunir todas estas interesantes propiedades para acabar con la ambigüedad que encontramos.

2. Espacio de estados. Notación de Dirac

Las distintas formas en las que un estado queda caracterizado tienen algo en común: todas se refieren a un espacio de Hilbert separable de dimensión infinita. L' lo es ya, y a él pertenecen las funciones de onda, funciones de onda en el espacio de momentos, los coeficientes referentes a una base continua. . . Por otro lado, las sucesiones de escalares complejos c_i tales que: $\sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2 < \infty$ son el marco natural donde se trabaja cuando tenemos una base discreta, y también forman un espacio de este tipo.

³Así como diremos operador en vez de aplicación lineal, utilizaremos una notación distinta a la usual $f(x)$ para las funciones: $\mathcal{A}\psi$. Nótese que $\mathcal{A}\psi(\mathbf{x})$ es el valor de la función $\mathcal{A}\psi$ en \mathbf{x}

El paso que vamos a dar se apoya sobre un importante hecho: todos estos espacios son perfectamente isomorfos, esto es, existe (al menos) una correspondencia biunívoca entre cada pareja de ellos, que además conserva el producto escalar.

$$\begin{aligned} \dots &\leftrightarrow \psi(\mathbf{x}) \leftrightarrow \{c_i\}_{\mathbb{N}} \leftrightarrow \phi(\mathbf{p}) \leftrightarrow \dots \\ \dots &\leftrightarrow \psi'(\mathbf{y}) \leftrightarrow \{c'_j\}_{\mathbb{N}} \leftrightarrow \phi'(\mathbf{q}) \leftrightarrow \dots \\ &\dots\dots\dots \\ \dots &= \int_{\mathbb{R}^n} \psi^*(\mathbf{x})\psi'(\mathbf{x}) d^n\mathbf{x} = \sum_{i=1}^{\infty} c_i^*c'_i = \int_{\mathbb{R}^n} \phi^*(\mathbf{p})\phi'(\mathbf{p}) d^n\mathbf{p} = \dots \end{aligned}$$

Así, simplemente diremos que el estado de un sistema viene representado por un vector de un espacio \mathcal{E} , llamado espacio de estados. Este espacio de estados es un espacio de Hilbert separable genérico, sin ninguna de las connotaciones propias de los vistos anteriormente.

A los vectores de este espacio se les denomina *kets*, y se les denota mediante el símbolo $|\ \rangle$. Así, usualmente convendremos que el vector de \mathcal{E} correspondiente a una función de onda ψ (del espacio natural de la posición) se escribe $|\psi\rangle$. En este espacio existe también un producto escalar que denotaremos de momento por $(|\psi\rangle, |\phi\rangle)$.

El espacio dual \mathcal{E}^* Un funcional lineal φ en un espacio vectorial como \mathcal{E} es una función que asocia a cada vector $|\psi\rangle$ un escalar $\varphi(|\psi\rangle) \in \mathbb{C}$, de forma que se verifique:

$$\varphi(\lambda|\psi\rangle + \lambda'|\psi'\rangle) = \lambda\varphi(|\psi\rangle) + \lambda'\varphi(|\psi'\rangle), \tag{4.23}$$

dados $\lambda, \lambda' \in \mathbb{C}$, $\psi, \psi' \in \mathcal{E}$ cualesquiera. Al conjunto de todos los funcionales lineales se le denota por \mathcal{E}^* , y es un espacio vectorial de Hilbert (no exactamente isomorfo a \mathcal{E} , ahora lo veremos). El interés de considerar esta definición es descubrir el potencial de la notación de Dirac. Un famoso teorema del análisis funcional⁴ afirma que *a cada funcional lineal φ le corresponde un vector $|\chi\rangle$, de forma que $\varphi(|\psi\rangle) = (|\chi\rangle, |\psi\rangle)$, $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{E}$.*

Denotaremos entonces el funcional lineal asociado al vector $|\psi\rangle$, que actuando sobre otro vector $|\phi\rangle$, da $(|\psi\rangle, |\phi\rangle)$, por $\langle\psi|$. Los vectores del espacio \mathcal{E}^* los llamaremos entonces vectores *bra*, y el producto escalar de $|\psi\rangle$ por $|\phi\rangle$ se denotará de ahora en adelante como el funcional $\langle\psi|$ actuando sobre $|\phi\rangle$, escrito $\langle\psi|\phi\rangle$. Esto justifica los nombres de bra y ket de la notación de Dirac⁵.

⁴El teorema de
⁵*brackets*: del inglés, paréntesis $\langle\ | \ \rangle$

A. Resumen de los postulados

A.1. Descripción del estado de un sistema

Postulado 1 (Estado de un sistema). *En un instante de tiempo concreto t_0 , el estado de un sistema físico viene descrito por un vector $|\psi(t_0)\rangle$, llamado ket, de un espacio de Hilbert \mathcal{H}*

El hecho de que especifiquemos los estados como vectores de espacios de Hilbert implica la *linealidad*, lo que en la práctica implica *superposición*: si dos vectores $|\varphi_1\rangle$ y $|\varphi_2\rangle$ son posibles estados de un sistema, también lo será la combinación lineal $|\psi\rangle = \alpha|\varphi_1\rangle + \beta|\varphi_2\rangle \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$.

A.2. Descripción de magnitudes físicas

Postulado 2 (Magnitudes físicas). *Toda magnitud físicamente medible \mathcal{A} viene descrita por un operador $\hat{\mathbf{A}}$ que actúa en \mathcal{H} . Este operador es un observable.*

Con estos dos postulados se observa la radical diferencia entre la mecánica clásica y la cuántica: en la primera el estado de un sistema en un instante de tiempo se describe mediante seis cantidades correspondientes a dos vectores tridimensionales (\mathbf{r} y \mathbf{p}) y las magnitudes mediante cantidades escalares o vectoriales; en la mecánica cuántica el estado de un sistema está dado por una única función o vector de un espacio vectorial abstracto, y las magnitudes por operadores.

A.3. Teoría de la medida

Postulado 3 (Posibles valores de una medida). *Los únicos posibles resultados de una medida realizada sobre un sistema respecto a una magnitud \mathcal{A} es uno de los autovalores del operador $\hat{\mathbf{A}}$ asociado a dicha magnitud.*

Los posibles valores de una medida, como es de esperar, son siempre reales, ya que $\hat{\mathbf{A}}$ es hermítico por definición.

Si el espectro de los autovalores de un operador $\hat{\mathbf{A}}$ es discreto, entonces la magnitud \mathcal{A} está *cuantizada*.

A.4. Valores posibles de una medida

Postulado 3.1 (Caso discreto no degenerado). *La probabilidad de obtener como resultado de una medida de \mathcal{A} sobre un sistema en el estado normalizado $|\psi\rangle$ el autovalor no degenerado λ_n correspondiente al autovector normalizado a la unidad $|\varphi_n\rangle$ viene dada por:*

$$\mathcal{P}_\psi(\lambda_n) = |\langle \varphi_n | \psi \rangle|^2 \quad (4.24)$$

Postulado 3.2 (Caso discreto degenerado). *La probabilidad de obtener como resultado de una medida de \mathcal{A} sobre un sistema en el estado normalizado $|\psi\rangle$ el autovalor degenerado λ_n del operador asociado $\hat{\mathbf{A}}$ viene dada por:*

$$\mathcal{P}_\psi(\lambda_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle \varphi_n^i | \psi \rangle|^2 \quad (4.25)$$

g_n es la degeneración del autovalor λ_n y los $|\varphi_n^i\rangle$ forman una base ortonormal del subespacio de \mathcal{H} asociado al autovalor λ_n .

