

Los Alamos Electronic Archives: physics/9808031

*La verdad os hara libres
Universidad de Guanajuato
IFUG, León, Guanajuato, México*

MECANICA CUANTICA I.

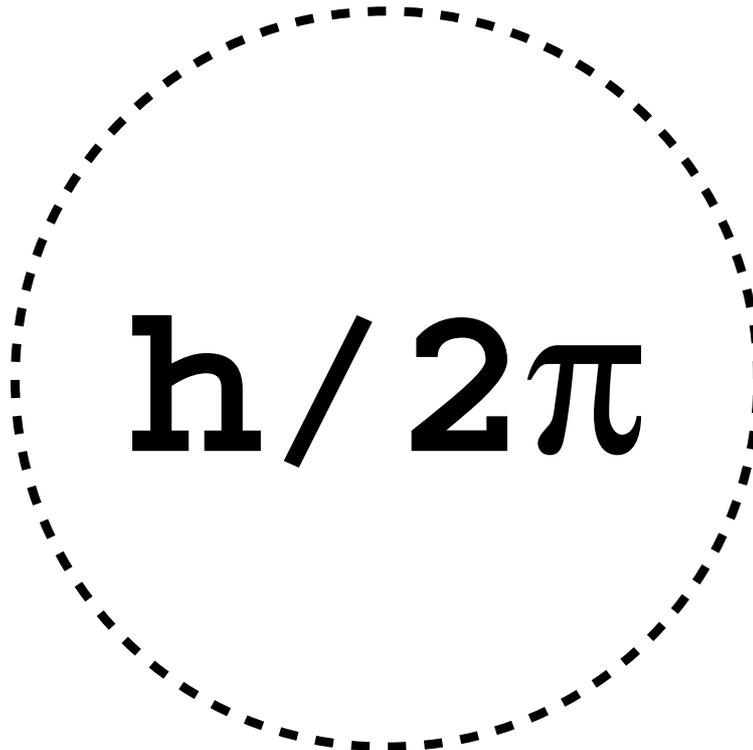
MC I

Haret C. Rosu

e-mail: rosu@ifug3.ugto.mx

fax: 0052-47187611

phone: 0052-47183089



A cargo del Prof. Haret Rosu para el beneficio de los estudiantes
presentes y futuros del IFUG y otros lugares.

Primer curso de mecánica cuántica en castellano publicado en Internet.

Copyright ©1998. All rights are reserved. H.C. ROSU

Julio de 1998

Abstract

This is the first Internet course on elementary quantum mechanics written in Spanish (“castellano”) for the benefit of Spanish speaking students. I thank my eight Mexican students at the Institute of Physics, University of Guanajuato, Leon, (IFUG), for the collaboration that made this possible. The topics included refer to the postulates of quantum mechanics, one-dimensional barriers and wells, angular momentum, WKB method, harmonic oscillator, hydrogen atom, quantum scattering, and partial waves.

INDICE DE CONTENIDO

- 0. Introducción General** - Haret C. Rosu
- 1. Los Postulados de la MC** - Martin Gilberto Castro Esparza
- 2. Potenciales Barreras y Pozos** - Juan Manuel Rodríguez Vizcaíno
- 3. El Momento Angular** - Teodoro Córdova Fraga
- 4. El Método WKB** - Luis Antonio García Trujillo
- 5. El Oscilador Armónico** - José Torres Arenas
- 6. El Átomo de Hidrógeno** - Edgar Alvarado Anell
- 7. La Dispersión en la MC** - Daniel Jiménez Alvarez
- 8. Las Ondas Parciales** - Pedro Basilio Espinoza Padilla

Incluye también alrededor de 25 problemas con soluciones.

0. Introduction

The energy quanta occurred in 1900 in works of Max Planck (Nobel prize, 1918) on the black body electromagnetic radiation. Planck's "quanta of light" have been used by Einstein (Nobel prize, 1921) to explain the photoelectric effect, but the first "quantization" of a quantity having units of action (the angular momentum) belongs to Niels Bohr (Nobel Prize, 1922). This opened the road to the universality of quanta, since the action is the basic functional to describe any type of motion. However, only in the 1920's the formalism of quantum mechanics has been developed in a systematic manner and the remarkable works of that decade contributed in a decisive way to the rising of quantum mechanics at the level of fundamental theory of the universe from the mankind standpoint and one of the most successful from the point of view of technology. Moreover, it is quite probable that many of the cosmological mysteries may be disentangled by means of various quantization procedures of the gravitational field leading to our progress in understanding the origins of the universe. On the other hand, in recent years, there is a strong surge of activity in the information aspect of quantum mechanics, that has not been very much exploited in the past, aiming at a very attractive "quantum computer" technology.

At the philosophical level, the famous paradoxes of quantum mechanics (showing the difficulties of the 'quantum' thinking) are actively pursued ever since they have been first posed. Perhaps the famous of them is the EPR paradox (Einstein, Podolsky, Rosen, 1935) on the existence of elements of physical reality, or in EPR words: "If, without in any way disturbing a system, we can predict with certainty (i.e., with probability equal to unity) the value of a physical quantity, then there exists an element of physical reality corresponding to this physical quantity." Another famous paradox is that of Schrödinger's cat which is related to the fundamental quantum property of entanglement and the way we understand and detect it. What one should emphasize is that all these delicate points are the source of many interesting experiments (such as the so-called "teleportation" of quantum states) pushing up the technology.

Here, we present eight elementary topics in nonrelativistic quantum mechanics from a course in Spanish ("castellano") on quantum mechanics that I taught in the Institute of Physics, University of Guanajuato (IFUG), León, Mexico, during January-June semester of 1998. The responsibility of the idiom belongs mostly to the eight students, respectively.

Haret C. Rosu

0. Introducción General

Los cuántos de energía surgieron en 1900 como consecuencia de los trabajos de Max Planck (premio Nobel 1918) sobre el problema de la radiación del cuerpo negro. Los “cuantos de luz” de Planck fueron usados por Einstein (premio Nobel 1921) para explicar el efecto fotoeléctrico, pero la primera “cuantificación” de una cantidad que tiene las unidades de una acción (el momento angular) se debe a Niels Bohr (premio Nobel 1922). Eso abrió el camino de la universalidad de los cuántos ya que la acción es la función básica para describir cualquier tipo de movimiento. Aún así, sólo los años veinte se consideran como el inicio del formalismo cuántico que levantó a la mecánica cuántica al nivel de teoría fundamental del universo y una de las más excitosas en cuanto a la tecnología. En verdad, es muy probable que muchos de los misterios cosmológicos están por ejemplo detrás de las diferentes maneras de cuantificar el campo gravitacional y tales avances pueden contribuir al entendimiento de los orígenes del universo. Por otro lado, el aspecto informático de la mecánica cuántica, que no se aprovechó en el pasado, se está desarrollando de una manera muy activa en los últimos años con el propósito de investigar la posibilidad de la construcción de las llamadas “computadoras cuánticas”. En la parte filosófica cabe mencionar que en la mecánica cuántica hay paradojas famosas que todavía se mantienen en polemica y que reflejan las dificultades de la lógica que impone la manera de pensar cuántica (y/o probabilística). Una de las más celebres es la de Einstein (que nunca acepto por completo la MC), Podolsky y Rosen (EPR, 1935) sobre si hay o no “elementos verdaderos de la realidad física” (según Einstein la MC prohíbe la existencia independiente del acto de medición de los sistemas físicos). Otra de igual celebridad es la del “gato de Schrödinger”. Lo que se debe subrayar es que todos estos puntos teóricos delicados generan experimentos muy interesantes (como son por ejemplo los de la llamada “teletransportación” de estados cuánticos) que impulsan a la tecnología. Lo que sigue son algunos temas introductivos en la mecánica cuántica norelativista que sirvieron como base para el curso de maestría de mecánica cuántica I en el IFUG durante el semestre Enero-Junio de 1998. Este curso fue impartido por mí a los estudiantes enlistados, los cuales se encargaron de los temas correspondientes. La responsabilidad del idioma pertenece en gran parte a cada uno de los estudiantes.

Haret C. Rosu

1. LOS POSTULADOS DE LA MC

Los siguientes 6 postulados se pueden considerar como la base de la teoría y los experimentos de la mecánica cuántica.

P1.- A cualquier cantidad física L le corresponde un operador Hermitiano \hat{L} .

P2.- A cualquier estado (físico) estacionario de un sistema físico le corresponde una función de onda normalizada ψ ($\|\psi\|^2 = 1$).

P3.- La cantidad física L puede tomar solo los valores propios del operador \hat{L} .

P4.- Lo que se mide es siempre el valor promedio \bar{L} de la cantidad L en el estado ψ , la cual en teoría es el elemento de matriz diagonal

$$\langle f | \hat{L} | f \rangle = \bar{L}.$$

P5.- Los elementos de matriz de los operadores coordenada cartesiana y momento \hat{x}_i y \hat{p}_k , calculados entre las funciones de onda f y g satisfacen a las ecuaciones de Hamilton de la mecánica clásica en la forma;

$$\frac{d}{dt} \langle f | \hat{p}_i | g \rangle = - \langle f | \frac{\partial \hat{H}}{\partial x_i} | g \rangle, \quad \frac{d}{dt} \langle f | \hat{x}_i | g \rangle = \langle f | \frac{\partial \hat{H}}{\partial p_i} | g \rangle$$

donde \hat{H} es el operador Hamiltoniano.

P6.- Los operadores \hat{p}_i y \hat{x}_k tienen los siguientes conmutadores:

$$\begin{aligned} [\hat{p}_i, \hat{x}_k] &= -i\hbar\delta_{ik}, \\ [\hat{p}_i, \hat{p}_k] &= 0 \\ [\hat{x}_i, \hat{x}_k] &= 0, \end{aligned}$$

$$\hbar = h/2\pi = 1.0546 \times 10^{-27} \text{ erg.seg.}$$

- 1.- La correspondencia de una cantidad física L que tiene un análogo clásico $L(x_i, p_k)$ se hace sustituyendo x_i, p_k por \hat{x}_i, \hat{p}_k . La función L se supone que se puede desarrollar en serie de potencias. Si la función no contiene productos $x_k p_k$, el operador \hat{L} es directamente hermitiano.
Ejemplo:

$$T = (\sum_i^3 p_i^2)/2m \longrightarrow \hat{T} = (\sum_i^3 \hat{p}_i^2)/2m.$$

Si L contiene productos $x_i p_i$, \hat{L} no es hermitiano, en tal caso L se sustituye por $\hat{\Lambda}$ la parte hermitica de \hat{L} ($\hat{\Lambda}$ es un operador autoadjunto).
Ejemplo:

$$w(x_i, p_i) = \sum_i p_i x_i \longrightarrow \hat{w} = 1/2 \sum_i^3 (\hat{p}_i \hat{x}_i + \hat{x}_i \hat{p}_i).$$

Resulta también que el tiempo no es un operador sino un parámetro.

- 2.- (Probabilidad en el espectro discreto y continuo) Si ψ_n es función propia del operador \hat{L} , entonces:

$$\bar{L} = \langle n | \hat{L} | n \rangle = \langle n | \lambda_n | n \rangle = \lambda_n \langle n | n \rangle = \delta_{nn} \lambda_n = \lambda_n.$$

También se puede demostrar que $\bar{L}^k = (\lambda_n)^k$.

Si la función ϕ no es función propia de \hat{L} se usa el desarrollo en un sistema completo de \hat{L} , entonces:

Sean las siguientes definiciones:

$$\hat{L}\psi_n = \lambda_n \psi_n, \quad \phi = \sum_n a_n \psi_n$$

combinando estas dos definiciones obtenemos lo siguiente:

$$\hat{L}\phi = \sum_n \lambda_n a_n \psi_n.$$

Con las definiciones pasadas ya podremos calcular los elementos de matriz del operador L .
Entonces:

$$\langle \phi | \hat{L} | \phi \rangle = \sum_{n,m} a_m^* a_n \lambda_n \langle m | n \rangle = \sum_m |a_m|^2 \lambda_m,$$

lo cual nos dice que el resultado del experimento es λ_m con la probabilidad $|a_m|^2$.
Si el espectro es discreto: de acuerdo con el postulado 4 eso significa que $|a_m|^2$, o sea, los coeficientes del desarrollo en un sistema completo determinan las probabilidades de observar el valor propio λ_n .

Si el espectro es continuo: usando la siguiente definición

$$\phi(\tau) = \int a(\lambda)\psi(\tau, \lambda)d\lambda,$$

se calcularan los elementos de matriz para el espectro continuo

$$\begin{aligned} \bar{L} &= \langle \phi | \hat{L} | \phi \rangle \\ &= \int d\tau \int a^*(\lambda)\psi^*(\tau, \lambda)d\lambda \int \mu a(\mu)\psi(\tau, \mu)d\mu \\ &= \int \int a^*(\lambda)a(\mu)\mu \int \psi^*(\tau, \lambda)\psi(\tau, \mu)d\lambda d\mu d\tau \\ &= \int \int a^*(\lambda)a(\mu)\mu\delta(\lambda - \mu)d\lambda d\mu \\ &= \int a^*(\lambda)a(\lambda)\lambda d\lambda \\ &= \int |a(\lambda)|^2 \lambda d\lambda. \end{aligned}$$

En el caso continuo se dice que $|a(\lambda)|^2$ es la densidad de probabilidad de observar el valor de λ del espectro continuo. También vale

$$\bar{L} = \langle \phi | \hat{L} | \phi \rangle.$$

3.- Definición de la derivada con respecto a un operador:

$$\frac{\partial F(\hat{L})}{\partial \hat{L}} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F(\hat{L} + \epsilon \hat{I}) - F(\hat{L})}{\epsilon}.$$

4.- (Representación del momento) Cual es la forma concreta de \hat{p}_1 , \hat{p}_2 y \hat{p}_3 , si los argumentos de las funciones de onda son coordenada cartesiana x_i .

Vamos a considerar el siguiente conmutador:

$$\begin{aligned} [\hat{p}_i, \hat{x}_i^2] &= \hat{p}_i \hat{x}_i^2 - \hat{x}_i^2 \hat{p}_i \\ &= \hat{p}_i \hat{x}_i \hat{x}_i - \hat{x}_i \hat{p}_i \hat{x}_i + \hat{x}_i \hat{p}_i \hat{x}_i - \hat{x}_i \hat{x}_i \hat{p}_i \\ &= (\hat{p}_i \hat{x}_i - \hat{x}_i \hat{p}_i) \hat{x}_i + \hat{x}_i (\hat{p}_i \hat{x}_i - \hat{x}_i \hat{p}_i) \\ &= [\hat{p}_i, \hat{x}_i] \hat{x}_i + \hat{x}_i [\hat{p}_i, \hat{x}_i] \\ &= -i\hbar \hat{x}_i - i\hbar \hat{x}_i = -2i\hbar \hat{x}_i. \end{aligned}$$

En general se tiene:

$$\widehat{p}_i \widehat{x}_i^n - \widehat{x}_i^n \widehat{p}_i = -ni\hbar \widehat{x}_i^{n-1}.$$

Entonces para todas las funciones analíticas se tiene lo siguiente:

$$\widehat{p}_i \psi(x) - \psi(x) \widehat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_i}.$$

Ahora sea $\widehat{p}_i \phi = f(x_1, x_2, x_3)$ la acción de \widehat{p}_i sobre $\phi(x_1, x_2, x_3) = 1$. Entonces:

$$\widehat{p}_i \psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_1} + f_1 \psi \text{ y hay relaciones analogas para } x_2 \text{ y } x_3.$$

Del conmutador $[\widehat{p}_i, \widehat{p}_k] = 0$ se obtiene $\nabla \times \vec{f} = 0$, por lo tanto,
 $f_i = \nabla_i F$.

La forma más general de \widehat{P}_i es:

$\widehat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{\partial F}{\partial x_i}$, donde F es cualquier función. La función F se puede eliminar utilizando una transformación unitaria $\widehat{U}^\dagger = \exp \frac{i}{\hbar} F$.

$$\begin{aligned} \widehat{p}_i &= \widehat{U}^\dagger \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{\partial F}{\partial x_i} \right) \widehat{U} \\ &= \exp \frac{i}{\hbar} F \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{\partial F}{\partial x_i} \right) \exp \frac{-i}{\hbar} F \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \end{aligned}$$

resultando que $\widehat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \longrightarrow \widehat{p} = -i\hbar \nabla$.

- 5.- (Cálculo de la constante de normalización) Cualquier función de onda $\psi(x) \in L^2$ de variable x se puede escribir como:

$$\psi(x) = \int \delta(x - \xi) \psi(\xi) d\xi$$

y considerar la expresión como desarrollo de ψ en las funciones propias del operador coordenada $\hat{x} \delta(x - \xi) = \xi \delta(x - \xi)$. Entonces, $|\psi(x)|^2$ es la densidad de probabilidad de la coordenada en el estado $\psi(x)$. De aquí resulta la interpretación de la norma

$$\|\psi(x)\|^2 = \int |\psi(x)|^2 dx = 1.$$

El sistema descrito por la función $\psi(x)$ debe encontrarse en algún lugar del eje real.

Las funciones propias del operador momento son:

$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_i} = p_i \psi$, integrandola se obtiene $\psi(x_i) = A \exp \frac{i p_i x_i}{\hbar}$, x y p tienen espectro continuo y entonces se tiene que hacer la normalización con la función delta.

Cómo se obtiene la constante de normalización?

se puede obtener utilizando las siguientes transformadas de Fourier:

$$f(k) = \int g(x) \exp^{-ikx} dx, \quad g(x) = \frac{1}{2\pi} \int f(k) \exp^{ikx} dk.$$

También se obtiene de la siguiente manera:

Sea la función de onda no normalizada de la partícula libre

$$\phi_p(x) = A \exp \frac{ipx}{\hbar} \text{ y la fórmula}$$

$$\delta(x - x') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp^{ik(x-x')} dx$$

se ve que

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \phi_p^*(x) \phi_{p'}(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} A^* \exp \frac{-ip'x}{\hbar} A \exp \frac{ipx}{\hbar} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 \exp \frac{ix(p-p')}{\hbar} dx \\ &= |A|^2 \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \exp \frac{ix(p-p')}{\hbar} d\frac{x}{\hbar} \\ &= 2\pi\hbar |A|^2 \delta(p - p') \end{aligned}$$

entonces la constante de normalización es:

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}.$$

También resulta que las funciones propias del operador momento forman un sistema completo (en el sentido del caso continuo) para las funciones L^2 .