Postulado 3.3 (Caso continuo). *La probabilidad de obtener como resultado de una medida de \mathcal{A} sobre un sistema en el estado normalizado $|\psi\rangle$ un resultado entre λ y $\lambda + d\lambda$ viene dada por:*

$$d\mathcal{P}_\psi(\lambda_n) = |\langle \varphi_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha \quad (4.26)$$

donde $|\varphi_\alpha\rangle$ es el autovector correspondiente al autovalor α del operador $\hat{\mathbf{A}}$ asociado al observable \mathcal{A} .

Espín electrónico. Composición de momentos angulares

1. Introducción

Hasta ahora hemos considerado las partículas, en particular los electrones, como puntuales y con tres grados de libertad asociados a las posiciones x , y y z , es decir, hemos caracterizado los electrones mediante una función de onda $\psi(x, y, z)$, normalmente. Con estas herramientas de trabajo hemos conseguido muchas descripciones, que ampliaban sin duda los contenidos de la mecánica clásica, explicando fenómenos atómicos con el átomo de hidrógeno, sus niveles de energía, etc. . . ; además, estos modelos sirven de base para modelar otras estructuras de mayor complejidad (eso sí, a través de aproximaciones, pues una resolución analítica de la ecuación de Schrödinger suele ser imposible). Pero la realidad, los experimentos, van más allá de lo que hemos estudiado hasta ahora. Cuando se estudian ciertos experimentos en profundidad, aparecen ciertos fenómenos que nuestra teoría, en el estado en que se encuentra hasta nuestro desarrollo actual, no puede explicar. Este resultado no debería ser sorprendente, ya que desde el primer momento, como tuvimos a bien avisar, hemos despreciado toda aportación que la teoría de la Relatividad pudiera hacer: son necesarias sin duda alguna gran cantidad de correcciones relativistas que hemos despreciado: así, la variación de la masa (no la masa en reposo) con la velocidad, efectos magnéticos, etc. . . Estos efectos son pequeños; son pequeños, sí, pero pueden ser medidos.

La ecuación de DIRAC plantea una descripción cuántica y relativista del electrón, pero sus implicaciones suponen profundas modificaciones respecto a lo que significa la ecuación de Schrödinger. Además, de esta teoría emerge con total naturalidad una propiedad fundamental del electrón, y de todas las partículas, el *espín*, con la misma relevancia que puedan tener la masa en reposo o la carga de la partícula. Sin embargo, al contrario de lo que sucede hoy en día, el espín del electrón fue descubierto experimentalmente mucho antes de que fuera predicho teóricamente. Es más, PAULI desarrolló una teoría en la que el espín se introduce de una forma simple de manera no-relativista, a través de unos

nuevos postulados que se añaden -en ningún momento sustituyen- a los anteriores. La teoría demuestra estar en perfecto acuerdo con los experimentos. Nosotros estudiaremos aquí esta teoría de Pauli, que no incluye elementos relativistas y es bastante más simple.

2. Evidencia experimental del espín electrónico

Son los experimentos los que mandan sobre nuestros modelos físicos y no al revés. La evidencia experimental de la existencia de una propiedad sin ninguna analogía clásica, y con comportamiento de momento angular, al que llamamos espín, es numerosa. Nosotros nos fijaremos solo en aquellos experimentos que son más clásicos e intuitivos, y que nos permitirán extraer las consecuencias necesarias para justificar la existencia del espín.

2.1. Estructura fina de las líneas espectrales

Cuando hablábamos del átomo de hidrógeno afirmábamos sin miedo que la teoría desarrollada entonces explicaba perfectamente las líneas espectrales observadas (las frecuencias-energías observadas en las transiciones de un estado a otro de los electrones en los distintos niveles energéticos). Bien, esto es cierto, pero solo hasta un grado de precisión determinado. Más allá de esta precisión, estas líneas se desdoblán en otras que tienen frecuencias casi idénticas, pero que se pueden distinguir con los aparatos adecuados. Es decir, existen niveles atómicos que son muy parecidos, pero distintos. Este desdoblamiento, conocido como *estructura fina* del átomo de hidrógeno, no puede ser explicado con las herramientas y postulados desarrollados hasta ahora. Se hace necesaria la introducción de ciertas hipótesis adicionales.

2.2. Efecto Zeeman anómalo

Al colocar un átomo en el seno de un campo magnético las líneas espectrales anteriormente mencionadas se subdividen a su vez en un cierto número de líneas equiespaciadas, siendo el intervalo proporcional al campo magnético. Esto se entiende si se tiene en cuenta que aparece un momento magnético asociado al momento angular orbital de la forma:

$$\mathbf{M} = \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L} \quad \mu_B = \frac{q\hbar}{2m_e}$$

El factor μ_B es conocido como *magnetón de Bohr*. Esta teoría es confirmada por los experimentos en ciertos casos -efecto Zeeman normal-, pero en otras ocasiones se demuestra incapaz de dar cuenta *cuantitativamente* de todas estas subdivisiones -efecto Zeeman anómalo-. Se hace necesaria la introducción de ciertas hipótesis adicionales.

2.3. Existencia de momentos angulares semienteros

El experimento de Stern-Gerlach, que no describiremos aquí, revela la existencia de valores semienteros del momento angular. Sin embargo, como veremos más adelante, en este mismo capítulo, la composición de momentos angulares enteros da como resultado otro momento angular de posibles valores distintos, pero siempre enteros. Y los momentos angulares orbitales, como vimos en capítulos anteriores, son siempre enteros. Es decir, existen ciertos momentos angulares, no orbitales, cuyos valores son semienteros. Se hace necesaria la introducción de ciertas hipótesis adicionales.

3. Postulados de Pauli

Para resolver estas y otras dificultades, UHLENBECK y GOUDSMIT propusieron en 1925 la hipótesis de que el electrón *gira*¹ sobre sí mismo y esto le confiere un momento angular intrínseco que llamamos espín. (MOMENTO MAGNÉTICO ??).

Posteriormente Pauli propuso estas hipótesis más precisamente, dando una descripción del espín que es el límite del caso relativista, añadiendo una serie de postulados a los ya conocidos. Hasta ahora hemos considerado la cuantización de *variables orbitales* como \mathbf{p} y \mathbf{r} , asociando a ellas los observables \mathcal{P} y \mathcal{R} , que actúan en el espacio de estados \mathcal{E}_r , que llamaremos *espacio de estados orbitales*. A estas variables orbitales debemos añadir las *variables de espín*, que satisfagan los siguientes postulados:

1. **El operador de espín \mathbf{S} es un momento angular**, con lo que –como vimos en el capítulo dedicado al momento angular– esto implica; es decir, satisfacen las siguientes identidades:

$$[S_i, S_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}S_k \quad (5.1)$$

2. **Los operadores de espín actúan sobre un nuevo espacio, el espacio de estados de espín, \mathcal{E}_s** , donde \mathbf{S}^2 y S_z constituyen un sistema completo de observables compatibles. \mathcal{E}_s está generado por un conjunto de vectores propios $|s, m\rangle$ comunes a \mathbf{S}^2 y S_z que satisfacen:

$$\mathbf{S}^2 |s, m\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s, m\rangle \quad (5.2)$$

$$S_z |s, m\rangle = m\hbar |s, m\rangle \quad (5.3)$$

3. El espacio de estados total, \mathcal{E} es el producto tensorial de \mathcal{E}_r y \mathcal{E}_s :

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_r \otimes \mathcal{E}_s \quad (5.4)$$

¹En inglés el verbo girar es *spin*, de donde viene el nombre *spin*, castellanizado como *espín*.

Sabemos que todo valor (que llamábamos j , en general) de un momento angular ha de ser entero o semi-entero. Una partícula está caracterizada por un valor único de s ; se dice que la partícula tiene un espín s . El espacio de estados de espín es siempre de dimensión finita de valor $2s + 1$, y todos los estados de espín de una partícula son vectores propios de \mathbf{S}^2 con autovalor $s(s+1)\hbar^2$. Concretamente, el electrón es una partícula de espín 1/2, como lo son también el neutrón y el protón. Se conocen partículas con espín desde 0 hasta 11/2, pasando por todos los enteros y semienteros.

Con estos nuevos postulados (a los que habremos de añadir los que se refieren a la simetrización o antisimetrización de funciones de onda de partículas idénticas) queda patente que, excepto para el caso particular en que $s = 0$, no basta con especificar un ket del espacio \mathcal{E}_r , es decir, los sistemas $\{X, Y, Z\}$, o $\{P_X, P_Y, P_Z\}$, etc. . . no constituyen un sistema completo de observables compatibles. Todo vector de estado de una partícula es una combinación lineal de kets que son productos tensoriales de un ket de \mathcal{E}_r y otro de \mathcal{E}_s .

4. Propiedades del momento angular 1/2

Ahora resumiremos algunas de las propiedades básicas para un momento angular $s = 1/2$ (no necesariamente un *espín*), que se deducen directamente de las propiedades generales estudiadas para el momento angular. Tomaremos como base para nuestra descripción una base de \mathcal{E}_s formada por los vectores $\{|+\rangle, |-\rangle\}$, desentendiéndonos por completo de la parte angular. Los vectores $|+\rangle$ y $|-\rangle$ satisfacen las propiedades:

$$\mathbf{S}^2 |\pm\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |\pm\rangle \quad (5.5)$$

$$|S\rangle_z |\pm\rangle = \pm\frac{1}{2}\hbar |\pm\rangle \quad (5.6)$$

$$\langle + | - \rangle = 0 \quad (5.7)$$

$$\langle + | + \rangle = \langle - | - \rangle = 1 \quad (5.8)$$

$$\hat{\mathbf{1}} = |+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -| \quad (5.9)$$

$$(5.10)$$

Los operadores S_{\pm} se definen a partir de S_x y S_y , cumpliendo las siguientes propiedades:

$$S_{\pm} = S_x \pm iS_y \quad (5.11)$$

$$S_+ |+\rangle = 0 \quad (5.12)$$

$$S_+ |-\rangle = \hbar |+\rangle \quad (5.13)$$

$$S_- |+\rangle = \hbar |-\rangle \quad (5.14)$$

$$S_- |-\rangle = 0 \quad (5.15)$$

$$S_+^2 = S_-^2 = 0 \quad (5.16)$$

La expresión más general para un vector de estado de espín se describe mediante un vector arbitrario de \mathcal{E}_s :

$$|\chi\rangle = c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle \quad (5.17)$$

Los operadores S_x , S_y u y S_z tienen las siguientes expresiones matriciales en la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$:

$$\mathbf{S} = \hbar\sigma \quad (5.18)$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.19)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.20)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (5.21)$$

Estas matrices poseen las siguientes propiedades, que pueden deducirse directamente de su expresión explícita anterior:

$$\sigma_i^2 = 1 \quad (5.22)$$

$$\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 0 \quad (5.23)$$

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk} \quad (5.24)$$

$$\sigma_i\sigma_j = i\sigma_z \quad (5.25)$$

$$\text{Tr}\sigma_i = 0 \quad (5.26)$$

$$\det \sigma_i = -1 \quad (5.27)$$

5. Descripción no-relativista de una partícula de espín 1/2

Si se han de tener en cuenta todas las propiedades de una partícula (todos sus grados de libertad), el estado de una partícula viene descrito por un vector de $\mathcal{E} = \mathcal{E}_r \otimes \mathcal{E}_s$. Para

ello, habremos de *extender* (en el sentido matemático de la palabra) los operadores que antes habíamos definido para los dos espacios de estado por separado al espacio total \mathcal{E} . Usaremos como sistema de observables el formado por $\{X, Y, Z, \mathbf{S}^2, S_z\}$. Como base, tomaremos los kets obtenidos como producto tensorial de vectores de las bases de \mathcal{E}_r , $|\mathbf{r}\rangle \equiv |x, y, z\rangle$, y vectores de la base de \mathcal{E}_s , $|\varepsilon\rangle$, donde ε puede referirse a $|+\rangle$ o $|-\rangle$. Es decir, por definición, los vectores de la base anteriormente indicada son de la forma:

$$|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle \equiv |x, y, z, \varepsilon\rangle = |\mathbf{r}\rangle \otimes |\varepsilon\rangle \quad (5.28)$$

Estos vectores, por definición, son autovectores de los operadores X, Y, Z, S^2 y S_z , con autovalores:

$$X|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle = x|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle \quad (5.29)$$

$$Y|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle = y|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle \quad (5.30)$$

$$Z|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle = z|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle \quad (5.31)$$

$$S^2|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle \quad (5.32)$$

$$S_z|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle = \varepsilon\frac{\hbar}{2}|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle \quad (5.33)$$

Además, los autovectores cumplen las relaciones de *ortonormalidad y cierre*:

$$\langle \mathbf{r}', \varepsilon' | \mathbf{r}, \varepsilon \rangle = \delta_{\varepsilon', \varepsilon} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \quad (5.34a)$$

$$\sum_{\varepsilon} \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}, \varepsilon\rangle \langle \mathbf{r}, \varepsilon| = \hat{\mathbf{1}} \quad (5.34b)$$

Todo vector puede ser expresado en la base $\{|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle\}$, de la forma:

$$|\psi\rangle = \sum_{\varepsilon} \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}, \varepsilon\rangle \langle \mathbf{r}, \varepsilon | \psi \rangle \quad (5.35)$$

Los coeficientes $\langle \mathbf{r}, \varepsilon | \psi \rangle$ son las *coordenadas* del vector $|\psi\rangle$ en la base $\{|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle\}$, es decir, existen dos funciones que especifican el estado del sistema, que son:

$$\psi_+(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}, + | \psi \rangle \quad (5.36)$$

$$\psi_-(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}, - | \psi \rangle \quad (5.37)$$

Estas dos funciones son las dos componentes de una estructura llamada *espinor*, que escribimos de la forma:

$$[\psi](\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{r}) \\ \psi_-(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (5.38)$$

La representación análoga a esta del bra $\langle \psi |$ asociado al estado $|\psi\rangle$ es la matriz adjunta de esta, es decir, un espinor de la forma:

$$[\psi]^\dagger(\mathbf{r}) = (\psi_+^*(\mathbf{r}) \quad \psi_-^*(\mathbf{r})) \quad (5.39)$$

Esta notación compacta permite simplificar la expresión del producto escalar de dos vectores de estado, que podemos escribir como:

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \sum_{\varepsilon} \int d\mathbf{r} \langle \psi | \mathbf{r}, \varepsilon \rangle \langle \mathbf{r}, \varepsilon | \varphi \rangle = \int d\mathbf{r} [\psi]^\dagger(\mathbf{r}) [\varphi](\mathbf{r}) \quad (5.40)$$

En la notación anterior, primero se realiza el producto de matrices y después la integración.