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int a(p) \exp \frac{ipx}{\hbar} dp$$

$$a(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) \exp \frac{-ipx}{\hbar} dx.$$

Estas fórmulas establecen la conexión entre las representaciones x y p .

- 6.- Representación p : La forma explícita de los operadores \hat{p}_i y \hat{x}_k se puede obtener de las relaciones de conmutación, pero también usando los núcleos

$$\begin{aligned}
x(p, \beta) &= U^\dagger x U = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \exp\left(\frac{-ipx}{\hbar}\right) x \exp\left(\frac{i\beta x}{\hbar}\right) dx \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int \exp\left(\frac{-ipx}{\hbar}\right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \beta} \exp\left(\frac{i\beta x}{\hbar}\right)\right) dx.
\end{aligned}$$

La integral pasada tiene la forma siguiente:

$$M(\lambda, \lambda') = \int U^\dagger(\lambda, x) \widehat{M} U(\lambda', x) dx, \text{ y usando } \hat{x}f = \int x(x, \xi) f(\xi) d\xi.$$

Entonces la acción de \hat{x} sobre $a(p) \in L^2$ es:

$$\begin{aligned}
\hat{x}a(p) &= \int x(p, \beta) a(\beta) d\beta \\
&= \int \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \int \exp\left(\frac{-ipx}{\hbar}\right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \beta} \exp\left(\frac{i\beta x}{\hbar}\right)\right) dx\right) a(\beta) d\beta \\
&= \frac{-i}{2\pi} \int \int \exp\left(\frac{-ipx}{\hbar}\right) \frac{\partial}{\partial \beta} \exp\left(\frac{i\beta x}{\hbar}\right) a(\beta) dx d\beta \\
&= \frac{-i\hbar}{2\pi} \int \int \exp\left(\frac{-ipx}{\hbar}\right) \frac{\partial}{\partial \beta} \exp\left(\frac{i\beta x}{\hbar}\right) a(\beta) d\frac{x}{\hbar} d\beta \\
&= \frac{-i\hbar}{2\pi} \int \int \exp\left(\frac{i x(\beta-p)}{\hbar}\right) \frac{\partial}{\partial \beta} a(\beta) d\frac{x}{\hbar} d\beta \\
&= -i\hbar \int \frac{\partial a(p)}{\partial \beta} \delta(\beta - p) d\beta = -i\hbar \frac{\partial a(p)}{\partial p},
\end{aligned}$$

donde
$$\delta(\beta - p) = \frac{1}{2\pi} \int \exp\left(\frac{i x(\beta-p)}{\hbar}\right) d\frac{x}{\hbar}.$$

El operador momento en la representación p se caracteriza por el núcleo:

$$\begin{aligned}
p(p, \beta) &= \widehat{U}^\dagger p \widehat{U} \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int \exp\left(\frac{-ipx}{\hbar}\right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \exp\left(\frac{i\beta x}{\hbar}\right) dx \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int \exp\left(\frac{-ipx}{\hbar}\right) \beta \exp\left(\frac{i\beta x}{\hbar}\right) dx = \beta \lambda(p - \beta)
\end{aligned}$$

resultando que $\hat{p}a(p) = pa(p)$.

Lo que pasa con \hat{x} y \hat{p} es que aunque son hermiticos sobre todas $f(x) \in L^2$ no son hermiticos sobre las funciones propias.

Si $\hat{p}a(p) = p_0 a(p)$ y $\hat{x} = \hat{x}^\dagger$, $\hat{p} = \hat{p}^\dagger$.

Entonces:

$$\langle a | \hat{p}\hat{x} | a \rangle - \langle a | \hat{x}\hat{p} | a \rangle = -i\hbar \langle a | a \rangle$$

$$p_o[\langle a | \hat{x} | a \rangle - \langle a | \hat{x} | a \rangle] = -i\hbar \langle a | a \rangle$$

$$p_o[\langle a | \hat{x} | a \rangle - \langle a | \hat{x} | a \rangle] = 0$$

La parte izquierda es cero, mientras tanto la derecha esta indefinida, lo que es un contradicción.

7.- (Representaciones de Schrödinger y Heisenberg)

Las ecuaciones de movimiento dadas por el postulado 5 tienen varias interpretaciones, por el hecho de que en la expresión $\frac{d}{dt} \langle f | \hat{L} | f \rangle$ uno puede considerar la dependencia del tiempo atribuida completamente a las funciones de onda o completamente a los operadores.

- Para un operador dependiente del tiempo $\hat{O} = \widehat{O}(t)$ tenemos:

$$\hat{p}_i = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}_i}, \quad \hat{x}_i = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_i}$$

$$[\hat{p}, f] = \hat{p}f - f\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial f}{\partial \hat{x}_i}$$

$$[\hat{x}, f] = \hat{x}f - f\hat{x} = -i\hbar \frac{\partial f}{\partial \hat{p}_i}$$

se obtienen las ecuaciones de movimiento de Heisenberg:

$$\dot{\hat{p}}_i = \frac{-i}{\hbar} [\hat{p}, \hat{H}], \quad \dot{\hat{x}}_i = \frac{-i}{\hbar} [\hat{x}, \hat{H}].$$

- Si las funciones dependen del tiempo, todavía se puede usar $\dot{\hat{p}}_i = \frac{-i}{\hbar} [\hat{p}_i, \hat{H}]$, porque es consecuencia solo de las relaciones de conmutación y entonces no dependen de la representación.

$$\frac{d}{dt} \langle f | \hat{p}_i | g \rangle = \frac{-i}{\hbar} \langle f | [\hat{p}_i, \hat{H}] | g \rangle.$$

Si ahora \hat{p}_i y \hat{H} no dependen del tiempo y teniendo en cuenta su hermiticidad se obtiene:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial f}{\partial t}, \hat{p}_i g \right) + \left(\hat{p}_i f, \frac{\partial g}{\partial t} \right) \\ &= \frac{-i}{\hbar} (f, \hat{p}_i \hat{H} g) + \frac{i}{\hbar} (f, \hat{H} \hat{p}_i g) \\ &= \frac{-i}{\hbar} (\hat{p}_i f, \hat{H} g) + \frac{i}{\hbar} (\hat{H} f, \hat{p}_i g) \\ & \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \hat{H} f, \hat{p}_i g \right) + \left(\hat{p}_i f, \frac{\partial g}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} \hat{H} g \right) = 0 \end{aligned}$$

La última relación se cumple para cualquier pareja de funciones $f(x)$ y $g(x)$ al momento inicial si cada una satisface la ecuación

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi.$$

Esta es la ecuación de Schrödinger y la descripción del sistema por operadores independientes del tiempo se llama representación de Schrödinger.

En las dos representaciones la evolución temporal del sistema se caracteriza por el operador \hat{H} , el cual se obtiene de la función de Hamilton de la mecánica clásica.

Ejemplo: \hat{H} de una partícula en potencial $U(x_1, x_2, x_3)$ es:

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + U(x_1, x_2, x_3), \text{ y en la representación } x \text{ es:}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(x_1, x_2, x_3).$$

- 8.- El postulado 5 vale en las representaciones de Schrödinger y de Heisenberg. Por eso, el valor promedio de cualquier observable coincide en las dos representaciones, y entonces, hay una transformada unitaria que pasa de una representación a otra. Tal transformación es del tipo $\hat{s}^\dagger = \exp \frac{-i\hat{H}t}{\hbar}$. Para pasar a la representación de Schrödinger hay que usar la transformada de Heisenberg $\psi = \hat{s}^\dagger f$ con f y \hat{L} , y para pasar a la representación de Heisenberg se usará la transformación de Schrödinger $\hat{\Lambda} = \hat{s}^\dagger \hat{L} \hat{s}$ con ψ y $\hat{\Lambda}$. Ahora se obtendrá la ecuación de Schrödinger: como en la transformación $\psi = \hat{s}^\dagger f$ la función f no depende del tiempo, derivaremos la transformación con respecto al tiempo obteniéndose lo sig.:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial \hat{s}^\dagger}{\partial t} f = \frac{\partial}{\partial t} \left(\exp \frac{-i\hat{H}t}{\hbar} \right) f = \frac{-i}{\hbar} \hat{H} \exp \frac{-i\hat{H}t}{\hbar} f = \frac{-i}{\hbar} \hat{H} \hat{s}^\dagger f = \frac{-i}{\hbar} \hat{H} \psi.$$

por lo tanto, tenemos:

$$\hat{H} \psi - i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}.$$

Enseguida calcularemos la ecuación de Heisenberg: poniendo la transformación de Schrödinger de la siguiente manera $\hat{s} \hat{\Lambda} \hat{s}^\dagger = \hat{L}$ y derivandola con respecto al tiempo se obtiene la ecuación de Heisenberg

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} &= \frac{\partial \hat{s}}{\partial t} \hat{\Lambda} \hat{s}^\dagger + \hat{s} \hat{\Lambda} \frac{\partial \hat{s}^\dagger}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \hat{H} \exp \frac{i\hat{H}t}{\hbar} \hat{\Lambda} \hat{s}^\dagger - \frac{i}{\hbar} \hat{s} \hat{\Lambda} \exp \frac{-i\hat{H}t}{\hbar} \hat{H} \\ &= \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{s} \hat{\Lambda} \hat{s}^\dagger - \hat{s} \hat{\Lambda} \hat{s}^\dagger \hat{H}) = \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{L} - \hat{L} \hat{H}) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}]. \end{aligned}$$

Por lo tanto, tenemos:

$$\frac{\partial \hat{L}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}].$$

También la ecuación de Heisenberg se puede escribir de la sig. manera:

$$\frac{\partial \hat{L}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \hat{s}[\hat{H}, \hat{\Lambda}] \hat{s}^\dagger.$$

A \hat{L} se le conoce como la integral de movimiento si $\frac{d}{dt} \langle \psi | \hat{L} | \psi \rangle = 0$ y esta caracterizada por los siguientes conmutadores:

$$[\hat{H}, \hat{L}] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{\Lambda}] = 0.$$

9.- Los estados de un sistema descrito por las funciones propias de \hat{H} se llaman estados estacionarios del sistema, y al conjunto de valores propios correspondientes se les llaman espectro de energía (espectro energético) del sistema. En tal caso la ecuación de Schrödinger es :

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = E_n \psi_n = \hat{H} \psi_n.$$

Y su solución es: $\psi_n(x, t) = \exp \frac{-iE_n t}{\hbar} \phi_n(x).$

- La probabilidad es la siguiente:

$$\begin{aligned} \delta(x) &= |\psi_n(x, t)|^2 = \left| \exp \frac{-iE_n t}{\hbar} \phi_n(x) \right|^2 \\ &= \exp \frac{iE_n t}{\hbar} \exp \frac{-iE_n t}{\hbar} |\phi_n(x)|^2 = |\phi_n(x)|^2. \end{aligned}$$

Resultando que la probabilidad es constante en el tiempo.

- En los estados estacionarios, el valor promedio de cualquier conmutador de tipo $[\hat{H}, \hat{A}]$ es cero, donde \hat{A} es cualquier operador:

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H} | n \rangle &= \langle n | \hat{H}\hat{A} | n \rangle - \langle n | \hat{A}\hat{H} | n \rangle \\ &= \langle n | E_n \hat{A} | n \rangle - \langle n | \hat{A} E_n | n \rangle \\ &= E_n \langle n | \hat{A} | n \rangle - E_n \langle n | \hat{A} | n \rangle = 0. \end{aligned}$$

- Teorema del virial en mecánica cuántica.- Si \hat{H} es el operador Hamiltoniano de una partícula en un campo $U(r)$ y usando $\hat{A} = 1/2 \sum_{i=1}^3 (\hat{p}_i \hat{x}_i - \hat{x}_i \hat{p}_i)$ se obtiene lo siguiente:

$$\begin{aligned} \langle \psi | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi \rangle &= 0 = \langle \psi | \hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A} | \psi \rangle \\ &= \sum_{i=1}^3 \langle \psi | \hat{p}_i \hat{x}_i \hat{H} - \hat{H} \hat{p}_i \hat{x}_i | \psi \rangle \\ &= \sum_{i=1}^3 \langle \psi | [\hat{H}, \hat{x}_i] \hat{p}_i + \hat{x}_i [\hat{H}, \hat{p}_i] | \psi \rangle. \end{aligned}$$

usando varias veces los conmutadores y $\hat{p}_i = -i\hbar \Delta$, $\hat{H} = \hat{T} + U(r)$, se tiene entonces:

$$\begin{aligned} & \langle \psi | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi \rangle = 0 \\ & = -i\hbar(2 \langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle - \langle \psi | \vec{r} \cdot \nabla U(r) | \psi \rangle). \end{aligned}$$

Que es el teorema del virial. Si el potencial es $U(r) = U_0 r^n$, entonces tenemos el teorema del virial como en mecánica clásica, sólo que para valores promedios

$$\bar{T} = \frac{n}{2} \bar{U}.$$

- Para un Hamiltoniano $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r)$ y $[\vec{r}, H] = \frac{-i\hbar}{m} \vec{p}$, y calculando los elementos de matriz se tiene:

$$(E_k - E_n) \langle n | \vec{r} | k \rangle = \frac{i\hbar}{m} \langle n | \hat{p} | k \rangle.$$

10.- (Densidad de corriente de probabilidad) La siguiente integral :

$$\int |\psi_n(x)|^2 dx = 1,$$

es la normalización de una función propia de un espectro discreto en la representación de coordenada, y ocurre como una condición de movimiento en una región finita. Por eso, los estados del espectro discreto se llaman estados ligados.

Para las funciones propias del espectro continuo $\psi_\lambda(x)$ no se puede dar de manera directa una interpretación de probabilidad.

Supongamos una función dada $\phi \in L^2$, la cual la escribimos como combinación lineal de funciones propias en el continuo:

$$\phi = \int a(\lambda) \psi_\lambda(x) dx.$$

Se dice que ϕ corresponde a un movimiento infinito.

En muchos casos, la función $a(\lambda)$ es diferente de cero solo en una vecindad de un punto $\lambda = \lambda_0$. En este caso ϕ se le conoce como paquete de onda(s).

Vamos a calcular el cambio en el tiempo de la probabilidad de encontrar el sistema en el volumen Ω .

$$P = \int_{\Omega} |\psi(x, t)|^2 dx = \int_{\Omega} \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx.$$

Derivando la integral con respecto a el tiempo tenemos:

$$\frac{dP}{dt} = \int_{\Omega} (\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}) dx.$$

Utilizando la ecuación de Schrödinger del lado derecho de la integral se tiene lo siguiente:

$$\frac{dP}{dt} = \frac{i}{\hbar} \int_{\Omega} (\psi \hat{H} \psi^* - \psi^* \hat{H} \psi) dx.$$

Usando la identidad $f\nabla g - g\nabla f = \text{div}[(f)\text{grad}(g) - (g)\text{grad}(f)]$ y la ecuación de Schrödinger de la forma siguiente:

$$\hat{H}\psi = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi.$$

Sustituyendo lo anterior en la integral se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dt} &= \frac{i}{\hbar} \int_{\Omega} [\psi(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*) - \psi^*(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi)] dx \\ &= - \int_{\Omega} \frac{i\hbar}{2m} (\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi) dx \\ &= - \int_{\Omega} \text{div} \frac{i\hbar}{2m} (\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi) dx. \end{aligned}$$

Usando el teorema de la divergencia para transformar la integral de volumen en una de superficie, entonces tenemos lo siguiente:

$$\frac{dP}{dt} = - \oint \frac{i\hbar}{2m} (\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi) dx.$$

A la cantidad $\vec{J}(\psi) = \frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi)$ se le conoce como densidad de corriente de probabilidad y de inmediato se obtiene una ecuación de continuidad,

$$\frac{d\rho}{dt} + \text{div}(\vec{J}) = 0.$$

• Si $\psi(x) = AR(x)$, donde $R(x)$ es función real, entonces: $\vec{J}(\psi) = 0$.

• Para las funciones propias del impulso $\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp \frac{i\vec{p}\vec{x}}{\hbar}$ se obtiene:

$$\begin{aligned} J(\psi) &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp \frac{i\vec{p}\vec{x}}{\hbar} \left(\frac{i\vec{p}}{\hbar(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp \frac{-i\vec{p}\vec{x}}{\hbar} \right) \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp \frac{-i\vec{p}\vec{x}}{\hbar} \frac{i\vec{p}}{\hbar(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp \frac{i\vec{p}\vec{x}}{\hbar} \right) \right) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left(-\frac{2i\vec{p}}{\hbar(2\pi\hbar)^3} \right) = \frac{\vec{p}}{m(2\pi\hbar)^3}, \end{aligned}$$

lo cual nos dice que no depende de la coordenada la densidad de probabilidad.

11.- (Operador de transporte espacial) Si \hat{H} es invariante ante translaciones de cualquier vector \vec{a} ,

$$\hat{H}(\vec{r} + \vec{a}) = \hat{H}(\vec{r}).$$

Entonces, hay un $\widehat{T}(\vec{a})$ unitario $\widehat{T}^\dagger(\vec{a})\widehat{H}(\vec{r})\widehat{T}(\vec{a}) = \widehat{H}(\vec{r} + \vec{a})$.
Por la conmutación de las traslaciones

$$\widehat{T}(\vec{a})\widehat{T}(\vec{b}) = \widehat{T}(\vec{b})\widehat{T}(\vec{a}) = \widehat{T}(\vec{a} + \vec{b}),$$

resulta que \widehat{T} tiene la forma $\widehat{T} = \exp^{i\vec{k}\vec{a}}$, donde, $\vec{k} = \frac{\hat{p}}{\hbar}$.
En el caso infinitesimal:

$$\widehat{T}(\delta\vec{a})\widehat{H}\widehat{T}(\delta\vec{a}) \approx (\hat{I} + i\vec{k}\delta\vec{a})\widehat{H}(\hat{I} - i\vec{k}\delta\vec{a}),$$

$$\widehat{H}(\vec{r}) + i[\hat{K}, \widehat{H}]\delta\vec{a} = \widehat{H}(\vec{r}) + (\nabla\widehat{H})\delta\vec{a}.$$

También $[\hat{p}, \widehat{H}] = 0$, donde \hat{p} es una integral de movimiento. El sistema tiene funciones de onda de la forma $\psi(\vec{p}, \vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp \frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}$ y la transformada unitaria hace que $\exp \frac{i\vec{p}\vec{a}}{\hbar} \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{a})$.