De los vectores de el espacio de estados, algunos (los de la base, entre otros) serán producto vectorial de la base de vectores correspondiente a las partes orbital y de espín, respectivamente:

$$|\psi\rangle = |\varphi\rangle \otimes |\chi\rangle \quad , \quad (5.41)$$

con $|\varphi\rangle$ y $|\chi\rangle$ dados por:

$$\langle \mathbf{r} | \varphi \rangle = \varphi(\mathbf{r}) \quad (5.42)$$

$$|\chi\rangle = c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle \quad (5.43)$$

El espinor tiene entonces una forma más simple que la general, ya que:

$$[\psi](\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \quad (5.44)$$

Esto equivale a decir que las funciones del espinor $\varphi_{\pm}(\mathbf{r})$ son simplemente $\varphi_{\pm}(\mathbf{r}) = c_{\pm} \varphi(\mathbf{r})$. Por tanto, $\langle \psi | \psi \rangle = \langle \varphi | \varphi \rangle \langle \chi | \chi \rangle = (|c_+|^2 + |c_-|^2) \int_V d^3\mathbf{r} \varphi^*(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r})$.

Discusiones similares se pueden hacer para conocer la forma de los operadores que actúan sobre una partícula, ya no solo en el espacio orbital, sino sobre el espacio vectorial de estados, que es producto vectorial de los espacios de espín y orbital, $\mathcal{E} = \mathcal{E}_r \otimes \mathcal{E}_s$, recordando que cada operador de un espacio no afecta sobre las componentes del vector que corresponden al otro espacio. Por ejemplo, el operador S_z , que antes considerábamos que actuaba solo sobre \mathcal{E}_s , ahora actúa sobre \mathcal{E} , pero sobre un vector $|\mathbf{r}, \pm\rangle$, actuará solo sobre la parte del espín, no sobre la otra parte del vector. Aunque también puede haber operadores mixtos, como productos de operadores en los que un factor actúe sobre el espacio \mathcal{E}_r y otro factor sobre el espacio \mathcal{E}_s .

Por ejemplo, el operador S_z en una representación $|r, \pm\rangle$, viene dado por:

$$S_z \equiv \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.45)$$

Que es la misma forma que tenía en \mathcal{E}_s , evidentemente. Pero operadores como X o P_x ya no son simples operaciones, sino matrices cuyos elementos consisten en operaciones:

$$[X] \equiv \begin{pmatrix} x & 0 \\ 0 & x \end{pmatrix} \quad [P_y] \equiv -i\hbar \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} \quad (5.46)$$

Operadores mixtos, más complicados, pueden ser:

$$[P_z S_y] \equiv \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial z} & 0 \end{pmatrix} \quad (5.47)$$

La representación espinorial también permite expresar el valor esperado de un operador en un estado $|\psi\rangle$ que tenga en cuenta el espín, de la forma:

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \int_V d^3\mathbf{r} [\psi]^\dagger(\mathbf{r}) [A] [\psi]^\dagger(\mathbf{r}) \quad (5.48)$$

6. Momento angular total en mecánica clásica y en mecánica cuántica

El momento angular total de un sistema de N partículas clásicas respecto a un punto O es la suma de los momentos individuales, $\mathcal{L} = \sum_{i=1}^N \mathcal{L}_i$. Cuando las fuerzas externas son cero o paralelas a los vectores de posición, entonces el momento total de las fuerzas es cero y el momento angular total es una (en realidad, tres) constante de movimiento. No lo serán en general, sin embargo, los momentos angulares individuales de cada partícula.

Supongamos ahora un sistema cuántico de dos partículas, con un hamiltoniano $H' = H_1 + H_2$, siendo H_i :

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla^2 + V(r_i) \quad (5.49)$$

Es claro entonces que los momentos angulares cumplen la relación de conmutación $[\mathbf{L}_i, H'] = 0$, que es el equivalente cuántico de decir que \mathbf{L}_i “es una constante de movimiento”. Pero supongamos ahora que en el sistema hay también una interacción dada por un potencial central de la forma $U(r)$, con r la distancia entre ambas partículas. Es decir, el hamiltoniano es de la forma $H = H' + U$. Ahora las relaciones de conmutación de los momentos angulares son de la forma $[\mathbf{L}_i, H] = [\mathbf{L}_i, U]$. Para el caso de la componente z del momento angular de la partícula 1 se tiene:

$$[\mathbf{L}_{1z}, U] = \frac{\hbar}{i} \left(x_1 \frac{\partial}{\partial y_1} - y_1 \frac{\partial}{\partial x_1} \right) \quad , \quad (5.50)$$

que, en general, será distinto de cero. Es decir, debido a $U(r)$, las componentes de los \mathbf{L}_i dejan de ser constantes de movimiento. Pero podemos intentar ver que sucede con el momento angular total, $\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2$. Si tomamos la componente z de este operador vectorial, y calculamos su conmutador con H , tenemos:

$$\begin{aligned} [\mathbf{L}_z, H] &= [\mathbf{L}_z, U] = [\mathbf{L}_{1z}, U] + [\mathbf{L}_{2z}, U] = \frac{\hbar}{i} \left(x_1 \frac{\partial U}{\partial y_1} - y_1 \frac{\partial U}{\partial x_1} + x_2 \frac{\partial U}{\partial y_2} - y_2 \frac{\partial U}{\partial x_2} \right) = \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{v'}{r} (x_1(y_1 - y_2) - y_1(x_1 - x_2) - x_2(y_1 - y_2) + y_2(x_1 - x_2)) = 0 \quad (5.51) \end{aligned}$$

Vemos entonces que el momento angular total \mathbf{L}_i es una constante de movimiento, como sucede en mecánica cuántica. Este resultado lo hemos obtenido para el caso particular en el que sumamos dos momentos angulares orbitales. A menudo se presentarán en mecánica cuántica el problema de sumar dos momentos angulares cualesquiera (sean orbitales o de espín, o combinaciones de ellos). Por ello debemos desarrollar un método que nos permite hacer esto fácilmente. Para ello, comenzaremos con el ejemplo sencillo de la suma de dos espines $s = 1/2$, en el apartado 7, del que sacaremos algunas directrices, para luego aplicarlas al caso general, en la sección 8.

7. Suma de espines $s = 1/2$

Para describir un sistema compuesto de dos espines, tomamos como base el conjunto de vectores obtenidos como producto tensorial de cada uno de los vectores que describen a una partícula de espín $s = 1/2$, los vectores $\{|\pm\rangle\}$. La base que decimos será entonces $\{|\varepsilon_1\rangle \otimes |\varepsilon_2\rangle\} \equiv \{|\varepsilon_1\rangle|\varepsilon_2\rangle\}$, donde los $\varepsilon_i = \pm$, y que escribiremos de forma más abreviada como $\{|\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle\}$. Estos vectores son autovectores de los operadores S_i^2 y de los S_{iz} ²:

$$S_i^2 |\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle \quad (5.52)$$

$$S_{iz} |\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle = \varepsilon_i\hbar |\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle \quad (5.53)$$

Como queremos expresar estos vectores en otra base, en la que entre el operador \mathbf{S}^2 , debemos definir el espín total, $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$, comprobando que \mathbf{S} es un momento angular, ya que obedece las relaciones de conmutación que definen un momento angular.

Tenemos que realizar un cambio de base. Partimos de una base dada por un conjunto completo de observables compatibles, dado mediante $\{S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z}\}$, y debemos cambiar a otro, dado por $\{S_1^2, S_2^2, S^2, S_z\}$, para lo que construiremos una base cuyos vectores denotaremos por $\{|SM\rangle\}$, en vista de que queremos obtener:

$$S^2 |SM\rangle = S(S+1)\hbar^2 |SM\rangle \quad (5.54)$$

$$S_z |SM\rangle = M\hbar |SM\rangle \quad (5.55)$$

$$S_i^2 |SM\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |SM\rangle \quad (5.56)$$

Estas son las relaciones habituales de vectores y valores propios de un momento angular S .