El operador de transporte espacial $\widehat{T}^\dagger = \exp \frac{-i\vec{p}\vec{a}}{\hbar}$ es análogo al $\hat{s}^\dagger = \exp \frac{-i\hat{H}t}{\hbar}$ el operador de transporte temporal.

- 12.- Ejemplo: Si \widehat{H} es invariante con respecto a una traslación discreta (por ejemplo en una red cristalina) $\widehat{H}(\vec{r} + \vec{a}) = \widehat{H}(\vec{r})$ donde $\vec{a} = \sum_i \vec{a}_i n_i$, $n_i \in \mathbb{N}$ y \vec{a}_i son los vectores bóricos. Entonces:

$$\widehat{H}(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}),$$

$$\widehat{H}(\vec{r} + \vec{a})\psi(\vec{r} + \vec{a}) = E\psi(\vec{r} + \vec{a}) = \widehat{H}(\vec{r})\psi(\vec{r} + \vec{a}).$$

Resultando que $\psi(\vec{r})$ y $\psi(\vec{r} + \vec{a})$ son funciones de onda para el mismo valor propio de \widehat{H} . La relación entre $\psi(\vec{r})$ y $\psi(\vec{r} + \vec{a})$ se puede buscar en la forma $\psi(\vec{r} + \vec{a}) = \hat{c}(\vec{a})\psi(\vec{r})$ donde $\hat{c}(\vec{a})$ es una matriz $g \times g$ (g es el grado de degeneración del nivel E). Dos matrices tipo \hat{c} , $\hat{c}(\vec{a})$ y $\hat{c}(\vec{b})$ conmutan y entonces son diagonalizables en el mismo tiempo.

Además para los elementos diagonales hay de tipo $c_{ii}(\vec{a})c_{ii}(\vec{b}) = c_{ii}(\vec{a} + \vec{b})$, donde $i=1,2,\dots,g$. La solución de esta ecuación es del tipo $c_{ii}(\vec{a}) = \exp^{i\vec{k}\vec{a}}$ resulta que $\psi_k(\vec{r}) = U_k(\vec{r}) \exp^{i\vec{k}\vec{a}}$ donde \vec{k} es un vector real cualquiera, y la función $U_k(\vec{r})$ es periódica con período \vec{a} , entonces: $U_k(\vec{r} + \vec{a}) = U_k(\vec{r})$.

La aseveración de que las funciones propias de un \widehat{H} periódico cristalino $\widehat{H}(\vec{r} + \vec{a}) = \widehat{H}(\vec{r})$ se pueden escribir $\psi_k(\vec{r}) = U_k(\vec{r}) \exp^{i\vec{k}\vec{a}}$ con $U_k(\vec{r} + \vec{a}) = U_k(\vec{r})$ se llama teorema de Bloch. En el caso continuo, U_k debe ser constante, porque la constante es la única función periódica para cualquier \vec{a} .

El vector $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ se llama cuasi-impulso (analogía con el caso continuo). El vector \vec{k} no está determinado de manera unívoca, porque se le puede juntar cualquier vector \vec{g} para el cual $g\vec{a} = 2\pi n$ donde $n \in \mathbb{N}$.

El vector \vec{g} se puede escribir $\vec{g} = \sum_{i=1}^3 \vec{b}_i m_i$ donde m_i son números enteros y \vec{b}_i están dados por

$$\vec{b}_i = 2\pi \frac{\hat{a}_j \times \vec{a}_k}{\vec{a}_i \cdot (\hat{a}_j \times \vec{a}_k)}$$

si $i \neq j \neq k$ son los vectores básicos de la red cristalina.

Citas:

1. Acetatos del Prof. H. Rosu.
2. E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, "How probability arises in quantum mechanics", *Annals of Physics* **192**, 368-382 (1989)
3. N.K. Tyagi en *Am. J. Phys.* **31**, 624 (1963) da una demostración muy corta del principio de incertidumbre de Heisenberg, que dice que la medición simultánea de dos operadores hermitianos que no conmutan produce una incertidumbre relacionada con el valor del conmutador.

Notas:

1. Para "la creación de la MC...", Werner Heisenberg ha sido galardonado con el premio Nobel en 1932 (y lo recibió en 1933). El artículo "Zur Quantenmechanik. II", *Zf. f. Physik* **35**, 557-615 (1926) (recibido el 16 de Noviembre de 1925) de M. Born, W. Heisenberg y P. Jordan, se le conoce como "el trabajo de las tres gentes" y está considerado como el que abrió de verdad los grandes horizontes de la MC.
2. Para "la interpretación estadística de la función de onda" Max Born recibió el premio Nobel en 1954.

Problemas

Problema 1.1:

Considerar dos operadores A y B los cuales por hipótesis, conmutan. Entonces se derivara la relación:

$$\exp^A \exp^B = \exp^{A+B} \exp^{1/2[A,B]}, \quad (\text{fórmula de Glauber}).$$

Definiremos un operador F(t), una función de variable real t, por:
 $F(t) = \exp^{At} \exp^{Bt}$.

tenemos:

$$\frac{dF}{dt} = A \exp^{At} \exp^{Bt} + \exp^{At} B \exp^{Bt} = (A + \exp^{At} B \exp^{-At}) F(t).$$

Ahora aplicando la fórmula $[A, F(B)] = [A, B] F'(B)$, tenemos que $[\exp^{At}, B] = t[A, B] \exp^{At}$, por lo tanto: $\exp^{At} B = B \exp^{At} + t[A, B] \exp^{At}$ multiplicando ambos lados de la ecuación pasada por \exp^{-At} y sustituyendo en la primera ecuación, obtenemos:

$$\frac{dF}{dt} = (A + B + t[A, B]) F(t).$$

Los operadores A y B y [A,B] conmutan por hipótesis. Por lo tanto, podemos integrar la ecuación diferencial como si A + B y [A, B] fueran números. Entonces tenemos:

$$F(t) = F(0) \exp^{(A+B)t + 1/2[A,B]t^2}.$$

Poniendo $t = 0$, se ve que $F(0) = 1$, y :

$$F(t) = \exp^{(A+B)t + 1/2[A,B]t^2}.$$

Entonces poniendo $t = 1$, obtenemos el resultado deseado.

Problema 1.2:

Se calculará el conmutador $[X, D_x]$. Para hacerlo, tomaremos una función arbitraria $\psi(\vec{r})$:

$$\begin{aligned} [X, D_x] \psi(\vec{r}) &= (x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} x) \psi(\vec{r}) = x \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}) - \frac{\partial}{\partial x} [x \psi(\vec{r})] \\ &= x \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}) - \psi(\vec{r}) - x \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}) = -\psi(\vec{r}). \end{aligned}$$

Entonces si es valido para toda $\psi(\vec{r})$, se puede deducir que:

$$[X, D_x] = -1.$$

Problema 1.3:

Se probará que la traza es invariante ante un cambio de base ortonormal discreta.

La suma de los elementos de la diagonal de la matriz la cual representa un operador A en una base arbitraria no depende de la base. Se derivara esta propiedad para el caso del cambio de una base ortonormal discreta $[| u_i \rangle]$ a otra base ortonormal discreta $[| t_k \rangle]$. Tenemos:

$$\sum_i \langle u_i | A | u_i \rangle = \sum_i \langle u_i | [\sum_k | t_k \rangle \langle t_k |] A | u_i \rangle$$

(donde se ha usado la relación de cerradura para el estado t_k). El lado derecho de la relación pasada es igual a:

$$\sum_{i,j} \langle u_i | t_k \rangle \langle t_k | A | u_i \rangle = \sum_{i,j} \langle t_k | A | u_i \rangle \langle u_i | t_k \rangle,$$

(es posible el cambio de orden del producto dos números). Entonces, podemos reemplazar $\sum_i | u_i \rangle \langle u_i |$ por uno (relación de cerradura para el estado $| u_i \rangle$), y se obtiene finalmente:

$\sum_i \langle u_i | A | u_i \rangle = \sum_k \langle t_k | A | t_k \rangle$. Por lo tanto, se ha mostrado la propiedad de invariancia para la traza.

2. POTENCIALES BARRERAS y POZOS

Comportamiento de una Funcion de Onda Estacionaria $\psi(x)$

Regiones de Energía Potencial Constante

En el caso de un potencial cuadrado, $V(x)$ es una función constante $V(x) = V$ en cierta región del espacio. En tal región, la ecuación de Schrödinger puede ser escrita:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi(x) = 0 \quad (1)$$

Distinguiremos entre varios casos:

(i) $E > V$

Introduzcamos la constante positiva k , definida por

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

La solución de la ecuación (1) puede ser entonces escrita:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx} \quad (3)$$

donde A y A' son constantes complejas.

(ii) $E < V$

Esta condición corresponde a regiones del espacio las cuales estarían prohibidas para la partícula por las leyes de la mecánica clásica. En este caso, introducimos la constante positiva q definida por:

$$q = \frac{\sqrt{2m(V - E)}}{\hbar} \quad (4)$$

y la solución de (1) puede ser escrita:

$$\psi(x) = Be^{qx} + B'e^{-qx} \quad (5)$$

donde B y B' son constantes complejas.

(iii) $E = V$

En este caso especial, $\psi(x)$ es una función lineal de x .

Comportamiento de $\psi(x)$ en una discontinuidad de energía potencial.

Podría pensarse que en el punto $x = x_1$, donde el potencial $V(x)$ es discontinuo, la función de onda $\psi(x)$ se comportaría extrañamente, llegando a ser por sí misma discontinua, por ejemplo. Este no es el caso: $\psi(x)$ y $\frac{d\psi}{dx}$ son continuas, y es sólo la segunda derivada la que es discontinua en $x = x_1$

Visión general del cálculo

El procedimiento para determinar el estado estacionario en un “potencial cuadrado” es por lo tanto el siguiente: en todas las regiones donde $V(x)$ es constante, escribimos $\psi(x)$ en cualquiera de las dos formas (3) o (5) según sea aplicable; entonces pegamos estas funciones por requerimientos de continuidad de $\psi(x)$ y de $\frac{d\psi}{dx}$ en los puntos donde $V(x)$ es discontinuo.

Examinación de ciertos casos simples

Llevemos a cabo el cálculo cuantitativo de los estados estacionarios, hecho de acuerdo al método descrito arriba.

Potencial escalón

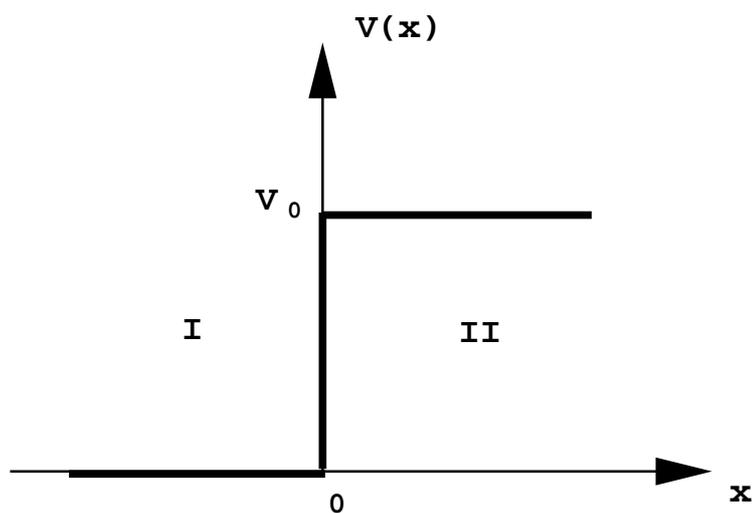


Fig. 2.1

a. Caso donde $E > V_0$; reflexión parcial

Pongamos la ec. (2) como:

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (6)$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \quad (7)$$

La solución de la ec. (1) tiene la forma de la ec. (3) en las regiones $I(x < 0)$ y $II(x > 0)$:

$$\begin{aligned} \psi_I &= A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \\ \psi_{II} &= A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x} \end{aligned}$$

En la región I la ec. (1) toma la forma:

$$\psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = \psi''(x) + k^2\psi(x) = 0$$

y en la region II:

$$\psi''(x) - \frac{2m}{\hbar^2}[V_0 - E]\psi(x) = \psi''(x) - q^2\psi(x) = 0$$

Si nos limitamos al caso de una partícula incidente viniendo desde $x = -\infty$, debemos elegir $A'_2 = 0$ y podemos determinar los radios A'_1/A_1 y A_2/A_1 . Las condiciones de pegado entonces dan:

$$\bullet \psi_I = \psi_{II}, \quad \text{en } x = 0 : \quad A_1 + A'_1 = A_2 \quad (8)$$

$$\bullet \psi'_I = \psi'_{II}, \quad \text{en } x = 0 : \quad A_1 ik_1 - A'_1 ik_1 = A_2 ik_2 \quad (9)$$

Sustituyendo A_1 y A'_1 de (8) en (9):

$$A'_1 = \frac{A_2(k_1 - k_2)}{2k_1} \quad (10)$$

$$A_1 = \frac{A_2(k_1 + k_2)}{2k_1} \quad (11)$$

La igualación de la constante A_2 en (10) y (11) resulta:

$$\frac{A'_1}{A_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad (12)$$

y un despeje en (11) nos da:

$$\frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \quad (13)$$

$\psi(x)$ es la superposición de dos ondas. La primera (el término en A_1) corresponde a una partícula incidente, con momento $p = \hbar k_1$, propagándose de izquierda a derecha. La segunda (el término en A'_1) corresponde a una partícula reflejada, con momento $-\hbar k_1$, propagándose en la dirección opuesta. Ya que hemos elegido $A'_2 = 0$, $\psi_{II}(x)$ consiste de una sola onda, la cual está asociada con una partícula transmitida. (En la siguiente página se muestra cómo es posible, usando el concepto de una corriente de probabilidad, definir el coeficiente de transmisión T y el coeficiente de reflexión R del potencial escalón). Estos coeficientes dan la probabilidad de que la partícula, llegando de $x = -\infty$, pase el potencial escalón en $x = 0$ o se regrese. Así encontramos:

$$R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 \quad (14)$$

y, para T:

$$T = \frac{k_2}{k_1} \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2 \quad (15)$$

Tomando en cuenta a (12) y (13), tenemos:

$$R = 1 - \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (16)$$

$$T = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (17)$$

Es fácil verificar que $R + T = 1$: es cierto que la partícula será transmitida o reflejada. Contrariamente a las predicciones de la mecánica clásica, la partícula incidente tiene una probabilidad no nula de regresarse.

Finalmente es fácil verificar, usando (6) y (7) y (17), que, si $E \gg V_0$, $T \simeq 1$: cuando la energía de la partícula es suficientemente grande comparada con la altura del potencial escalón, la partícula salva este escalón como si no existiera.

Considerando la solución en la región I:

$$\psi_I = A_1 e^{ik_1x} + A'_1 e^{-ik_1x}$$

$$j = -\frac{i\hbar}{2m}(\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^*) \quad (18)$$

con $A_1 e^{ik_1x}$ y su conjugado $A_1^* e^{-ik_1x}$:

$$j = -\frac{i\hbar}{2m}[(A_1^* e^{-ik_1x})(A_1 ik_1 e^{ik_1x}) - (A_1 e^{ik_1x})(-A_1^* ik_1 e^{-ik_1x})]$$

$$j = \frac{\hbar k_1}{m}|A_1|^2$$

Ahora con $A'_1 e^{-ik_1x}$ y su conjugado $A_1^* e^{ik_1x}$ resulta:

$$j = -\frac{\hbar k_1}{m}|A'_1|^2$$

Deseamos en seguida verificar la proporción de corriente que se refleja con respecto a la corriente que incide (más precisamente, queremos verificar la probabilidad de que la partícula se regrese):

$$R = \frac{|j(\phi_-)|}{|j(\phi_+)|} = \frac{|-\frac{\hbar k_1}{m}|A'_1|^2|}{|\frac{\hbar k_1}{m}|A_1|^2|} = \left|\frac{A'_1}{A_1}\right|^2 \quad (19)$$

En forma similar, la proporción de lo que se transmite con respecto a lo que incide (o sea la probabilidad de que la partícula se transmita) es, tomando ahora en cuenta la solución de la región II:

$$T = \frac{|\frac{\hbar k_2}{m}|A_2|^2|}{|\frac{\hbar k_1}{m}|A_1|^2|} = \frac{k_2}{k_1} \left|\frac{A_2}{A_1}\right|^2 \quad (20)$$

a. Caso donde $E < V_0$; reflexión total

En este caso tenemos:

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (21)$$

$$q_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (22)$$

En la región $I(x < 0)$, la solución de la ec. (1) [dada como $\psi(x)'' + k_1^2\psi(x) = 0$] tiene la forma de la ec. (3):

$$\psi_I = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \quad (23)$$

Y, en la región $II(x > 0)$, la misma ec. (1) [ahora dada como $\psi(x)'' - q_2^2\psi(x) = 0$] tiene la forma de la ec. (5):

$$\psi_{II} = B_2 e^{q_2 x} + B_2' e^{-q_2 x} \quad (24)$$

Para que la solución permanezca limitada cuando $x \rightarrow +\infty$, es necesario que:

$$B_2 = 0 \quad (25)$$

Las condiciones de pegado en $x = 0$ dan en este caso:

$$\bullet \psi_I = \psi_{II}, \quad \text{en } x = 0 : \quad A_1 + A_1' = B_2' \quad (26)$$

$$\bullet \psi_I' = \psi_{II}', \quad \text{en } x = 0 : \quad A_1 i k_1 - A_1' i k_1 = -B_2' q_2 \quad (27)$$

Sustituyendo A_1 y A_1' de (26) en (27):

$$A_1' = \frac{B_2'(ik_1 + q_2)}{2ik_1} \quad (28)$$

$$A_1 = \frac{B_2'(ik_1 - q_2)}{2ik_1} \quad (29)$$

La igualación de la constante B_2' en (28) y (29) resulta:

$$\frac{A_1'}{A_1} = \frac{ik_1 + q_2}{ik_1 - q_2} = \frac{k_1 - iq_2}{k_1 + iq_2}, \quad (30)$$

y un despeje en (29) nos da:

$$\frac{B_2'}{A_1} = \frac{2ik_1}{ik_1 - q_2} = \frac{2k_1}{k_1 - iq_2} \quad (31)$$

El coeficiente de reflexión R es entonces:

$$R = \left| \frac{A_1'}{A_1} \right|^2 = \left| \frac{k_1 - iq_2}{k_1 + iq_2} \right|^2 = \frac{k_1^2 + q_2^2}{k_1^2 + q_2^2} = 1 \quad (32)$$

Como en la mecánica clásica, la partícula es siempre reflejada (reflexión total). Sin embargo, hay una diferencia importante: debido a la existencia de una onda evanescente $e^{-q_2 x}$, la partícula tiene una probabilidad no nula de estar presente en la región del espacio la cual, clásicamente, le sería prohibida. Esta probabilidad decrece exponencialmente con x y llega a ser despreciable cuando x es más grande que el "rango" $1/q_2$ de la onda evanescente. Notemos también que el coeficiente A_1'/A_1 es complejo. Un cierto cambio de fase aparece a causa de la reflexión, el cual, físicamente, es debido al hecho de que la partícula es retardada cuando penetra la región $x > 0$. No hay analogía en la mecánica clásica.

Potencial Barrera

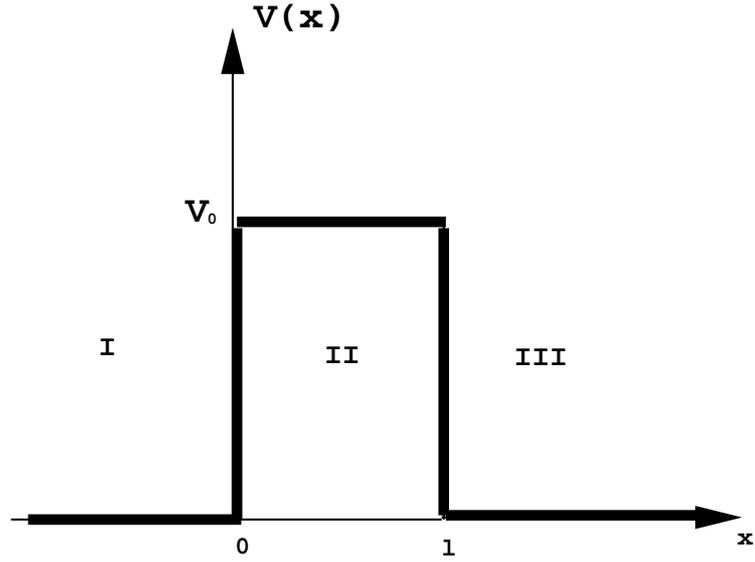


Fig. 2.2

- a. Caso donde $E > V_0$; resonancias
Pongamos aquí la ec. (2) como:

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (33)$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \quad (34)$$

La solución de la ec. (1) tiene la forma de la ec. (3) en las regiones $I(x < 0)$, $II(0 < x < a)$ y $III(x > a)$:

$$\begin{aligned} \psi_I &= A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \\ \psi_{II} &= A_2 e^{ik_2 x} + A'_2 e^{-ik_2 x} \\ \psi_{III} &= A_3 e^{ik_1 x} + A'_3 e^{-ik_1 x} \end{aligned}$$

Si nos limitamos al caso de una partícula incidente viniendo desde $x = -\infty$, debemos elegir $A'_3 = 0$.

- $\psi_I = \psi_{II}$, en $x = 0$:
$$A_1 + A'_1 = A_2 + A'_2 \quad (35)$$

- $\psi'_I = \psi'_{II}$, en $x = 0$:
$$A_1 i k_1 - A'_1 i k_1 = A_2 i k_2 - A'_2 i k_2 \quad (36)$$

- $\psi_{II} = \psi_{III}$, en $x = a$:

$$A_2 e^{ik_2 a} + A_2' e^{-ik_2 a} = A_3 e^{ik_1 a} \quad (37)$$

- $\psi'_{II} = \psi'_{III}$, en $x = a$:

$$A_2 i k_2 e^{ik_2 a} - A_2' i k_2 e^{-ik_2 a} = A_3 i k_1 e^{ik_1 a} \quad (38)$$

Las condiciones de continuidad en $x = a$ dan entonces a A_2 y A_2' en función de A_3 , y aquellas en $x = 0$ dan a A_1 y A_1' en función de A_2 y A_2' (y, consecuentemente, en función de A_3). Este proceso es mostrado enseguida:

Sustituyendo A_2' de la ec. (37) en (38):

$$A_2 = \frac{A_3 e^{ik_1 a} (k_2 + k_1)}{2k_2 e^{ik_2 a}} \quad (39)$$

Sustituyendo A_2 de la ec. (37) en (38):

$$A_2' = \frac{A_3 e^{ik_1 a} (k_2 - k_1)}{2k_2 e^{-ik_2 a}} \quad (40)$$

Sustituyendo A_1 de la ec. (35) en (36):

$$A_1' = \frac{A_2 (k_2 - k_1) - A_2' (k_2 + k_1)}{-2k_1} \quad (41)$$

Sustituyendo A_1' de la ec. (35) en (36):

$$A_1 = \frac{A_2 (k_2 + k_1) - A_2' (k_2 - k_1)}{2k_1} \quad (42)$$

Ahora, sustituyendo en (41) las ecuaciones (39) y (40):

$$A_1' = i \frac{(k_2^2 - k_1^2)}{2k_1 k_2} (\sin k_2 a) e^{ik_1 a} A_3 \quad (43)$$

Y, finalmente, sustituyendo en (42) las ecuaciones (39) y (40):

$$A_1 = [\cos k_2 a - i \frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2} \sin k_2 a] e^{ik_1 a} A_3 \quad (44)$$

A_1'/A_1 y A_3/A_1 [relaciones que salen de igualar las ecuaciones (43) y (44), y del despeje de la ec. (44), respectivamente] nos capacita para calcular el coeficiente de reflexión R y el de transmisión T de la barrera, los cuales aquí son iguales a:

$$R = |A_1'/A_1|^2 = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a}, \quad (45)$$

$$T = |A_3/A_1|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a}, \quad (46)$$

Entonces es fácil de verificar que $R + T = 1$.

b. Caso donde $E < V_0$; efecto tunel

Ahora tendríamos a las ecuaciones (2) y (4) dispuestas:

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (47)$$

$$q_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (48)$$

La solución de la ec. (1) tiene la forma de la ec. (3) en las regiones $I(x < 0)$ y $III(x > a)$ y la forma de la ec. (5) en la región $II(0 < x < a)$:

$$\begin{aligned} \psi_I &= A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \\ \psi_{II} &= B_2 e^{q_2 x} + B_2' e^{-q_2 x} \\ \psi_{III} &= A_3 e^{ik_1 x} + A_3' e^{-ik_1 x} \end{aligned}$$

Las condiciones de pegado en $x = 0$ y $x = a$ nos capacita para calcular el coeficiente de transmisión de la barrera. De hecho, no es necesario realizar otra vez el cálculo: todo lo que debemos hacer es sustituir, en la ecuación obtenida en el primer caso de esta misma sección, k_2 por $-iq_2$.

Estados Ligados; Pozo de Potencial

a. Pozo de profundidad finita

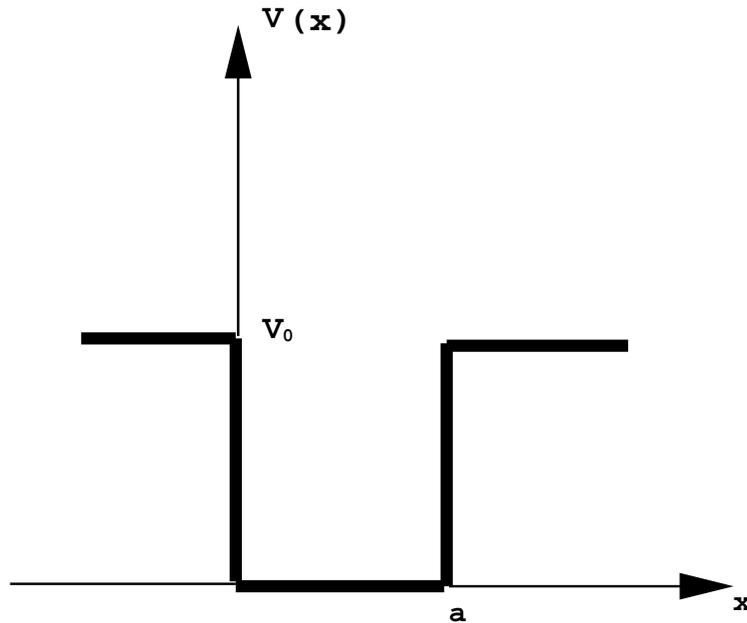


Fig. 2.3: Pozo finito

En esta parte nos limitaremos sólo a tratar el caso $0 < E < V_0$ (el caso $E > V_0$ es exactament igual al calculado en la sección precedente, "barrera de potencial").

Para las regiones exteriores I ($x < 0$) y III ($x > a$) usamos la ec. (4):

$$q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (49)$$

Para la región central II ($0 < x < a$) usamos la ec. (2):

$$k = \frac{\sqrt{2m(E)}}{\hbar} \quad (50)$$

La solución de la ec. (1) tiene la forma de la ec. (5) en las regiones exteriores y la forma de la ec. (3) en la región central:

$$\begin{aligned} \psi_I &= B_1 e^{qx} + B'_1 e^{-qx} \\ \psi_{II} &= A_2 e^{ikx} + A'_2 e^{-ikx} \\ \psi_{III} &= B_3 e^{qx} + B'_3 e^{-qx} \end{aligned}$$

En la región ($0 < x < a$) la ec. (1) toma la forma:

$$\psi(x)'' + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = \psi(x)'' + k^2 \psi(x) = 0 \quad (51)$$

y en las regiones exteriores:

$$\psi(x)'' - \frac{2m}{\hbar^2} [V_0 - E] \psi(x) = \psi(x)'' - q^2 \psi(x) = 0 \quad (52)$$

Ya que ψ debe ser limitada en la región I, debemos tener:

$$B'_1 = 0 \quad (53)$$

Las condiciones de pegado dan:

$$\psi_I = \psi_{II}, \quad \text{en } x = 0 : \quad B_1 = A_2 + A'_2 \quad (54)$$

$$\psi'_I = \psi'_{II}, \quad \text{en } x = 0 : \quad B_1 q = A_2 ik - A'_2 ik \quad (55)$$

$$\psi_{II} = \psi_{III}, \quad \text{en } x = a : \quad A_2 e^{ika} + A'_2 e^{-ika} = B_3 e^{qa} + B'_3 e^{-qa} \quad (56)$$

$$\psi'_{II} = \psi'_{III}, \quad \text{en } x = a : \quad A_2 ike^{ika} - A'_2 ike^{-ika} = B_3 qe^{qa} - B'_3 qe^{-qa} \quad (57)$$

Sustituyendo la constante A_2 y la constante A'_2 de la ec. (54) en la ec. (55) obtenemos, respectivamente:

$$\begin{aligned} A'_2 &= \frac{B_1(q - ik)}{-2ik} \\ A_2 &= \frac{B_1(q + ik)}{2ik} \end{aligned} \quad (58)$$

Sustituyendo la constante A_2 y la constante A'_2 de la ec. (56) en la ec. (57) obtenemos, respectivamente:

$$\begin{aligned} B'_3 e^{-qa}(ik + q) + B_3 e^{qa}(ik - q) + A'_2 e^{-ika}(-2ik) &= 0 \\ 2ikA_2 e^{ika} + B'_3 e^{-qa}(-ik + q) + B_3 e^{qa}(-ik - q) &= 0 \end{aligned} \quad (59)$$

Igualando B'_3 de las ecuaciones (59) y tomando en cuenta las ecuaciones (58):

$$\frac{B_3}{B_1} = \frac{e^{-qa}}{4ikq} [e^{ika}(q + ik)^2 - e^{-ika}(q - ik)^2] \quad (60)$$

Pero $\psi(x)$ debe también estar limitada en la región III. Por lo tanto, es necesario que $B_3 = 0$, esto es:

$$\left[\frac{q - ik}{q + ik} \right]^2 = \frac{e^{ika}}{e^{-ika}} = e^{2ika} \quad (61)$$

Ya que q y k dependen de E , la ec. (1) puede ser satisfecha para ciertos valores de E . Imponiendo un límite sobre $\psi(x)$ en todas las regiones del espacio así se ocasiona la cuantización de la energía. Más precisamente dos casos son posibles:

(i) si:

$$\frac{q - ik}{q + ik} = -e^{ika} \quad (62)$$

Si en esta expresión igualamos en ambos miembros la parte real y la imaginaria, nos resulta:

$$\tan\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{q}{k} \quad (63)$$

Poniendo:

$$k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar}} = \sqrt{k^2 + q^2} \quad (64)$$

Entonces obtenemos:

$$\frac{1}{\cos^2\left(\frac{ka}{2}\right)} = 1 + \tan^2\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{k^2 + q^2}{k^2} = \left(\frac{k_0}{k}\right)^2 \quad (65)$$

La ec.(63) es así equivalente al sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} \left| \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \right| &= \frac{k}{k_0} \\ \tan\left(\frac{ka}{2}\right) &> 0 \end{aligned} \quad (66)$$

Los niveles de energía están determinados por la intersección de una línea recta teniendo una inclinación $\frac{1}{k_0}$, con arcos senoidales (líneas largas interrumpidas en la figura 2.4). Así obtenemos un cierto número de niveles de energía, cuyas funciones de onda son pares. Esto es más claro si sustituimos (62) en (58) y (60); Es fácil verificar que $B'_3 = B_1$ y que $A_2 = A'_2$, así que $\psi(-x) = \psi(x)$.

(ii) si:

$$\frac{q - ik}{q + ik} = e^{ika} \quad (67)$$

Un cálculo del mismo tipo nos lleva a:

$$\begin{aligned} |\sin(\frac{ka}{2})| &= \frac{k}{k_0} \\ \tan(\frac{ka}{2}) &< 0 \end{aligned} \quad (68)$$

Los niveles de energía están entonces determinados por la intersección de la misma línea recta como antes con otros arcos senoidales (líneas cortas en la figura 2.4). Los niveles así obtenidos caen entre aquellos encontrados en (i). Puede ser fácilmente mostrado que las correspondientes funciones de onda son impares.

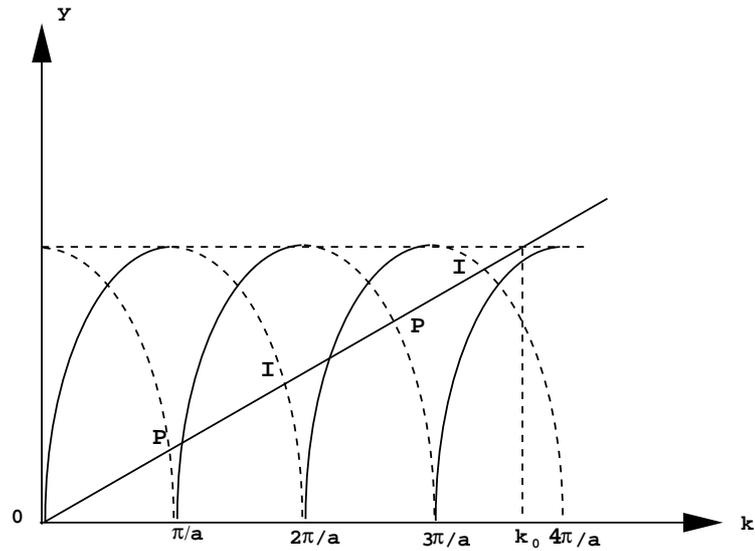


Fig. 2.4

a. Pozo de profundidad infinita

Asumiendo que $V(x)$ es cero para $0 < x < a$ e infinito en cualquier parte más. Pongamos:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (69)$$

$\psi(x)$ debe ser cero fuera del intervalo $[0, a]$, y continuo en $x = 0$, también como en $x = a$. Ahora para $0 \leq x \leq a$:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx} \quad (70)$$

Ya que $\psi(0) = 0$, puede ser deducido que $A' = -A$, lo cual nos lleva a:

$$\psi(x) = 2iA \sin(kx) \quad (71)$$

Además $\psi(a) = 0$, así esto:

$$k = \frac{n\pi}{a} \quad (72)$$

donde n es un arbitrario entero positivo. Si normalizamos la función (71), tomando (72) en cuenta, entonces obtenemos las funciones de onda estacionarias:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (73)$$

con energías:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (74)$$

La cuantización de los niveles de energía es así, en este caso, particularmente simple.

Problemas

Problema 2.1: El potencial Delta

Supongamos que tenemos el potencial de la forma:

$$V(x) = -V_0\delta(x); \quad V_0 > 0; \quad x \in \mathfrak{R}.$$

La correspondiente función de onda $\psi(x)$ se supone que es suave.

a) Busca los estado ligado ($E < 0$) los cuales están localizados en este potencial.

b) Calcula la dispersión de una onda plana llegando en este potencial y encuentra el *coeficiente de reflexión*

$$R = \frac{|\psi_{ref}|^2}{|\psi_{leg}|^2} \Big|_{x=0}$$

donde ψ_{ref} , ψ_{leg} es la onda reflejada y la de llegada, respectivamente.

Sugerencia: Para evaluar el comportamiento de $\psi(x)$ en $x=0$, integra la ecuación de Schrödinger en el intervalo $(-\varepsilon, +\varepsilon)$ y considera el límite $\varepsilon \rightarrow 0$.