Está claro que los $|\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle$ son autovectores de la componente z del espín total, ya que $S_z |\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle = \frac{\hbar}{2}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) |\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle$. Como $\varepsilon_i = \pm 1$, entonces los valores posibles de M son

²Los índices i hacen referencia a las partículas 1 y 2

$-1, 0, 1$, que es lo que esperaríamos para un momento angular con $S = 1$ ($M = -1, 0, 1$) ó $S = 0$ ($M = 0$).

Para el caso $M = 1$, la única posibilidad es que $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1$, que se corresponde a $|++\rangle$ (ambos espines “hacia arriba”). Análogamente, para el caso $M = -1$, el único autovector posible es el $|--\rangle$ (ambos espines “hacia abajo”). Estos dos autovalores de M son, por tanto, no degenerados. Pero el caso $M = 0$ es distinto ya que podemos tener $\varepsilon_1 = 1$ y $\varepsilon_2 = -1$, o bien $\varepsilon_1 = -1$ y $\varepsilon_2 = 1$. Por lo tanto, $M = 0$ es doblemente degenerado.

La matriz que representa el operador S_z es:

$$S_z \equiv \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}_{|\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle} \quad (5.57)$$

El subíndice hace referencia a la base en la que se escribe la matriz. El operador \mathbf{S}^2 se puede obtener de varias formas, ya que:

$$\mathbf{S}^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2 \quad (5.58)$$

$$\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2 = S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y} + S_{1z}S_{2z} = S_{1z}S_{2z} + \frac{1}{2}(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}) \quad (5.59)$$

La matriz que representa entonces al operador \mathbf{S}^2 es:

$$S^2 \equiv \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}_{|\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle} \quad (5.60)$$

S_z ya es diagonal en esta base. Por los teoremas que vimos en los primeros capítulos, ahora solo resta diagonalizar la restricción de \mathbf{S}^2 al subespacio generado por $\{|+-\rangle, |-+\rangle\}$ (el subespacio correspondiente a $M = 0$), es decir, la parte central de \mathbf{S}^2 , ya que es la que debería romper la degeneración de S_z y no lo hace. En definitiva, hay que diagonalizar la submatriz:

$$S_0^2 \equiv \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.61)$$

Si designamos con $\lambda\hbar^2$, los autovalores, se tiene que $\lambda = 2$ o bien $\lambda = 0$. Los correspondientes autovectores son:

$$\lambda = 2 \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle + |-+\rangle] \quad (5.62)$$

$$\lambda = 0 \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} [|+-\rangle - |-+\rangle] \quad (5.63)$$

Encontramos entonces, en definitiva, que, en la base del espín total, el operador \mathbf{S}^2 tiene dos autovalores posibles, $2\hbar^2$ y 0 . Como $S^2 |SM\rangle = S(S+1)\hbar^2 |SM\rangle$, tenemos que los valores posibles de S son, respectivamente, $S = 1$ y $S = 0$. Los autovectores asociados a $S = 1$ son:

$$|++\rangle \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \quad |--\rangle$$

A su vez, éstos son autovectores de S_z , con autovalores:

$$\begin{aligned} |++\rangle &\longrightarrow M = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) &\longrightarrow M = 0 \\ |--\rangle &\longrightarrow M = -1 \end{aligned}$$

Por otro lado, asociado a $S = 0$, solo existe un autovector, $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle)$, con autovalor de S_z dado por $M = 0$.

Tenemos, tal y como cabría esperar, que, para cada S , los autovalores posibles de S_z son de la forma $-S, -S+1, \dots, 0, \dots, S-1, S$. Por otro lado, hemos visto que los vectores que obtenemos como base son de la forma:

$$\begin{aligned} \text{singlete} \quad |00\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) \\ \text{triplete} \quad \begin{cases} |11\rangle = |++\rangle \\ |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \\ |1\bar{1}\rangle = |--\rangle \end{cases} \end{aligned}$$

Por último, destacar algunas propiedades de simetría de la base anterior. El vector $|00\rangle$ es lo que se conoce como singlete (dado que aparece solo), y es *antisimétrico* respecto del intercambio de dos partículas. El conjunto de vectores $|1M\rangle$, al estar compuesto por tres elementos, es lo que se conoce como triplete, y es *simétrico* respecto del intercambio de dos espines. Estas propiedades de simetría, que podrían considerarse fruto de la casualidad, serán de gran importancia al tratar partículas idénticas, y aparecerán con frecuencia en la mecánica cuántica. Además, ofrece una regla para recordar la forma de los vectores de la base. De los vectores $|1M\rangle$ han de formar parte, claramente, los vectores $|++\rangle$ (con $M = 1$, pues los espines están “hacia arriba”, y $|--\rangle$ (con $M = -1$, ya que los espines se encuentran “hacia abajo”). El otro vector vector que falta para completar el triplete ha de tener $M = 0$ y por tanto ser una combinación lineal de los vectores $|+-\rangle$ y $|-+\rangle$ (que, además, son los que faltan aparte de los $|++\rangle$ y $|--\rangle$). Pero como ha de ser simétrico, como el resto del triplete, y estar normalizado, entonces está claro que ha de ser $|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle)$. Finalmente, el estado singlete, con $S = M = 0$, ha de ser también una combinación lineal de los $|+-\rangle$ y $|-+\rangle$. Pero como ha de ser antisimétrico, entonces $|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)$.

8. Método general de suma de momentos angulares

8.1. Introducción

Sea un momento angular \mathbf{J} y una base $\{|k, j, m\rangle\}$ asociada a \mathbf{J} . Se cumplen entonces las siguientes ecuaciones de valores propios:

$$\mathbf{J}^2 |k, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |k, j, m\rangle \quad (5.64)$$

$$J_z |k, j, m\rangle = m\hbar |k, j, m\rangle \quad (5.65)$$

Además, se tienen los operadores J_{\pm} , cuya acción viene dada por:

$$J_{\pm} |k, j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |k, j, m \pm 1\rangle \quad (5.66)$$

Llamemos $\varepsilon(k, j)$ a los subespacios generados por los vectores de la base correspondiente a k y j fijos. Estos subespacios:

- Son $(2j+1)$ -dimensionales.
- Son invariantes bajo la acción de \mathbf{J}^2 , J_z y $F(\mathbf{J})$ en general, es decir, los elementos de matriz no nulos de estos operadores se encuentran solo en cada subespacio $\varepsilon(k, j)$.
- Sus elementos de matriz, en cada subespacio $\varepsilon(k, j)$, son independientes de k .

Este pequeño resumen anterior contiene la información básica que necesitaremos de la teoría del momento angular de un sistema. Ahora consideremos dos subsistemas distintos (que indicaremos a partir de ahora como 1 y 2). El espacio de estados del sistema conjunto es el producto tensorial de los espacios de estados de los sistemas por separado, $\varepsilon = \varepsilon_1 \otimes \varepsilon_2$. Tomamos como base de estados del sistema los vectores de la forma $|k_1, k_2; j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$, con:

$$|k_1, k_2; j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = |k_1, j_1, m_1\rangle \otimes |k_2, j_2, m_2\rangle \quad (5.67)$$

El espacio de estados se puede descomponer en la suma directa:

$$\varepsilon = \sum_{\oplus} \varepsilon(k_1, k_2; j_1, j_2) = \sum_{\oplus} \varepsilon_1(k_1; j_1) \otimes \varepsilon(k_2; j_2) \quad (5.68)$$

Los subespacios $\varepsilon(k_1, k_2; j_1, j_2)$ son $(2j_1+1)(2j_2+1)$ -dimensionales.