Solución. a) La ecuación de Schrödinger está dada por

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0\delta(x))\psi(x) = 0 \quad (75)$$

Lejos del origen tenemos una ecuación diferencial de la forma

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x). \quad (76)$$

Las funciones de onda son por lo tanto de la forma

$$\psi(x) = Ae^{-qx} + Be^{qx} \quad \text{si} \quad x > 0 \quad \text{o} \quad x < 0, \quad (77)$$

con $q = \sqrt{-2mE/\hbar^2} \in \mathfrak{R}$. Como $|\psi|^2$ debe ser integrable, allí no puede haber una parte incrementándose exponencialmente. Además la función de onda debe ser continua en el origen. De aquí,

$$\begin{aligned} \psi(x) &= Ae^{qx}; & (x < 0), \\ \psi(x) &= Ae^{-qx}; & (x > 0). \end{aligned} \quad (78)$$

Integrando la ecuación de Schrödinger desde $-\varepsilon$ a $+\varepsilon$, obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon)] - V_0\psi(0) = E \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \psi(x)dx \approx 2\varepsilon E\psi(0) \quad (79)$$

Insertando ahora el resultado (78) y tomando el límite $\varepsilon \rightarrow \infty$, tenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(-qA - qA) - V_0A = 0 \quad (80)$$

o $E = -m(V_0^2/2\hbar^2)$. Claramente hay sólo un eigenvalor de energía. La constante de normalización es encontrada que es $A = \sqrt{mV_0/\hbar^2}$.

b) La función de onda de una onda plana es descrita por

$$\psi(x) = Ae^{ikx}, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (81)$$

Se mueve de izquierda a derecha y es reflejada en el potencial. Si B o C es la amplitud de la onda reflejada o transmitida, respectivamente, tenemos

$$\begin{aligned} \psi(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx}; & (x < 0), \\ \psi(x) &= Ce^{ikx}; & (x > 0). \end{aligned} \quad (82)$$

Las condiciones de continuidad y la relación $\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon) = -f\psi(0)$ con $f = 2mV_0/\hbar^2$ da

$$\begin{aligned} A + B &= C & B &= -\frac{f}{f + 2ik}A, \\ ik(C - A + B) &= -fC & C &= \frac{2ik}{f + 2ik}A. \end{aligned} \quad (83)$$

El coeficiente de reflexión deseado es por lo tanto

$$R = \frac{|\psi_{ref}|^2}{|\psi_{leg}|^2} \Big|_{x=0} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{m^2V_0^2}{m^2V_0^2 + \hbar^4k^2}. \quad (84)$$

Si el potencial es extremadamente fuerte ($V_0 \rightarrow \infty$) $R \rightarrow 1$, o sea, la onda entera es reflejada.

El *coeficiente de transmisión* es, por otro lado,

$$T = \frac{|\psi_{trans}|^2}{|\psi_{leg}|^2} \Big|_{x=0} = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{\hbar^4k^2}{m^2V_0^2 + \hbar^4k^2}. \quad (85)$$

Si el potencial es muy fuerte, ($V_0 \rightarrow \infty$) $T \rightarrow 0$, o sea, la onda transmitida se desvanece.

Obviamente, $R + T = 1$ como se esperaba.

Problema 2.2: Partícula en un Pozo de Potencial finito Unidimensional

Resuelve la ecuación unidimensional de Schrödinger para un pozo de potencial finito descrito por el siguiente potencial

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

Considera solo estados ligados ($E < 0$).

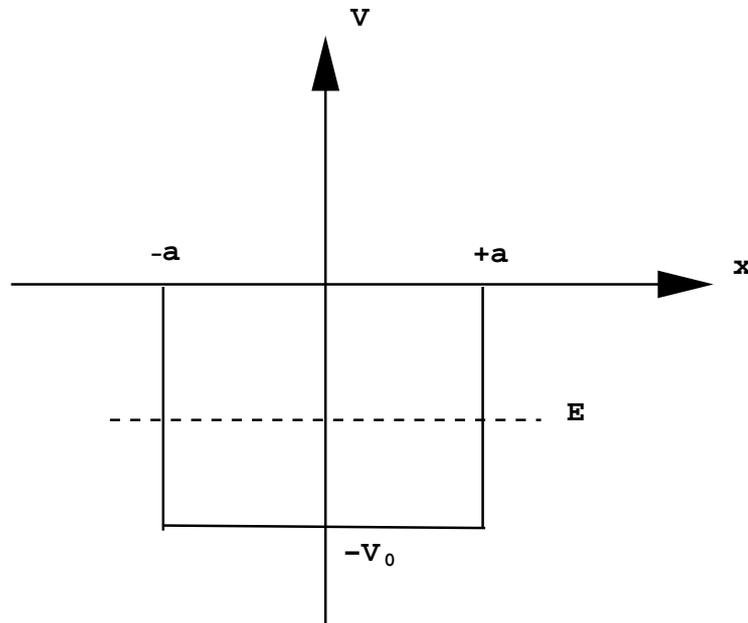


Fig. 2.5

Solución. a) La función de onda para $|x| < a$ y $|x| > a$. La correspondiente ecuación de Schrödinger esta dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (86)$$

Definimos

$$q^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} \quad (87)$$

y obtenemos:

- 1) si $x < -a$: $\psi_1''(x) - q^2\psi_1 = 0$, $\psi_1 = A_1e^{qx} + B_1e^{-qx}$;
- 2) si $-a \leq x \leq a$: $\psi_2''(x) + k^2\psi_2 = 0$, $\psi_2 = A_2 \cos(kx) + B_2 \sin(kx)$;
- 3) si $x > a$: $\psi_3''(x) - q^2\psi_3 = 0$, $\psi_3 = B_3e^{qx} + B_3e^{-qx}$.

b) Formulación de las condiciones de frontera. La normalización de los estados ligados requiere que la solución se haga cero en el infinito. Esto significa que $B_1 = A_3 = 0$. Además, $\psi(x)$ debe ser continuamente diferenciable. Todas las soluciones particulares son fijadas de tal forma que ψ también como su primera derivada ψ' son suaves en ese valor de x correspondiendo a la frontera entre el interior y el exterior. La segunda derivada ψ'' contiene el salto requerido por el potencial tipo caja de esta ecuación de Schrödinger. Todo esto junto nos lleva a

$$\begin{aligned}\psi_1(-a) &= \psi_2(-a), & \psi_2(a) &= \psi_3(a), \\ \psi'_1(-a) &= \psi'_2(-a), & \psi'_2(a) &= \psi'_3(a).\end{aligned}\quad (88)$$

c) Las ecuaciones de eigenvalores. De (88) obtenemos cuatro ecuaciones lineales y homogéneas para los coeficientes A_1, A_2, B_2 y B_3 :

$$\begin{aligned}A_1 e^{-qa} &= A_2 \cos(ka) - B_2 \sin(ka), \\ qA_1 e^{-qa} &= A_2 k \sin(ka) + B_2 k \cos(ka), \\ B_3 e^{-qa} &= A_2 \cos(ka) + B_2 \sin(ka), \\ -qB_3 e^{-qa} &= -A_2 k \sin(ka) + B_2 k \cos(ka).\end{aligned}\quad (89)$$

Por adición y sustracción obtenemos un sistema de ecuaciones más fácil de resolver:

$$\begin{aligned}(A_1 + B_3)e^{-qa} &= 2A_2 \cos(ka) \\ q(A_1 + B_3)e^{-qa} &= 2A_2 k \sin(ka) \\ (A_1 - B_3)e^{-qa} &= -2B_2 \sin(ka) \\ q(A_1 - B_3)e^{-qa} &= 2B_2 k \cos(ka).\end{aligned}\quad (90)$$

Asumiendo que $A_1 + B_3 \neq 0$ y $A_2 \neq 0$, Las primeras dos ecuaciones resultan

$$q = k \tan(ka).\quad (91)$$

Insertando ésta en una de las últimas dos ecuaciones da

$$A_1 = B_3; \quad B_2 = 0.\quad (92)$$

De aquí, como resultado, tenemos una solución simétrica con $\psi(x) = \psi(-x)$. Entonces hablamos de una *paridad positiva*.

Casi idéntico cálculo no lleva para $A_1 - B_3 \neq 0$ y para $B_2 \neq 0$ a

$$q = -k \cot(ka) \quad y \quad A_1 = -B_3; \quad A_2 = 0.\quad (93)$$

La función de onda así obtenida es antisimétrica, correspondiendo a una *paridad negativa*.

d) Solución cualitativa de el problema de eigenvalores. La ecuación que conecta q y k , la cual ya hemos obtenido, son condiciones para el eigenvalor de energía. Usando la forma corta

$$\xi = ka, \quad \eta = qa,\quad (94)$$

obtenemos de la definición (87)

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} = r^2.\quad (95)$$

Por otro lado, usando (91) y (93) obtenemos las ecuaciones

$$\eta = \xi \tan(\xi), \quad \eta = -\xi \cot(\xi).$$

Por lo tanto los valores de energía deseados pueden ser obtenidos construyendo la intersección de esas dos curvas con el círculo definido por (95), en el plano ξ - η (ver figura 2.6).

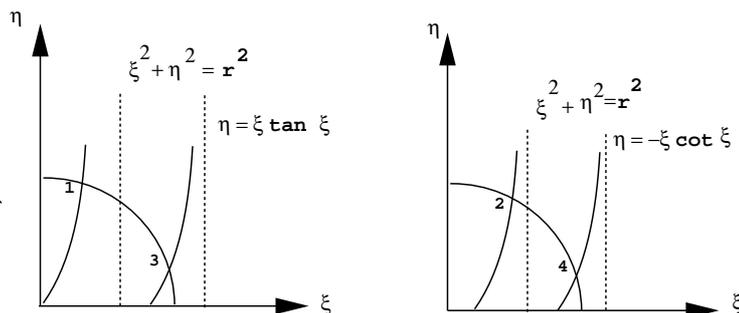


Fig. 2.6

Al menos una solución existe para valores arbitrarios del parámetro V_0 , en el caso de paridad positiva, porque la función tangente interseca el origen. Para paridad negativa, el radio del círculo necesita ser más grande que un valor mínimo de tal forma que las dos curvas puedan intersectarse. El potencial debe tener una cierta profundidad en conexión con un tamaño dado a y una masa dada m , para permitir una solución con paridad negativa. El número de niveles de energía se incrementa con V_0 , a y la masa m . Para el caso en que $mVa^2 \rightarrow \infty$, las intersecciones son encontradas en

$$\begin{aligned} \tan(ka) &= \infty & \text{correspondiendo a} & \quad ka = \frac{2n-1}{2}\pi, \\ -\cot(ka) &= \infty & \text{correspondiendo a} & \quad ka = n\pi, \end{aligned} \quad (96)$$

donde $n = 1, 2, 3, \dots$
o combinado:

$$k(2a) = n\pi. \quad (97)$$

Para el espectro de energía esto significa que

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{2a} \right)^2 - V_0. \quad (98)$$

Ampliando el pozo de potencial y/o la masa de la partícula m , la diferencia entre dos eigenvalores de energía vecinos decrecerá. El estado más bajo ($n = 1$) no está localizado en $-V_0$, sino un poco más arriba. Esta diferencia es llamada la *energía de punto cero*.

e) La forma de la función de onda es mostrada en la figura 2.7 para la solución discutida.

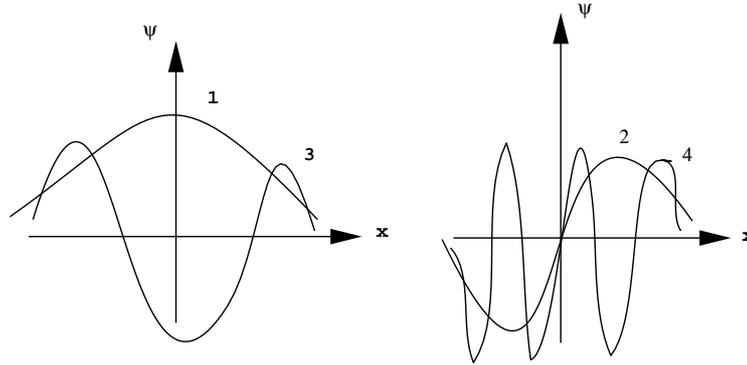


Fig. 2.7: Formas de las funciones de onda

Problema 2.3: Partícula en un Pozo de Potencial infinito Unidimensional

Resuelve la ecuación unidimensional de Schrödinger para una partícula que se encuentra en un pozo de potencial infinito descrito como sigue:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x' < x < x' + 2a \\ \infty & \text{si } x' \geq x \text{ o } x \geq x' + 2a \end{cases}$$

Tenemos que la solución en forma general es

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (99)$$

donde

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (100)$$

Como ψ debe cumplir que $\psi(x') = \psi(x' + 2a) = 0$, se tiene:

$$A \sin(kx') + B \cos(kx') = 0 \quad (101)$$

$$A \sin[k(x' + 2a)] + B \cos[k(x' + 2a)] = 0 \quad (102)$$

Multiplicando (101) por $\sin[k(x' + 2a)]$ y (102) por $\sin(kx')$ y, enseguida, restando el segundo resultado del primero obtenemos:

$$B [\cos(kx') \sin[k(x' + 2a)] - \cos[k(x' + 2a)] \sin(kx')] = 0 \quad (103)$$

o a través de una identidad trigonométrica:

$$B \sin(2ak) = 0 \quad (104)$$

Multiplicando (101) por $\cos[k(x' + 2a)]$ y restándole la multiplicación de (102) por $\cos(kx')$, se tiene:

$$A [\sin(kx') \cos[k(x' + 2a)] - \sin[k(x' + 2a)] \cos(kx')] = 0 \quad (105)$$

o a través de la misma identidad trigonométrica:

$$A \sin[k(-2ak)] = A \sin[k(2ak)] = 0 \quad (106)$$

Como se descarta la solución trivial $\psi = 0$, entonces por las ecuaciones (104) y (106) se tiene que $\sin(2ak) = 0$ y esto sólo ocurre si $2ak = n\pi$, siendo n un entero. Según lo anterior $k = n\pi/2a$ y como $k^2 = 2mE/\hbar^2$ entonces tenemos que los eigenvalores están dados por la expresión:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{8a^2 m} \quad (107)$$

La energía está cuantizada ya que sólo se le permiten ciertos valores; para cada $k_n = n\pi/2a$ le corresponde la energía $E_n = [n^2/2m][\pi\hbar/2a]^2$.

La solución en la forma general queda como:

$$\psi_n = a \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) + B \cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right). \quad (108)$$

Normalizando:

$$1 = \int_{x'}^{x'+2a} \psi \psi^* dx = a(A^2 + B^2) \quad (109)$$

lo que nos lleva a

$$A = \pm \sqrt{1/a - B^2} \quad (110)$$

Sustituyendo este valor de A en (101) se obtiene:

$$B = \mp \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi x'}{2a}\right) \quad (111)$$

Sustituyendo este valor de B en (110) se tiene:

$$A = \pm \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{n\pi x'}{2a}\right) \quad (112)$$

Tomando los signos superiores de A y B , y sustituyendo sus valores en (108) se tiene:

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}\right)(x - x') \quad (113)$$

Utilizando los signos inferiores de A y B se tiene:

$$\psi_n = -\frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}\right)(x - x'). \quad (114)$$

3. MOMENTO ANGULAR EN LA MC

Introducción

De la *Mecánica Clásica* se sabe que, el *momento angular* \mathbf{l} de las partículas macroscópicas está dado por

$$\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}, \quad (1)$$

donde \mathbf{r} y \mathbf{p} son respectivamente el vector de posición y el momento lineal.

Sin embargo, en *Mecánica Cuántica*, el operador momento angular (OMA), en general no es un operador que se exprese solamente por el operador coordenada \hat{x}_j y el operador momento lineal \hat{p}_k , los cuales, solo actúan sobre las funciones propias (FP) de coordenadas. Por lo tanto, es muy importante establecer, antes que nada, las relaciones de conmutación para las componentes del OMA, es decir, en *Mecánica Cuántica* \mathbf{l} se representa por el operador

$$\mathbf{l} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla, \quad (2)$$

cuyas componentes son operadores que satisfacen las siguientes reglas de conmutación

$$[l_x, l_y] = il_z, \quad [l_y, l_z] = il_x, \quad [l_z, l_x] = il_y, \quad (3)$$

además, cada uno de ellos conmuta con el cuadrado del OMA, esto es

$$l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2, \quad [l_i, l^2] = 0, \quad i = 1, 2, 3. \quad (4)$$

Estas relaciones, además de ser válidas para el OMA, también se cumplen para el operador spin (OS), el cual, carece de análogo en la *mecánica clásica*.

Estas relaciones de conmutación son básicas para obtener el espectro de dichos operadores, así como sus representaciones diferenciales.

Momento Angular Orbital

Para un punto cualquiera de un espacio espacio fijo (EP), se puede tener una función $\psi(x, y, z)$, para el cual, consideramos dos sistemas cartesianos Σ y Σ' , donde Σ' se obtiene de rotar el eje z .

En general un EP se refiere a un sistema de coordenadas diferentes a Σ y Σ' .