El momento angular total del sistema, \mathbf{J} , es la suma de los momentos angulares³ \mathbf{J}_1 y \mathbf{J}_2 , es decir:

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 \quad (5.69)$$

³En realidad, es la suma de las extensiones de los operadores \mathbf{J}_1 y \mathbf{J}_2 , desde los espacios originales en que actuaban, ε_1 y ε_2 , respectivamente, al espacio de estados ε .

Se puede comprobar, de la definición anterior, que se cumplen las siguientes relaciones de conmutación:

$$[J_z, \mathbf{J}_1^2] = [J_z, \mathbf{J}_2^2] = [\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_1^2] = [\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_2^2] = [J_{1z}, J_z] = [J_{2z}, J_z] = [\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2] = 0 \quad (5.70)$$

El operador \mathbf{J}^2 se puede expresar como:

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2J_{1z}J_{2z} + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+} \quad (5.71)$$

8.2. Cambio de base

Los vectores $\{|k_1, k_2; j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$ son autovectores simultáneamente de los operadores:

$$\mathbf{J}_1^2, \quad \mathbf{J}_2^2, \quad J_{1z} \quad \text{y} \quad J_{2z}, \quad (5.72)$$

con sus respectivos autovalores. También los operadores

$$\mathbf{J}_1^2, \quad \mathbf{J}_2^2, \quad J^2 \quad \text{y} \quad J_z \quad (5.73)$$

conmutan entre sí; nosotros buscamos una base basada en los operadores 5.73 para el estudio del momento angular total, por lo que habrá que realizar un cambio de base de 5.72 a 5.73. Es decir, buscamos vectores, que denotaremos (para dos valores j_1 y j_2 fijos) como $|J, M\rangle$ que satisfagan simultáneamente:

$$\mathbf{J}^2 |J, M\rangle = J(J+1)\hbar^2 |J, M\rangle \quad (5.74)$$

$$J_z |J, M\rangle = M\hbar |J, M\rangle \quad (5.75)$$

Además, por supuesto, deberán ser autovectores de \mathbf{J}_1^2 y \mathbf{J}_2^2 , con autovalores asociados a j_1 y a j_2 , respectivamente. Como los subespacios $\varepsilon(k_1, k_2; j_1, j_2)$ tienen elementos de matriz no nulos solo dentro de cada subespacio, el problema consistirá “solo” en realizar un cambio de base dentro de cada subespacio. Además, como los elementos de matriz de cualquier operador función de \mathbf{J}_1^2 , \mathbf{J}_2^2 , J^2 y J_z son independientes de los valores de k_1 y k_2 , el problema de la diagonalización será el mismo en cada subespacio. Por tanto, adoptaremos la siguiente notación reducida:

$$\begin{aligned} \varepsilon(k_1, k_2; j_1, j_2) &\longrightarrow \varepsilon(j_1, j_2) \\ |k_1, k_2; j_1, j_2; m_1, m_2\rangle &\longrightarrow |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \end{aligned}$$

Por otro lado, como \mathbf{J} es un momento angular, y los $\varepsilon(j_1, j_2)$ son invariantes bajo la acción de cualquier función de \mathbf{J} , se tiene que $\varepsilon(j_1, j_2)$ se puede descomponer en suma directa de los distintos subespacios asociados a \mathbf{J} (que tendrán que ver con los autovalores de este operador), llamémoslos $\varepsilon(k, J)$, que son invariantes bajo la acción de \mathbf{J}^2 , J_z y J_\pm , esto es:

$$\varepsilon(j_1, j_2) = \sum_{\oplus} \varepsilon(k, J) \quad (5.76)$$

Tenemos, por ahora, un doble objetivo:

- Dados j_1 y j_2 , encontrar los valores posibles de J , y cuantos subespacios $\varepsilon(k, J)$ existen para cada par de valores j_1 y j_2 .
- Expresar los autovectores de \mathbf{J}^2 y J_z en función de los vectores de la “antigua” base, es decir, 5.72.

8.3. Autovalores de J_z

Asumimos, sin pérdida de generalidad alguna, que $j_1 \geq j_2$. Los vectores $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ son autovectores de J_z , luego

$$J_z |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = (m_1 + m_2)\hbar |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle, \quad (5.77)$$

y sus autovalores son $M = m_1 + m_2$. Como los valores máximos que pueden alcanzar m_1 y m_2 son j_1 y j_2 , respectivamente, y los mínimos $-j_1$ y $-j_2$, entonces los valores posibles de M son:

$$M = j_1 + j_2, \quad j_1 + j_2 - 1, \quad \dots, \quad -j_1 - j_2 + 1, \quad -(j_1 + j_2) \quad (5.78)$$

Ahora estudiaremos la degeneración⁴ $g_{j_1, j_2}(M)$ de cada autovalor M , es decir, el número de vectores que hay con el mismo autovalor. Para ello consideremos el gráfico 5.1, en el que se muestran los valores posibles de m_1 y m_2 y el valor M al que dan lugar, para dos valores concretos de j_1 y j_2 ($j_1 = 3$ y $j_2 = 2$). Con cada punto va asociado un vector $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$. Todos los puntos situados sobre la misma línea dan origen a un mismo valor de M (como se puede comprobar matemáticamente de manera fácil), luego el número de tales puntos es el número de vectores asociados al mismo autovalor M , es decir, la degeneración de dicho autovalor $g_{j_1, j_2}(M)$. Así, $g_{j_1, j_2}(j_1 + j_2) = 1$, $g_{j_1, j_2}(j_1 + j_2 - 1) = 2$, \dots , $g_{j_1, j_2}(j_1 - j_2) = 2j_2 - 1$. Conforme M disminuye en una unidad, su degeneración aumenta (también en una unidad), hasta llegar a $j_1 - j_2$. A partir de ahí toma un valor constante hasta llegar a $M = -(j_1 - j_2)$, valor tras el cual la degeneración empieza a disminuir de forma simétrica con respecto a como subía, es decir, se tiene $g_{j_1, j_2}(-M) = g_{j_1, j_2}(M)$, de donde, concretando, $g_{j_1, j_2}(-(j_1 + j_2)) = 1$. Esta información se resume en el gráfico 5.2.

Por último, resaltar que los valores de M serán enteros si j_1 y j_2 son a la vez enteros o semienteros, mientras que si uno de los dos es entero y el otro semientero, entonces los valores de M serán semienteros.