Ahora bien, comparemos los valores de ψ en dos puntos del EP con las mismas coordenadas (x, y, z) en Σ y Σ' , esto es equivalente a rotar un vector

$$\psi(x', y', z') = R\psi(x, y, z) \quad (5)$$

donde R es la matriz de rotación en \mathbb{R}^3

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad (6)$$

entonces

$$R\psi(x, y, z) = \psi(x \cos \phi - y \sin \phi, x \sin \phi + y \cos \phi, z). \quad (7)$$

Por otro lado es importante recordar que las funciones de onda (FO) no dependen del sistema de coordenadas y que la transformación a rotaciones de las FP se hace por medio de operadores unitarios, luego entonces, para establecer la forma del operador unitario (OU) $U^\dagger(\phi)$ que lleva

ψ a ψ' , siempre se considera una rotación infinitesimal $d\phi$, manteniendo solamente los términos lineales en $d\phi$ cuando se expande ψ' en series de Taylor al rededor del punto x

$$\begin{aligned}\psi(x', y', z') &\approx \psi(x + yd\phi, xd\phi + y, z), \\ &\approx \psi(x, y, z) + d\phi \left(y \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right), \\ &\approx (1 - id\phi l_z) \psi(x, y, z),\end{aligned}\tag{8}$$

donde hemos empleado la notación¹

$$l_z = \hbar^{-1}(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x),\tag{9}$$

la cual, como se verá más adelante, corresponde al operador de proyección en z del momento angular de acuerdo con la definición en (2) y dividido por \hbar , tal que, para la rotación del ángulo ϕ finito, se pueda representar como una exponencial, es decir

$$\psi(x', y', z) = e^{il_z \phi} \psi(x, y, z),\tag{10}$$

donde

$$\hat{U}^\dagger(\phi) = e^{il_z \phi}.\tag{11}$$

Para reafirmar el concepto de rotación, consideremosla de una manera más general con la ayuda del vector $\vec{\hat{A}}$ que actúa sobre ψ asumiendo que \hat{A}_x , \hat{A}_y , \hat{A}_z tienen la misma forma en Σ y Σ' , es decir, que los valores promedio de $\vec{\hat{A}}$ calculados en Σ y Σ' deben ser iguales cuando se ven desde el EF, esto es

$$\begin{aligned}\int \psi^*(\vec{r}') (\hat{A}_x \hat{i}' + \hat{A}_y \hat{j}' + \hat{A}_z \hat{k}') \psi(\vec{r}') d\vec{r}' \\ = \int \psi^*(\vec{r}) (\hat{A}_x \hat{i} + \hat{A}_y \hat{j} + \hat{A}_z \hat{k}) \psi(\vec{r}) d\vec{r},\end{aligned}\tag{12}$$

donde

$$\hat{i}' = \hat{i} \cos \phi + \hat{j} \sin \phi, \quad \hat{j}' = \hat{i} \sin \phi + \hat{j} \cos \phi, \quad \hat{k}' = \hat{k}.\tag{13}$$

Luego entonces, si combinamos (10), (12) y (13) tenemos

$$\begin{aligned}e^{il_z \phi} \hat{A}_x e^{-il_z \phi} &= \hat{A}_x \cos \phi - \hat{A}_y \sin \phi, \\ e^{il_z \phi} \hat{A}_y e^{-il_z \phi} &= \hat{A}_x \sin \phi + \hat{A}_y \cos \phi, \\ e^{il_z \phi} \hat{A}_z e^{-il_z \phi} &= \hat{A}_z.\end{aligned}\tag{14}$$

Nuevamente consideremos rotaciones infinitesimales y desarrollando las partes de la izquierda en (14) se puede determinar las relaciones de conmutación de \hat{A}_x , \hat{A}_y y \hat{A}_z con \hat{l}_z

$$[l_z, A_x] = iA_y, \quad [l_z, A_y] = -iA_x, \quad [l_z, A_z] = 0,\tag{15}$$

y de manera similar para l_x y l_y .

Las condiciones básicas para obtener tales relaciones de conmutación son

¹La demostración de (8) se presenta como el problema 3.1

- ★ La FP se transforma como en (7) cuando $\Sigma \rightarrow \Sigma'$
- ★ Las componentes $\hat{A}_x, \hat{A}_y, \hat{A}_z$ tienen la misma forma en Σ y Σ'
- ★ Los vectores de los valores promedio de \hat{A} en Σ y Σ' coinciden (son iguales) para un observador en el EF.

También se puede usar otra representación en la cual la FO $\psi(x, y, z)$ no cambia cuando $\Sigma \rightarrow \Sigma'$ y los operadores vectoriales se transforman como vectores. Para pasar a tal representación cuando ϕ rota al rededor de z se usa el operador $\hat{U}(\phi)$, es decir

$$e^{il_z\phi}\psi'(x, y, z) = \psi(x, y, z), \quad (16)$$

entonces

$$e^{-il_z\phi}\hat{A}e^{il_z\phi} = \hat{A}. \quad (17)$$

y utilizando las relaciones dadas en (14)

$$\begin{aligned} \hat{A}'_x &= \hat{A}_x \cos \phi + \hat{A}_y \sin \phi = e^{-il_z\phi}\hat{A}_x e^{il_z\phi}, \\ \hat{A}'_y &= -\hat{A}_x \sin \phi + \hat{A}_y \cos \phi = e^{-il_z\phi}\hat{A}_y e^{il_z\phi}, \\ \hat{A}'_z &= e^{-il_z\phi}\hat{A}_z e^{il_z\phi}. \end{aligned} \quad (18)$$

Dado que las transformaciones de la nueva representación se hacen con operadores unitarios, las relaciones de conmutación no se cambian.

Observaciones

- ★ El operador \hat{A}^2 es invariante ante rotaciones, esto es

$$e^{-il_z\phi}\hat{A}^2 e^{il_z\phi} = \hat{A}'^2 = \hat{A}^2 \quad (19)$$

- ★ Resulta que

$$[\hat{l}_i, \hat{A}^2] = 0, \quad (20)$$

- ★ Si el operador Hamiltoniano es de la forma

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + U(\vec{r}), \quad (21)$$

entonces se mantiene invariante ante rotaciones dadas en cualquier eje que pasa por el origen de coordenadas

$$[\hat{l}_i, \hat{H}] = 0 \quad (22)$$

donde las \hat{l}_i son integrales de movimiento.

Definición

Si \hat{A}_i son las componentes de un operador vectorial que actúa sobre una FO de coordenadas y si hay operadores \hat{l}_i que cumplen con las siguientes relaciones de conmutaciones.

$$[\hat{l}_i, \hat{A}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{A}_k, \quad [\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{l}_k. \quad (23)$$

Luego entonces, las \hat{l}_i se llaman *componentes del operador momento angular orbital*, y podemos concluir de (20) y (23) que

$$[\hat{l}_i, \hat{l}^2] = 0. \quad (24)$$

Por lo tanto, las tres componentes asociadas con las componentes de un momento angular clásico arbitrario satisfacen las relaciones de conmutación. Más aún, puede mostrarse que el origen de estas relaciones conducen a propiedades geométricas de rotación en un espacio tridimensional. Esto es porque adoptamos un punto de vista más general y definiremos un momento angular \mathbf{J} como cualquier conjunto de tres observables J_x , J_y y J_z los cuales cumplen las relaciones de conmutación, es decir

$$[J_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk}J_k. \quad (25)$$

Entonces introducimos el operador

$$\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2, \quad (26)$$

el (escalar) cuadrado del momento angular \mathbf{J} . Este operador es Hermitiano, dado que J_x , J_y y J_z son Hermitianos, y asumiremos que es un observable, ahora mostremos que \mathbf{J}^2 conmuta con las tres componentes de \mathbf{J}

$$[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}] = 0. \quad (27)$$

Por el hecho de que \mathbf{J}^2 conmuta con cada una de sus componentes, entonces hay un sistema completo de FP

$$\mathbf{J}^2\psi_{\gamma\mu} = \gamma\psi_{\gamma\mu}, \quad J_z^2\psi_{\gamma\mu} = \mu\psi_{\gamma\mu}. \quad (28)$$

Los operadores J_i y J_k ($i \neq k$) no conmutan, es decir, no tienen FP en común.

En lugar de usar las componentes J_x y J_y del momento angular \mathbf{J} , es más conveniente introducir las siguientes combinaciones lineales

$$J_+ = J_x + iJ_y, \quad J_- = J_x - iJ_y. \quad (29)$$

Los cuales no son Hermíticos, tal como lo operadores a y a^\dagger del oscilador armónico, solamente son adjuntos.

Ahora, si hacemos las operaciones indicadas en la izquierda concluimos que

$$[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm, \quad [J_+, J_-] = 2J_z, \quad (30)$$

$$[J^2, J_+] = [J^2, J_-] = [J^2, J_z] = 0. \quad (31)$$

$$J_z(J_\pm\psi_{\gamma\mu}) = \{J_\pm J_z + [J_z, J_\pm]\}\psi_{\gamma\mu} = (\mu \pm 1)J_\pm\psi_{\gamma\mu}. \quad (32)$$

Luego entonces las $\psi_{\gamma\mu}$ son FP de los valores de J_z (autovalores) $\mu \pm 1$, es decir

$$\begin{aligned} J_+\psi_{\gamma\mu-1} &= \alpha_\mu\psi_{\gamma\mu}, \\ J_-\psi_{\gamma\mu} &= \beta_\mu\psi_{\gamma\mu-1}. \end{aligned} \quad (33)$$

pero

$$\alpha_\mu^* = J_+\psi_{\gamma\mu+1}, \psi_{\gamma\mu} = \psi_{\gamma\mu+1}J_-\psi_{\gamma\mu} = \beta_\mu, \quad (34)$$

tal que, al tomar una fase del tipo e^{ia} (con a real) para la función $\psi_{\gamma\mu}$ se puede hacer α_μ real e igual a β_μ , esto quiere decir

$$J_+\psi_{\gamma\mu-1} = \alpha_\mu\psi_{\gamma\mu}, J_-\psi_{\gamma\mu} = \alpha_\mu\psi_{\gamma\mu-1}, \quad (35)$$

y por lo tanto

$$\begin{aligned} \gamma &= \psi_{\gamma\mu}, [J_x^2 + J_y^2 + J_z^2]\psi_{\gamma\mu} = \mu^2 + a + b, \\ a &= (\psi_{\gamma\mu}, J^2\psi_{\gamma\mu}) = (J_x\psi_{\gamma\mu}, J_x\psi_{\gamma\mu}) \geq 0, \\ b &= (\psi_{\gamma\mu}, J^2\psi_{\gamma\mu}) = (J_y\psi_{\gamma\mu}, J_y\psi_{\gamma\mu}) \geq 0. \end{aligned} \quad (36)$$

La norma de cualquier función es no negativa, esto implica que

$$\gamma \geq \mu^2, \quad (37)$$

para γ fijo, el valor de μ tiene límite superior e inferior (es decir, tiene valores en un intervalo finito).

Sean Λ y λ esos límites (superior e inferior de μ) para un γ dado

$$J_+\psi_{\gamma\Lambda} = 0, \quad J_-\psi_{\gamma\lambda} = 0. \quad (38)$$

Ahora, utilizando las siguientes igualdades operatoriales

$$\begin{aligned} J_-J_+ &= \mathbf{J}^2 - j_z^2 + J_z = \mathbf{J}^2 - J_z(J_z - 1), \\ J_+J_- &= \mathbf{J}^2 - j_z^2 + J_z = \mathbf{J}^2 - J_z(J_z + 1), \end{aligned} \quad (39)$$

actuando sobre $\psi_{\gamma\Lambda}$ y $\psi_{\gamma\lambda}$ se obtiene

$$\begin{aligned} \gamma - \Lambda^2 - \Lambda &= 0, \\ \gamma - \lambda^2 + \lambda &= 0, \\ (\lambda - \lambda + 1)(\lambda + \lambda) &= 0. \end{aligned} \quad (40)$$

La condición

$$\Lambda \geq \lambda \rightarrow \Lambda = -\lambda = J \rightarrow \gamma = J(J+1). \quad (41)$$

Para un γ dado (fijo) la proyección del momento μ toma $2J+1$ valores que difieren por una unidad de \mathbf{J} a $-\mathbf{J}$. Por eso, la diferencia $\Lambda - \lambda = 2J$ debe ser un número entero y consecuentemente los autovalores J_z tomados por m son enteros, esto es

$$m = k, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (42)$$

o semienteros

$$m = k + \frac{1}{2}, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (43)$$

Para un estado dado $\gamma = J(J+1)$, es degenerado con grado $g = 2J+1$ respecto a los autovalores de la posición del momento m (esto es porque J_i, J_k conmutan con J^2 pero no conmutan entre ellos).

Por "estado de momento angular J " se entiende en la mayoría de los casos, un estado con $\gamma = J(J+1)$ en el cual, el valor máximo de la proyección es J . Tales estados se denotan por ψ_{jm} o $|jm\rangle$.

Vamos a encontrar los elementos de matriz de J_x , J_y de la representación en la cual, J^2 y J_z son diagonales, luego entonces de (35) y (39) se tiene que

$$\begin{aligned} J_- J_+ \psi_{jm-1} &= \alpha_m J_- \psi_{jm} = \alpha_m \psi_{jm-1}, \\ J(J+1) - (m-1)^2 - (m-1) &= \alpha_m^2, \\ \alpha_m &= \sqrt{(J+m)(J-m+1)}. \end{aligned} \quad (44)$$

Ahora, combinando (44) con (35) se obtiene

$$J_+ \psi_{jm-1} = \sqrt{(J+m)(J-m+1)} \psi_{jm}, \quad (45)$$

resulta que el elemento de matriz de J_+ es

$$\langle jm | J_+ | jm-1 \rangle = \sqrt{(J+m)(J-m+1)} \delta_{nm}, \quad (46)$$

y de manera análoga

$$\langle jn | J_- | jm \rangle = -\sqrt{(J+m)(J-m+1)} \delta_{nm-1}, \quad (47)$$

por último, de la definición en (29) J^+ , J_- se obtiene fácilmente

$$\begin{aligned} \langle jm | J_x | jm-1 \rangle &= \frac{1}{2} \sqrt{(J+m)(J-m+1)}, \\ \langle jm | J_y | jm-1 \rangle &= \frac{-i}{2} \sqrt{(J+m)(J-m+1)}, \end{aligned} \quad (48)$$

A Modo de Conclusión

α (*Propiedades de los Eigenvalores de \mathbf{J} y J_z*)

Si $j(j+1)\hbar^2$ y j_z son los eigenvalores de \mathbf{J} y J_z asociados con los eigenvectores $|kjm\rangle$, entonces j y m satisfacen la desigualdad

$$-j \leq m \leq j.$$

β (*Propiedades del Vector $J_- |kjm\rangle$*)

Sea $|kjm\rangle$ un eigenvector de \mathbf{J}^2 y J_z con los eigenvalores $j(j+1)\hbar^2$ y $m\hbar$

- (i) Si $m = -j$, $J_- |kj-j\rangle = 0$.
- (ii) Si $m > -j$, $J_- |kjm\rangle$ es un eigenvector no nulo de J^2 y J_z con los eigenvalores $j(j+1)\hbar^2$ y $(m-1)\hbar$.

γ (*Propiedades del Vector $J_+ |kjm\rangle$*)

Sea $|kjm\rangle$ un eigenvector de \mathbf{J}^2 y J_z con los eigenvalores $j(j+1)\hbar^2$ y $m\hbar$

- * Si $m = j$, $J_+ |kjm\rangle = 0$.
- * Si $m < j$, $J_+ |kjm\rangle$ es un vector no nulo de \mathbf{J}^2 y J_z con los eigenvalores $j(j+1)\hbar^2$ y $(m+1)\hbar$

δ Luego entonces

$$\begin{aligned} J_z |kjm\rangle &= m\hbar |kjm\rangle, \\ J_+ |kjm\rangle &= m\hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |kjm+1\rangle, \\ J_- |kjm\rangle &= m\hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |kjm+1\rangle. \end{aligned}$$

Aplicación del Momento Angular Orbital

Hemos considerado las propiedades del momento angular derivadas únicamente de las relaciones de conmutación, ahora retomaremos el momento angular \mathbf{L} de una partícula sin giro y veremos como dicha teoría desarrollada en la sección anterior se aplica a un caso particular, esto es

$$[\hat{l}_i, \hat{p}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k. \quad (49)$$

Por lo tanto, \hat{l}_z y \hat{p}_j tienen un sistema común de funciones propias. Por otro lado, el Hamiltoniano de una partícula libre

$$\hat{H} = \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}}{\sqrt{2m}} \right)^2,$$

por el hecho de ser el cuadrado de un operador vectorial tiene el mismo sistema de FP que \hat{l}_y y \hat{l}_z . Además, esto implica que la partícula libre se puede encontrar en un estado con E , l , m bien determinados.

Eigenvalores y Eigenfunciones de L^2 y L

Es más conveniente trabajar con coordenadas esféricas (o polares), dado que, como veremos, varios operadores del momento angular actúan solamente sobre los ángulos variables θ , ϕ y no en la variable r . En lugar de caracterizar el vector r por sus componentes cartesianas x , y , z llamaremos el punto correspondiente M en el espacio ($\mathbf{OM} = \mathbf{r}$) por sus coordenadas esféricas, esto es

$$x = r \cos \phi \sin \theta, \quad y = r \sin \phi \sin \theta, \quad z = r \cos \theta, \quad (50)$$

con

$$r \geq 0, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi.$$

Sean $\Phi(r, \theta, \phi)$ y $\Phi'(r, \theta, \phi)$ las FO de una partícula en Σ y Σ' en la cual la rotación infinitesimal esta dada por $\delta\alpha$ al rededor de z

$$\begin{aligned} \Phi'(r, \theta, \phi) &= \Phi(r, \theta, \phi + \delta\alpha), \\ &= \Phi(r, \theta, \phi) + \delta\alpha \frac{\partial \Phi}{\partial \phi}, \end{aligned} \quad (51)$$

ó bien

$$\Phi'(r, \theta, \phi) = (1 + i\hat{l}_z \delta\alpha)\Phi(r, \theta, \phi). \quad (52)$$

Luego entonces, resulta que

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \phi} = i\hat{l}_z \Phi, \quad \hat{l}_z = -i \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (53)$$

Para una rotación infinitesimal en x

$$\begin{aligned} \Phi'(r, \theta, \phi) &= \Phi + \delta\alpha \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial \alpha} + \frac{\partial \Phi}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial \alpha} \right), \\ &= (1 + i\hat{l}_x \delta\alpha)\Phi(r, \theta, \phi), \end{aligned} \quad (54)$$

pero en tal rotación

$$z' = z + y\delta\alpha; \quad y' = z + y\delta\alpha; \quad x' = x \quad (55)$$

y de (50) se obtiene

$$\begin{aligned} r \cos(\theta + d\theta) &= r \cos \theta + r \sin \theta \sin \phi \delta\alpha, \\ r \sin \phi \sin(\theta + d\theta) &= r \sin \theta \sin \phi + r \sin \theta \sin \phi - r \cos \theta \delta\alpha, \end{aligned} \quad (56)$$

es decir

$$\sin \theta d\theta = \sin \theta \sin \phi \delta\alpha \rightarrow \frac{d\theta}{d\alpha} = -\sin \phi, \quad (57)$$

y

$$\begin{aligned} \cos \theta \sin \phi d\theta + \sin \theta \cos \phi d\phi &= -\cos \theta \delta\alpha, \\ \cos \phi \sin \theta \frac{d\phi}{d\alpha} &= -\cos \theta - \cos \theta \sin \phi \frac{d\theta}{d\alpha}, \end{aligned} \quad (58)$$

ahora, sustituyendo (57) en (56)

$$\frac{d\phi}{d\alpha} = -\cot \theta \cos \phi, \quad (59)$$

tal que al sustituir (56) y (58) en (51) y comparando las partes de la derecha en (51) se obtiene

$$\hat{l}_x = i \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right). \quad (60)$$

En el caso de la rotación en y , el resultado es similar, tal que

$$\hat{l}_y = i \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right). \quad (61)$$

Usando \hat{l}_x , \hat{l}_y también se puede obtener \hat{l}_\pm , \hat{l}^2 , esto es

$$\begin{aligned} \hat{l}_\pm &= \exp(\pm i\phi) \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \\ \hat{l}^2 &= \hat{l}_- \hat{l}_+ + \hat{l}^2 + \hat{l}_z, \\ &= - \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right]. \end{aligned} \quad (62)$$

de (62) se ve que \hat{l}^2 es idéntico hasta una constante al operador de Laplace en la parte angular, esto es

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \quad (63)$$

Funciones Propias de l_z

$$\begin{aligned} \hat{l}_z \Phi_m &= m\Phi = -i \frac{\partial \Phi_m}{\partial \phi}, \\ \Phi_m &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}. \end{aligned} \quad (64)$$

Condiciones de Hermiticidad de \hat{l}_z

$$\int_0^{2\pi} f^* \hat{l}_z g d\phi = \left(\int_0^{2\pi} g^* \hat{l}_z f d\phi \right)^* + f^* g(2\pi) - f^* g(0). \quad (65)$$

Entonces \hat{l}_z es hermítico en la clase de funciones para las cuales

$$f^* g(2\pi) = f^* g(0). \quad (66)$$

Las funciones propias de Φ_m de \hat{l}_m pertenecen a $L^2(0, 2\pi)$ y cumplen con (66), así como para cualquier función que se pueda desarrollar en $\Phi_m(\phi)$, esto es

$$\begin{aligned} F(\phi) &= \sum_k a_k e^{ik\phi}, & k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \\ G(\phi) &= \sum_k b_k e^{ik\phi}, & k = \pm 1/2, \pm 3/2, \pm 5/2 \dots, \end{aligned} \quad (67)$$

solo m enteros ó m semi-enteros, pero no para combinaciones de $F(\phi)$, $G(\phi)$.

Las elecciones apropiadas de m están basadas en el experimento de FP comunes de \hat{l}_z y \hat{l}^2 .

Armónicos Esféricos

En la representación $\{\vec{r}\}$, las eigenfunciones asociadas con los eigenvalores $l(l+1)\hbar^2$, de \mathbf{L}^2 y $m\hbar$ de l_z son las soluciones de la Ec. diferencial parcial

$$\begin{aligned} - \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \psi(r, \theta, \phi) &= l(l+1)\psi(r, \theta, \phi), \\ -i \frac{\partial}{\partial \phi} \psi(r, \theta, \phi) &= m\hbar \psi(r, \theta, \phi). \end{aligned} \quad (68)$$

Considerando que los resultados generales obtenidos son aplicables al momento angular, sabemos que l es un entero o un semi entero y que para l, m fijos, puede tomarse solamente los valores

$$-l, -l+1, \dots, l-1, l.$$

En (68), r no aparece en el operador diferencial, así que puede considerarse como un parametro y tomar en cuenta solo la dependencia en θ, ϕ de ψ . Luego entonces podemos denotar por $Y_{lm}(\theta, \phi)$ como una eigenfunción comun de \mathbf{L}^2 y l_z la cual corresponde a los eigenvalores de $l(l+1)\hbar^2, m\hbar$, esto es

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) &= l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta, \phi), \\ l_z Y_{lm}(\theta, \phi) &= m\hbar Y_{lm}(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (69)$$

Para ser completamente rigurosos, tenemos que introducir un índice adicional con el objeto de distinguir entre varias soluciones de (69), las cuales correspondan al mismo par de valores l, m . En efecto, como se verá más adelante, estas Ecs. tienen solamente una solución (en un factor constante) para cada par de valores permitidos de l, m ; esto es porque los subíndices l, m son suficientes.

La Ec. (69) dió a θ, ϕ dependencia de las eigenfunciones de \mathbf{L}^2 y l_z . Una de las soluciones de $Y_{lm}(\theta, \phi)$ de estas Ecs. han sido encontradas de la siguiente manera²

$$\psi_{lm}(r, \theta, \phi) = f(r)\psi_{lm}(\theta, \phi), \quad (70)$$

²Demostración en el problema 3.4

donde $f(r)$ es una función de r la cual aparece como una constante de integración para las ecuaciones diferenciales parciales de (68). El hecho de que $f(r)$ sea arbitraria muestra que \mathbf{L}^2 y l_z no forman un conjunto completo de observables comunes³ en el espacio ε_r^4 o funciones de \vec{r} (o de r, θ, ϕ).

Con el objeto de normalizar $\psi_{lm}(r, \theta, \phi)$, es conveniente normalizar $Y_{lm}(\theta, \phi)$ y $f(r)$ separadamente (como se muestra). Entonces, debemos tomar un diferencial de ángulo sólido

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta |\psi_{lm}(\theta, \phi)|^2 d\theta = 1, \quad (71)$$

$$\int_0^\infty r^2 |f(r)|^2 dr = 1. \quad (72)$$

Valores de l, m

α : l, m deben ser enteros

Usando $l_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$, podemos escribir (69) como sigue

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} Y_{lm}(\theta, \phi) = m \hbar Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (73)$$

la cual muestra que

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = F_{lm}(\theta, \phi) e^{im\phi}. \quad (74)$$

Si permitimos que $0 \leq \phi < 2\pi$, entonces podemos cubrir todo el espacio ya que la función debe ser continua en todas partes, tal que

$$Y_{lm}(\theta, \phi = 0) = Y_{lm}(\theta, \phi = 2\pi), \quad (75)$$

lo que implica

$$e^{im\pi} = 1. \quad (76)$$

Según se vió, m es un entero o un semi entero, la aplicación al momento angular orbital, muestra que m debe ser un entero. ($e^{2im\pi}$ será igual -1 si m fuera semientero).

β : Todo valor entero (positivo o cero) de l puede ser encontrado escogiendo un valor entero de l , se sabe de la teoría general que $Y_{lm}(\theta, \phi)$ debe cumplirse, esto es

$$L_+ Y_{lm}(\theta, \phi) = 0, \quad (77)$$

la cual, al combinar $L_+ = \hbar e^{i\phi}$ y (62)

$$\left(\frac{d}{d\theta} - l \cot \theta \right) F_{lm}(\theta) = 0. \quad (78)$$

Esta Ec. de primer orden puede ser integrada inmediatamente si notamos que

$$\cot \theta d\theta = \frac{d(\sin \theta)}{\sin \theta}, \quad (79)$$

³Por definición, el operador hermitico A es una observable si este sistema ortogonal de vectores forma una base en el espacio de estados

⁴Cada estado cuántico de la partícula es caracterizado por un estado vectorial perteneciente a un espacio abstracto ε_r

su solución general es

$$F_{ll} = c_l (\sin \theta)^l, \quad (80)$$

donde c_l es una constante de normalización.

Consecuentemente, para cualquier valor positivo o cero de l , existe una función $Y_{ll}(\theta, \phi)$ la cual es igual (con un factor constate)

$$Y^{ll}(\theta, \phi) = c_l (\sin \theta)^l e^{il\phi}. \quad (81)$$

Através de la acción repetida de L_- , construimos $Y_{ll-1}(\theta, \phi), \dots, Y_{lm}(\theta, \phi), \dots, Y_{l-l}(\theta, \phi)$. Luego entonces, vemos que la correspondencia para el par de eigenvalores $l(l+1)\hbar, m\hbar$ (donde l es un entero positivo arbitrario o cero y m es otro entero tal que $l \leq m \leq l$), de (78) una y solamente una eigenfunción $Y_{lm}(\theta, \phi)$, puede ser ambiguamente calculada de (78). A las eigenfunción $Y_{lm}(\theta, \phi)$ se les conocen como armónicos esféricos.

Propiedades de los Armónicos Esféricos

α Relaciones de Recurrencia

Segun los resultados generales podemos tener

$$l_{\pm} Y_{lm}(\theta, \phi) = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} Y_{lm \pm 1}(\theta, \phi). \quad (82)$$

Usando la expresión (62) para l_{\pm} y el hecho de que $Y_{lm}(\theta, \phi)$ es el producto de una función dependiente solo de θ y $e^{\pm im\phi}$, obtenemos

$$e^{\pm im\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - m \cot \theta \right) Y_{lm}(\theta, \phi) = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} Y_{lm \pm 1}(\theta, \phi) \quad (83)$$

β Ortonormalización y Relación de Cerradura

La Ec. (68) determina solamente los armónicos esféricos con un factor constante. Ahora eligiremos este factor tal como ortonormalización de $Y_{lm}(\theta, \phi)$ (como función de variable angular θ, ϕ)

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) - \delta_{l'l} \delta_{m'm}. \quad (84)$$

Además, cualquier función de θ, ϕ pueden ser expresadas en términos de los armónicos esféricos, esto es

$$f(\theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (85)$$

donde

$$c_{lm} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta Y_{lm}^*(\theta, \phi) f(\theta, \phi). \quad (86)$$

Los armónicos esféricos constituyen una base ortonormal en el espacio ε_{Ω} de funciones de θ, ϕ . Este hecho se expresa por la relación de cerradura

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=l}^l Y_{lm}(\theta, \phi) Y_{lm}^*(\theta', \phi) &= \delta(\cos \theta - \cos \theta') \delta(\phi, \phi), \\ &= \frac{1}{\sin \theta} \delta(\theta - \theta') \delta(\phi, \phi). \end{aligned} \quad (87)$$

Es $\delta(\cos \theta - \cos \theta')$ y no $\delta(\theta - \theta')$ los cuales entran en el lado derecho de la relación de cerradura porque la integral sobre la variable θ se efectua usando el elemento diferencial $\sin \theta d\theta = -d(\cos \theta)$.

Operador de Paridad \mathcal{P}

El comportamiento de \mathcal{P} en tres dimensiones es esencialmente igual que en una dimensión, es decir, al aplicarlo sobre una función $\psi(x, y, z)$ de coordenadas cartesianas solo le cambi el signo, esto es

$$\mathcal{P}\psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z). \quad (88)$$

\mathcal{P} tiene las propiedades de un operador hermítico, además es un operador unitario y de proyección.

El operador \mathcal{P}^2 es un operador identidad

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \mathcal{P} | \mathbf{r}' \rangle &= \langle \mathbf{r} | -\mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} + -\mathbf{r}'), \\ \mathcal{P}^\dagger | \mathbf{r} \rangle &= \mathcal{P}(\mathcal{P} | \mathbf{r} \rangle) = \mathcal{P} | -\mathbf{r} \rangle = | \mathbf{r} \rangle, \end{aligned} \quad (89)$$

entonces

$$\mathcal{P}^2 = \hat{1}, \quad (90)$$

cuyos valores propios son $\mathcal{P} = \pm 1$. Además se tiene que las FP se llaman pares si $\mathcal{P} = 1$ e impares si $\mathcal{P} = -1$. En mecánica cuántica no relativista, el operador \hat{H} en un sistema cerrado es invariante ante transformaciones unitarias directas

$$\mathcal{P}\hat{H}\mathcal{P} = \mathcal{P}^{-1}\hat{H}\mathcal{P} = \hat{H}. \quad (91)$$

Entonces \hat{H} conmuta con \mathcal{P} y consecuentemente la paridad del estado es una integral de movimiento. También se cumple para \hat{l}

$$[\mathcal{P}, \hat{l}_i] = 0, \quad [\mathcal{P}, \hat{l}_\pm]. \quad (92)$$

Si \hat{H} es par y uno de sus eigenestados $|\Phi_n\rangle$ el cual tiene paridad definida ($\mathcal{P}|\Phi_n\rangle$), no colinear a $|\psi_n\rangle$, se ha encontrado y puede inferirse que el eigenvalor correspondiente es degenerado con un grado de degeneración n^2 , dado que \mathcal{P} conmuta con \hat{H} , ($\mathcal{P}|\Phi_n\rangle$) es un eigenvector de \hat{H} con el mismo eigenvalor como $|\Phi_n\rangle$. Si ψ es FP de \mathcal{P} , \hat{l}_y y \hat{l}_z de (92) resulta que las paridades de los estados diferentes solo en \hat{l}_z coinciden. Queda así determinado la paridad de una partícula de momento angular \hat{l} .

En coordenadas esféricas, para éste operador se considera la siguiente sustitución

$$r \rightarrow r, \quad \theta \rightarrow \pi - \theta \quad \phi \rightarrow \pi + \phi. \quad (93)$$

Consecuentemente, si usamos una base estandar para el espacio de funciones de onda de una partícula sin giro, la parte radial de la función base $\psi_{klm}(\vec{r})$ es modificada por el operado paridad. La transformación solo se da en los armónicos esféricos, como se vera.

De (93) podemos notar que

$$\sin \theta \rightarrow \sin \theta, \quad \cos \theta \rightarrow -\cos \theta \quad e^{im\phi} \rightarrow (-1)^m e^{im\phi}, \quad (94)$$

bajo estas condiciones, la función $Y_{ll}(\theta, \phi)$ es transformada en

$$Y_{ll}(\phi - \theta, \pi + \phi) = (-1)^l Y_{ll}(\theta, \phi), \quad (95)$$

de (95) podemos ver que la paridad de los armónicos esféricos va como $(-1)^l$. Por otro lado

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \rightarrow -\frac{\partial}{\partial \theta}, \quad \frac{\partial}{\partial \phi} \rightarrow \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (96)$$

Relacionando (95) y (96) mostramos que \hat{l}_\pm permanece sin cambio (lo cual implica que los operadores \hat{l}_\pm son pares). Consecuentemente podemos calcular $Y_{lm}(\theta, \phi)$,

$$Y_{lm}(\phi - \theta, \pi + \phi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (97)$$

Por lo tanto, los armónicos esféricos son funciones cuya paridad está bien definida e independiente de m , par si l es par e impar si l es impar.

El Operador Spin

Algunas partículas, además de su momento angular tienen un *momento propio*, el cual, se le conoce como *spin* y denominaremos como \hat{S} . Este operador no está relacionado con rotaciones normales espaciales, aún así, cumple con las mismas relaciones de conmutación que tienen el momento angular, esto es

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k. \quad (98)$$

Así como, las siguientes propiedades

- (1). Para el spin, valen todas las fórmulas de (23) a (48) del momento angular, las cuales son similares a (98)
- (2). El espectro de la proyección del spin, es una secuencia de números enteros ó semienteros que difieren por una unidad.
- (3). Los valores propios de \hat{S}^2 son

$$\hat{S}^2\psi = S(S+1)\psi_s. \quad (99)$$

- (4). Para un S dado, la componente S_z solo puede tomar $2S+1$ valores, de de $-S$ a $+S$.
- (5). Las FP de las partículas con spin, además de depender de \vec{r} ó \vec{p} , dependen de una variable discreta (propia del spin) σ , la cual denota la proyección del spin en z .
- (6). La FP $\psi(\vec{r}, \sigma)$ de una partícula con spin se puede desarrollar en FP con proyecciones dadas del spin S_z , esto es

$$\psi(\vec{r}, \sigma) = \sum_{\sigma=-S}^S \psi_\sigma(\vec{r})\chi(\sigma), \quad (100)$$

donde $\psi_\sigma(\vec{r})$ es la parte orbital y $\chi(\sigma)$ es la parte spinorial.

- (7). Las funciones de spin (spinores) $\chi(\sigma_i)$ son ortogonales para cualquier par de $\sigma_i \neq \sigma_k$. Las funciones $\psi_\sigma(\vec{r})\chi(\sigma)$ se les conoce como las componentes de las FO de una partícula con spin.
- (8). La función $\psi_\sigma(\vec{r})$ se llama parte orbital de la FO ó solo orbital.
- (9) La normalización se hace como sigue

$$\sum_{\sigma=-S}^S \|\psi_\sigma(\vec{r})\| = 1. \quad (101)$$

Las relaciones de conmutación permiten establecer la forma concreta de los operadores (matrices) de spin que actúan en el espacio de las FP del operador proyección del spin.

Muchas partículas elementales tales como el electrón, el neutrón, el protón, etc. tienen spin $1/2$, por eso la proyección toma solo dos valores, es decir $S_z = \pm 1/2$ (en unidades \hbar).

Por otro lado, las matrices S_x, S_y, S_z en el espacio de las FP de \hat{S}^2, \hat{S}_z son

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & S_y &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \\ S_z &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, & S^2 &= \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (102)$$

Definición de las Matrices de Pauli

Las matrices

$$\sigma_i = 2S_i \quad (103)$$

Se llaman matrices de Pauli, las cuales son matrices hermitianas, tienen la misma Ec. característica

$$\lambda^2 - 1 = 0, \quad (104)$$

por consiguiente, los eigenvalores de σ_x , σ_y y σ_z son

$$\lambda = \pm 1. \quad (105)$$

Por lo tanto, son consistente con el hecho de que S_x , S_y y S_z sean iguales a ± 1 .

Además

$$\sigma_i^2 = \hat{I}, \quad \sigma_k \sigma_j = -\sigma_j \sigma_k = i\sigma_z, \quad \sigma_j \sigma_k = i \sum_l \varepsilon_{jkl} \sigma_l + \delta_{jk} I \quad (106)$$

En el caso para el cual un sistema con spin tienen simetría esférica (esférico simétrico)

$$\psi_1(r, +\frac{1}{2}), \quad \psi_1(r, -\frac{1}{2}). \quad (107)$$

Son diferentes soluciones por la proyección S_z .

El valor de la probabilidad de una u otra de las proyecciones está determinada por el cuadrado de $||\psi_{1,2}||^2$ de tal modo que

$$||\psi_1||^2 + ||\psi_2||^2 = 1. \quad (108)$$

Como las FP de S_z tiene dos componentes, entonces

$$\chi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (109)$$

tal que, las FP de una partícula de spin 1/2 se puede escribir como

$$\psi = \psi_1 \chi_1 + \psi_2 \chi_2 = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (110)$$

A continuación las orbitas can a ser sustituidas por números dado que solamente la parte del spin es importante.