8.4. Autovalores de \mathbf{J}^2

Comentamos en el apartado anterior que el máximo valor que puede tomar M es $M = j_1 + j_2$. Por otro lado, como los valores de M de un momento angular van desde

⁴Explicarlo más matemáticamente

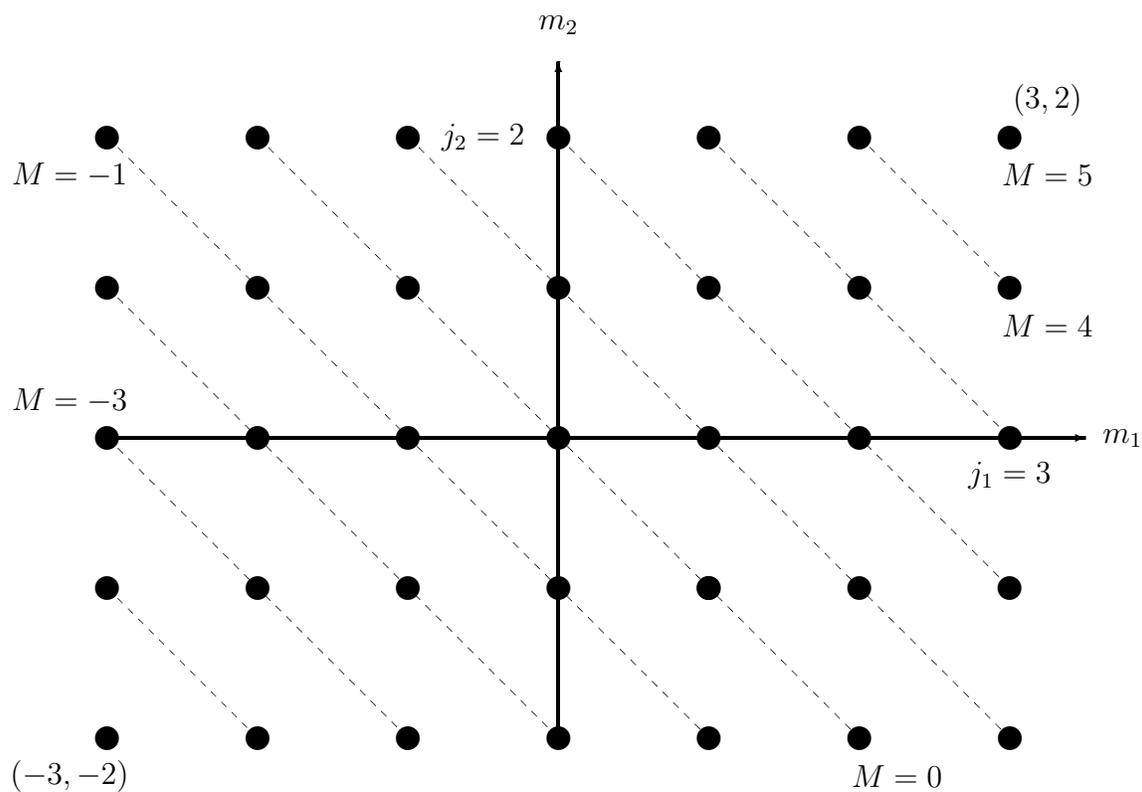


Figura 5.1: Valores de M y autovectores asociados.

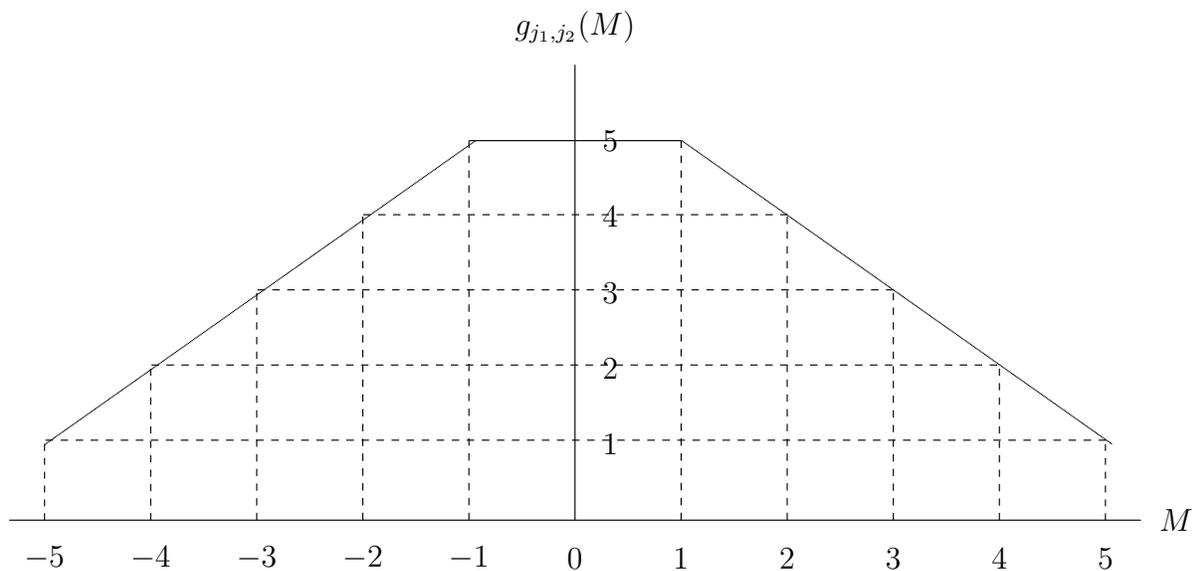


Figura 5.2: Valores de M y degeneración asociada.

– hasta J , deducimos que no hay valores de J mayores que $j_1 + j_2$. Con $J = j_1 + j_2$ se asocia un subespacio único, $\varepsilon(J = j_1 + j_2)$, en el que está el único vector con $M = j_1 + j_2$. Este subespacio también contiene un único vector (porque \mathbf{J} es un momento angular) con autovalor de J_z asociado a $M = j_1 + j_2 - 1$. Ahora bien, este autovalor es doblemente degenerado, luego existe otro vector en $\varepsilon(j_1, j_2)$. Dicho vector está en otro subespacio, $\varepsilon(J = j_1 + j_2 - 1)$, y además, está en él de forma no degenerada. Formalicemos esto un poco más. Sea $p_{j_1, j_2}(J)$ el número de subespacios de un autovalor asociado a J . Entonces se tiene:

$$g_{j_1, j_2}(M) = p_{j_1, j_2}(|M|) + p_{j_1, j_2}(|M| + 1) + \dots + p_{j_1, j_2}(j_1 + j_2) \quad (5.79)$$

Podemos invertir la relación para obtener $p_{j_1, j_2}(J)$:

$$p_{j_1, j_2}(J) = g_{j_1, j_2}(M = J) - g_{j_1, j_2}(M = J + 1) \quad (5.80)$$

De aquí podemos observar que:

- $p_{j_1, j_2}(J > j_1 + j_2) = 0$, ya que $g_{j_1, j_2}(M) = 0$ para $|M| > j_1 + j_2$.
- $p_{j_1, j_2}(j_1 - j_2 \leq J \leq j_1 + j_2) = 1$, porque $g_{j_1, j_2}(M)$ disminuye en una unidad al aumentar el valor de M en una unidad.
- $p_{j_1, j_2}(J < j_1 - j_2) = 0$, porque no podemos aceptar valores de $p_{j_1, j_2}(J)$ negativos, no tendría sentido.

Es decir, hemos llegado a la conclusión de que:

$$\boxed{J = j_1 + j_2, \quad j_1 + j_2 - 1, \quad \dots, \quad |j_1 - j_2|} \quad (5.81)$$

Hemos puesto $|j_1 - j_2|$ para generalizar al caso en que fuera $j_1 < j_2$, aunque no tiene mayor trascendencia, claro está.

Otra forma de ver que el valor mínimo de J ha de ser $j_1 - j_2$ es ver la dimensión de $\varepsilon(j_1, j_2)$. Llamemos x a ese valor mínimo de J . Para cada valor de J hay un subespacio de dimensión $2J + 1$ debida a los distintos valores posibles de M . También sabemos que el valor máximo de J es $J = j_1 + j_2$. Como la dimensión de $\varepsilon(j_1, j_2)$ es $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$, se debe cumplir:

$$\sum_{J=x}^{j_1+j_2} 2J + 1 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \quad (5.82)$$

Desarrollando la suma, se encuentra que $x = |j_1 - j_2|$.

8.5. Autovectores de \mathbf{J}^2 y J_z

Formulario general

Mecánica ondulatoria

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\psi}(p) e^{ipx/\hbar} dp \\ \bar{\psi}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx \\ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} dx &= \sqrt{2\pi} \sigma \\ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik(x-x')} dk &= \delta(x-x')\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}j(x) &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x} \psi - \psi^* \frac{\partial\psi}{\partial x} \right) \\ \rho &= |\psi|^2 \\ \frac{\partial\rho}{\partial t} + \text{div} j(x) &= 0\end{aligned}$$

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

$$\text{Potencial delta: } \left(\frac{d\psi}{dx} \right)_{0+} - \left(\frac{d\psi}{dx} \right)_{0-} = \frac{2m}{\hbar^2} \alpha \psi(0)$$

$$\begin{aligned}
i\hbar\partial_t|\psi\rangle &= H|\psi\rangle \\
H|\varphi_n^i\rangle &= E_n|\varphi_n^i\rangle \\
|\psi(t)\rangle &= \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n(0)\rangle \\
P &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \\
H &= \frac{P^2}{2m} + V(x) \quad (\text{Expresión general}) \\
E\bar{\psi}(p) &= \frac{p^2}{2m}\bar{\psi}(p) + \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp' \bar{V}(p) \bar{\psi}(p-p')
\end{aligned}$$

Problemas unidimensionales

Pozo infinito

Centrado en origen, anchura $2a$

$$\begin{aligned}
E_n &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2 \\
\psi_n(x) &= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right), & n = 2, 4, 6, \dots \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{n\pi}{2a}x\right), & n = 1, 3, 5, \dots \end{cases}
\end{aligned}$$

Centrado en $L/2$, anchura L

$$\begin{aligned}
E_n &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \\
\psi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)
\end{aligned}$$

Oscilador armónico

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega X^2$$

$$\check{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X$$

$$\check{P} = \sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}P$$

$$\check{H} = \frac{1}{2}(\check{P}^2 + \check{X}^2)$$

$$H = \hbar\omega\check{H}$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\check{X} + i\check{P})$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\check{X} - i\check{P})$$

$$\check{H} = a^\dagger a + \frac{1}{2} = N + \frac{1}{2}$$

$$a^\dagger |\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle$$

$$a |\varphi_n\rangle = \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle$$

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n |\varphi_0\rangle$$

$$\langle \varphi_{n'} | a | \varphi_n \rangle = \sqrt{n} \delta_{n',n-1}$$

$$\langle \varphi_{n'} | a^\dagger | \varphi_n \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1}$$

$$\langle \varphi_{n'} | X | \varphi_n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} + \sqrt{n} \delta_{n',n-1}]$$

$$\langle \varphi_{n'} | P | \varphi_n \rangle = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} [\sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} - \sqrt{n} \delta_{n',n-1}]$$

$$\begin{aligned}
\varphi_n(x) &= \left[\frac{1}{2^n n!} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^n \right]^{1/2} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \left[\frac{m\omega}{\hbar} x - \frac{d}{dx} \right]^n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \\
\varphi_0(x) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \cdot e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \\
\varphi_1(x) &= \left[\frac{4}{\pi} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^3 \right]^{1/4} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \\
\varphi_2(x) &= \left(\frac{m\omega}{4\pi\hbar} \right)^{1/4} \left[2 \frac{m\omega}{\hbar} x^2 - 1 \right] e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}
\end{aligned}$$

Momento angular

General

$$\begin{aligned}
J &= J_x \pm iJ_y \\
[J_i, J_j] &= i\hbar \varepsilon_{i,j,k} J_k \\
[J^2, \mathbf{J}] &= 0 \\
[J_z, J] &= \pm \hbar J \\
[J_+, J_-] &= 2\hbar J_z \\
JJ_{\mp} &= J_x^2 + J_y^2 \pm \hbar J_z = J^2 - J_z^2 \pm \hbar J_z \\
J^2 &= \frac{1}{2} (J_+ J_- + J_- J_+) + J_z^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
J^2 |k, j, m\rangle &= j(j+1)\hbar^2 |k, j, m\rangle \\
J_z |k, j, m\rangle &= m\hbar |k, j, m\rangle \\
J^2 J |k, j, m\rangle &= j(j+1)\hbar^2 |k, j, m\rangle \\
J_z J |k, j, m\rangle &= (m \pm 1)\hbar |k, j, m\rangle \\
J |k, j, m\rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |k, j, m \pm 1\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle k, j, m | J_z | k', j', m' \rangle &= m\hbar \delta_{k,k'} \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \\
\langle k, j, m | J^2 | k', j', m' \rangle &= j(j+1)\hbar^2 \delta_{k,k'} \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \\
\langle k, j, m | J | k', j', m' \rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m'(m' \pm 1)} \delta_{k,k'} \delta_{j,j'} \delta_{m,m' \pm 1}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle k, j, m | J_x | k', j', m' \rangle &= \frac{\hbar}{2} \delta_{k,k'} \delta_{j,j'} \\ &\left[\sqrt{j(j+1) - m'(m'+1)} \delta_{m,m'+1} + \sqrt{j(j+1) - m'(m'-1)} \delta_{m,m'-1} \right] \\ \langle k, j, m | J_y | k', j', m' \rangle &= \frac{\hbar}{2i} \delta_{k,k'} \delta_{j,j'} \\ &\left[\sqrt{j(j+1) - m'(m'+1)} \delta_{m,m'+1} - \sqrt{j(j+1) - m'(m'-1)} \delta_{m,m'-1} \right] \end{aligned}$$

$$(J_z)^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (J^2)^{(1/2)} = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$(J_x)^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (J_y)^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$(J_z)^{(1)} = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (J^2)^{(1)} = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$(J_x)^{(1)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (J_y)^{(1)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

Momento angular orbital

$$\begin{aligned} L_x &= i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ L_y &= i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\sin \varphi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ L_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ L^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} L^2 Y_l^m(\theta, \varphi) &= l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta, \varphi) \\ L_z Y_l^m(\theta, \varphi) &= m\hbar Y_l^m(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
L &= \hbar e^{\pm i\varphi} \left[\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \\
L_+ Y_l^l(\theta, \varphi) &= 0 \Rightarrow Y_l^l(\theta, \varphi) = c_l (\sin \theta)^l e^{il\varphi} \\
c_l &= \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Y_0^0(\theta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\
Y_1^{\pm 1}(\theta, \varphi) &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} \\
Y_1^0(\theta, \varphi) &= \mp \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\
Y_2^{\pm 2}(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi} \\
Y_2^{\pm 1}(\theta, \varphi) &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi} \\
Y_2^0(\theta, \varphi) &= \mp \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)
\end{aligned}$$

Composición de espines

$$\begin{aligned}
S_{1x} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & S_{2x} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\
S_{1y} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix} & S_{2y} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} \\
S_{1z} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} & S_{2z} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

$$P_{21}^s |SM\rangle = (-1)^{S+1} |SM\rangle$$

$$\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2} (S^2 - S_1^2 - S_2^2)$$

Teoría de perturbaciones

General

$$H = H_0 + W = H_0 + \lambda \hat{W}$$

$$|\varphi_n\rangle = |0\rangle + \lambda |1\rangle + \lambda^2 |2\rangle + \dots$$

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \lambda \varepsilon_1 + \lambda^2 \varepsilon_2 + \dots$$

Nivel no degenerado

$$\varepsilon_1 = \langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_n \rangle$$

$$|1\rangle = \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} |\varphi_p^i\rangle$$

$$\varepsilon_2 = \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{|\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0}$$

Nivel degenerado

$$\hat{W}^n |0\rangle = \varepsilon_1 |0\rangle$$