Las Transformaciones a las Rotaciones

Sea ψ la FO de un sistema con spin en Σ . Encontramos la probabilidad de la proyección del spin en una dirección arbitraria en el espacio tridimensional (3D) que la toma como eje z' de Σ' . Como ya se vio, se tiene dos métodos para su solución

α ψ no cambia cuando $\Sigma \rightarrow \Sigma'$ y el operador \hat{L} cambia como un vector. Debemos encontrar las FP de la proyección S'_z y desarrollamos ψ en esas FP. Los cuadrados de los módulos de los coeficientes dan el resultado.

$$\begin{aligned} \hat{S}'_x &= \hat{S}_x \cos \phi + \hat{S}_y \sin \phi &= e^{-i\phi} \hat{S}_x e^{i\phi}, \\ \hat{S}'_y &= -\hat{S}_x \sin \phi + \hat{S}_y \cos \phi &= e^{-i\phi} \hat{S}_y e^{i\phi}, \\ \hat{S}'_z &= -\hat{S}_z = e^{i\phi} \hat{S}_z, \end{aligned} \quad (111)$$

con rotaciones infinitesimales y de las relaciones de conmutación se puede encontrar

$$\hat{L} = \hat{S}_z, \quad (112)$$

donde \hat{L} es el generador.

β La segunda representación es:
 \hat{S} no se cambia a la $\Sigma \rightarrow \Sigma'$ y las componentes de ψ se cambian. La transformación a ésta representación se hace con una transformación unitaria

$$\begin{aligned}\hat{V}^\dagger \hat{S}' \hat{V} &= \hat{\Lambda}, \\ \begin{pmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_2 \end{pmatrix} &= \hat{V}^\dagger \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix},\end{aligned}\quad (113)$$

de (111) y (113) resulta que

$$\begin{aligned}\hat{V}^\dagger e^{-i\hat{S}_z \phi} \hat{S} e^{i\hat{S}_z \phi} \hat{V} &= \hat{S}, \\ \hat{V}^\dagger &= e^{i\hat{S}_z \phi},\end{aligned}\quad (114)$$

de (114) se obtiene

$$\begin{pmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_2 \end{pmatrix} = e^{i\hat{S}_z \phi} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad (115)$$

Usando la forma concreta de \hat{S}_z y las propiedades de las matrices de Paulí se obtiene la forma concreta \hat{V}_z^\dagger , tal que

$$\hat{V}_z^\dagger(\phi) = \begin{pmatrix} e^{\frac{i}{2}\phi} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i}{2}\phi} \end{pmatrix}. \quad (116)$$

Un Resultado de Euler

Cualquier sistema de referencia Σ' de orientación arbitraria con respecto a Σ puede ser alcanzado con solo tres rotaciones, primero al rededor del eje z , en seguida una rotación del ángulo θ sobre el nuevo eje de coordenadas x' y por último el ángulo ψ_a en el nuevo eje z' .

Los parámetros $(\varphi, \theta, \psi_a)$ se les llama ángulos de Euler

$$\hat{V}^\dagger(\varphi, \theta, \psi_a) = \hat{V}_z^\dagger(\psi_a) \hat{V}_{x'}^\dagger(\theta) \hat{V}_z^\dagger(\varphi). \quad (117)$$

Las matrices \hat{V}_z^\dagger son del tipo de (116), en cuanto a $\hat{V}_{x'}^\dagger$ es de la forma

$$\hat{V}_{x'}^\dagger(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & i \sin \frac{\theta}{2} \\ i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad (118)$$

de tal modo que

$$\hat{V}^\dagger(\varphi, \theta, \psi_a) = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\varphi+\psi_a}{2}} \cos \frac{\theta}{2} & i e^{i\frac{\psi_a-\varphi}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \\ i e^{i\frac{\varphi-\psi_a}{2}} \sin \frac{\theta}{2} & e^{-i\frac{\varphi+\psi_a}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (119)$$

Entonces por la rotación de Σ , las componentes de la función espinoidal se cambian como sigue

$$\begin{aligned}\psi'_1 &= \psi_1 e^{i\frac{\varphi+\psi_a}{2}} \cos \frac{\theta}{2} + i \psi_2 e^{i\frac{\psi_a-\varphi}{2}} \sin \frac{\theta}{2}, \\ \psi'_2 &= i \psi_1 e^{i\frac{\varphi-\psi_a}{2}} \sin \frac{\theta}{2} + \psi_2 e^{-i\frac{\varphi+\psi_a}{2}} \cos \frac{\theta}{2}.\end{aligned}\quad (120)$$

De (120) se puede ver que para una rotación en E_3 le corresponde una transformación lineal en E_2 —espacio Euclidiano bidimensional (2D)—las dos componentes de la función espinodal. La rotación en E_3 no implica una rotación en E_2 , la cual significa

$$\langle \Phi' | \psi' \rangle = \langle \Phi | \psi \rangle = \Phi_1^* \psi_1 + \Phi_2^* \psi_2. \quad (121)$$

De (119) se encuentra que (121) no se cumple, sin embargo, hay una invariancia en las transformaciones (119) en el espacio E_2 de las funciones espinoidales, el cual es

$$\{\Phi | \psi\} = \psi_1 \Phi_2 - \psi_2 \Phi_1. \quad (122)$$

Las transformaciones lineales que dejan invariantes tales formas bilineales se llaman binarias. Una transformación física con dos componentes para la cual una rotación del sistema de coordenadas es una transformación binaria se llama *spin de primer orden* o solamente *spin*.

Funciones de Onda Espinoriales de un Sistema con 2 Fermiones

Las funciones propias de \hat{s}^2 \hat{s}_z — $i = 1, 2$ —tienen la forma siguiente

$$i|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_i, \quad i|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_i. \quad (123)$$

Una variable—o mejor dicho, un operador—corriente en un sistema de dos fermiones es el espin total

$$\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2 \quad (124)$$

Las funciones propias espinoriales de \hat{s}^2 \hat{s}_z son los kets $|\hat{S}, \sigma\rangle$, las cuales son combinaciones lineales de las FP de \hat{s}^2 \hat{s}_z , esto es

$$\begin{aligned} |++\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1, & |+-\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2, \\ |-+\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1, & |--\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2. \end{aligned} \quad (125)$$

Las funciones de (125) son ortonormalizadas. En E_n el estado $|++\rangle$ es $S_z = 1$ y al mismo tiempo es función propia del operador

$$\hat{S}^2 = \hat{s}_1^2 + 2(\hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2) + \hat{s}_2^2. \quad (126)$$

Como se puede ver de

$$\hat{S}^2 |++\rangle = \frac{3}{2} |++\rangle + 2(\hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2) |++\rangle, \quad (127)$$

$$\hat{S}^2 |++\rangle = 2 |++\rangle = 1(1+1) |++\rangle. \quad (128)$$

Si se introduce el operador

$$\hat{S}_- = \hat{s}_1 - \hat{s}_2, \quad (129)$$

se obtiene que

$$[\hat{S}_-, \hat{S}^2] = 0. \quad (130)$$

Entonces $(\hat{S}_-)^k |1, 1\rangle$ se puede escribir en función de las FP del operador \hat{S}^2 , esto es

$$\hat{S}_- |1, 1\rangle = \hat{S}_- |++\rangle = \sqrt{2} |+-\rangle + \sqrt{2} |--\rangle. \quad (131)$$

Resulta que $S_z = 0$ en el estado $\hat{S}_- |1, 1\rangle$. Por otro lado, de la condición de normalización tenemos

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \quad (132)$$

$$\hat{S}_- |1, 0\rangle = |- -\rangle + |- -\rangle = \alpha |1, -1\rangle. \quad (133)$$

De la coordenada de normalización

$$|1, -1\rangle = |- , -\rangle. \quad (134)$$

Solo hay una combinación lineal independiente más de funciones de (125) diferentes de $|1, 1\rangle$, $|1, 0\rangle$ y $|1, -1\rangle$, esto es

$$\psi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle), \quad (135)$$

$$\hat{S}_z \psi_4 = 0, \quad \hat{S}^2 \psi_4. \quad (136)$$

Por consiguiente

$$\psi_4 = |0, 0\rangle. \quad (137)$$

ψ_4 describe el estado de un sistema de dos fermiones con el spin total igual a cero. Este tipo de estado se llama *singlet*. Consecuentemente el estado de dos fermiones de spin total igual a uno se llama *triplet* y tiene un grado de degeneración $g = 3$.

Momento Angular Total

Se define como la suma del momento angular orbital más el spin, esto es

$$\hat{J} = \hat{l} + \hat{S}, \quad (138)$$

donde, \hat{l} y \hat{S} como hemos visto, actúan en espacios diferentes, pero el cuadrado de \hat{l} y \hat{S} conmutan con \hat{J} , es decir

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\varepsilon_{ijk} \hat{J}_k, \quad [\hat{J}_i, \hat{l}^2] = 0, \quad [\hat{J}_i, \hat{S}^2] = 0, \quad (139)$$

(139) que \hat{l}^2 y \hat{S}^2 tienen un sistema de FP con \hat{J}^2 , y \hat{J}_z .

Encontramos el espectro de las proyecciones de \hat{J}_z para un fermión. el estado de proyección de máximo de \hat{J}_z se puede escribir como

$$\bar{\psi} = \psi_{ll} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |l, l, +\rangle \quad (140)$$

$$\hat{j}_z \bar{\psi} = (l + \frac{1}{2}) \bar{\psi}, \rightarrow j = l + \frac{1}{2}. \quad (141)$$

Si introducimos el operador \hat{J}_- definido por

$$\hat{J}_- = \hat{l}_- + \hat{S}_- = \hat{l}_- + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (142)$$

De la normalización $\alpha = \sqrt{(J+M)(J-M+1)}$ se obtiene

$$\hat{J}_- \psi_{ll} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{2l} |l, l-1, +\rangle + |l, l-1, -\rangle, \quad (143)$$

tal que el valor de la proyección de \hat{j}_- en $\hat{j}_-\bar{\psi}$ sera

$$\hat{j}_z = (l-1) + \frac{1}{2} = l - \frac{1}{2}, \quad (144)$$

resulta que \hat{j}_- disminuye por una unidad a \hat{J}_z .

En el caso general tenemos que

$$\hat{j}_-^k = \hat{l}_-^k + k\hat{l}_-^{k-1}\hat{S}_-, \quad (145)$$

se observa que (145) se obtiene del desarrollo binomial si se considera que \hat{s}_-^2 y todas las potencias superiores de \hat{s}_- son cero.

$$\hat{j}_-^k |l, l, +\rangle = \hat{l}_-^k |l, l, +\rangle + k\hat{l}_-^{k-1} |l, l, -\rangle. \quad (146)$$

Sabemos que

$$(\hat{l}_-)^k \psi_{l,l} = \sqrt{\frac{k!(2l)!}{(2l-k)!}} \psi_{l,l-k},$$

tal que al usarla se obtiene

$$\hat{j}_-^k |l, l, +\rangle = \sqrt{\frac{k!(2l)!}{(2l-k)!}} |l, l-k, +\rangle + \sqrt{\frac{(k+1)!(2l)!}{(2l-k+1)!}} k |l, l-k+1, -\rangle, \quad (147)$$

con la notación $m = l - k$

$$\hat{j}_-^{l-m} |l, l, +\rangle = \sqrt{\frac{(l-m)!(2l)!}{(l+m)!}} |l, m, +\rangle + \sqrt{\frac{(l-m-1)!(2l)!}{(2l+m+1)!}} (l-m) |l, m+1, -\rangle. \quad (148)$$

Los valores propios de la proyección del momento angular total es la secuencia de números que difieren por la unidad desde $j = l + \frac{1}{2}$ hasta $j = l - \frac{1}{2}$. Todos estos estados pertenecen a la misma función propia de \hat{J} como $|l, l, +\rangle$ porque $[\hat{J}_1, \hat{J}^2] = C$

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 |l, l, +\rangle &= (\hat{l}^2 + 2\hat{l}\hat{S} + \hat{S}^2) |l, l, +\rangle, \\ &= [l(l+1) + 2l\frac{1}{2} + \frac{3}{4}] |l, l, +\rangle \end{aligned} \quad (149)$$

donde $j(j+1) = (l + \frac{1}{2})(l + \frac{3}{2})$.

En la derecha de (149) una contribución diferente de cero da solamente $j = \hat{l}_z \hat{S}_z$. Entonces las FP obtenidas corresponden a $j = l + \frac{1}{2}$, $m_j = m + \frac{1}{2}$. Las FP son de forma

$$\Phi |l + \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}} |l, m, +\rangle + \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}} |l, m+1, -\rangle. \quad (150)$$

El número total de estados lineales independientes es

$$N = (2l+1)(2\Lambda+1) = 4l+2. \quad (151)$$

El sistema de FP constituido de tal manera contiene $2j+1 + 2l+1$ estados

$$|l - \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}} |l, m, +\rangle - \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}} |l, m+1, -\rangle. \quad (152)$$

Si dos subsistemas están interaccionando de tal manera que el momento angular de cada \hat{J}_i se conserva, entonces las FP del operador momento angular total

$$\hat{J} = \hat{j}_1 + \hat{j}_2, \quad (153)$$

se puede encontrar como lo hicimos anteriormente. Para valores propios de \hat{j}_1 y \hat{j}_2 hay

$$(2j_1 + 1)(2j_2 + 1),$$

FP ortonormalizadas de la proyección del momento angular total \hat{J}_z . La FP que corresponde al valor máximo de la proyección \hat{J}_z es decir,

$$M_J = j_1 + j_2,$$

se puede construir de manera única y por lo tanto $J = j_1 + j_2$ es el valor máximo del momento angular total del sistema. Aplicando el operador $\hat{J} = \hat{j}_1 + \hat{j}_2$ de manera repetida a la función

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_1\rangle \cdot |j_2, j_2\rangle, \quad (154)$$

se obtienen todas las $2(j_1 + j_2) + 1$ funciones ortogonales de la FP de $\hat{J} = j_1 + j_2$ con varios M

$$-(j_1 + j_2) \leq M \leq (j_1 + j_2).$$

Por ejemplo las FP para $M = j_1 + j_2 - 1$ es:

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1, j_2\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1 - 1, j_2, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1, j_2, j_2 - 1\rangle. \quad (155)$$

Aplicando en seguida varias veces el operador \hat{J}_- se puede obtener las $2(j_1 + j_2 - 1) - 1$ funciones de $J = j_1 + j_2 - 1$.

Se puede demostrar que

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2$$

tal que

$$\sum_{\min J}^{\max J} (2J + 1) = (2J_1 + 1)(2J_2 + 1), \quad (156)$$

Consecuentemente

$$|J, M, j_1, j_2\rangle = \sum_{m_1 + m_2 = M} (j_1, m, j_2 | J+) |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \quad (157)$$

Citas: 1. Acetatos del Prof. H. Rosu

Referencia bibliográfica:

1. H.A. Buchdahl, "Remark concerning the eigenvalues of orbital angular momentum", Am. J. Phys. **30**, 829-831 (1962)

Problemas

Problema No. 3.1

Mostrar que si $\psi' = R\psi$, entonces el operador R se puede representar como un operador exponencial

Solución

Para mostrarlo, expandemos $\psi'(\vec{r})$ en serie de Taylor en el punto $x' = x + dx$ y considerando solo las primeras potencias tenemos

$$\begin{aligned}\psi(x', y', z') &= \psi(x, y, z) + (x' - x) \frac{\partial}{\partial x'} \psi(x', y', z') \Big|_{\vec{r}' = \vec{r}} \\ &\quad + (y' - y) \frac{\partial}{\partial y'} \psi(x', y', z') \Big|_{\vec{r}' = \vec{r}} \\ &\quad + (z' - z) \frac{\partial}{\partial z'} \psi(x', y', z') \Big|_{\vec{r}' = \vec{r}},\end{aligned}$$

ahora considerando el hecho de que

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x'_i} \psi(\vec{r}') \Big|_{\vec{r}'} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(\vec{r}), \\ x' &= x - y d\phi, \quad y' = y + d\phi, \quad z' = z,\end{aligned}$$

tal que, esto reduce la serie de tres dimensiones a solamente dos

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}') &= \psi(\vec{r}) + (x - y d\phi - x) \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial x} + (y + x d\phi - y) \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial y}, \\ &= \psi(\vec{r}) - d\phi y \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial x} - d\phi x \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial y}, \\ &= \left[1 - d\phi \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \psi(\vec{r})\end{aligned}$$

considerando que $i\hat{l}_z = \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$ entonces tenemos que $R = \left[1 - d\phi \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \psi(\vec{r})$ entonces R puede escribirse como una exponencial

$$R = e^{i\hat{l}_z d\phi}.$$

Problema No. 3.2

Mostrar que de las expresiones dadas en (14) se puede llegar a (15)

Solución

Nuevamente, consideremos solo los términos lineales en la expansión de la serie de Taylor y dado que tenemos rotaciones infinitesimales, entonces

$$e^{i\hat{l}_z d\phi} = 1 + i\hat{l}_z d\phi + \frac{1}{2!} (i\hat{l}_z d\phi)^2 + \dots,$$

entonces tenemos que

$$\begin{aligned}(1 + i\hat{l}_z d\phi) \hat{A}_x (1 - i\hat{l}_z d\phi) &= \hat{A}_x - \hat{A}_x d\phi, \\ (\hat{A}_x + i\hat{l}_z d\phi \hat{A}_x) (1 - i\hat{l}_z d\phi) &= \hat{A}_x - \hat{A}_x d\phi, \\ \hat{A}_x - \hat{A}_x i\hat{l}_z d\phi + i\hat{l}_z d\phi \hat{A}_x + \hat{l}_z d\phi \hat{A}_x \hat{l}_z d\phi &= \hat{A}_x - \hat{A}_x d\phi, \\ i(\hat{l}_z \hat{A}_x - \hat{A}_x \hat{l}_z) d\phi &= -\hat{A}_y d\phi.\end{aligned}$$

Luego entonces, concluimos que

$$[\hat{l}_z, \hat{A}_x] = i\hat{A}_y.$$

entonces tenemos que

$$\begin{aligned} (1 + i\hat{l}_z d\phi)\hat{A}_y(1 - i\hat{l}_z d\phi) &= \hat{A}_x d\phi - \hat{A}_y, \\ (\hat{A}_y + i\hat{l}_z d\phi\hat{A}_y)(1 - i\hat{l}_z d\phi) &= \hat{A}_x d\phi - \hat{A}_y, \\ \hat{A}_y - \hat{A}_y i\hat{l}_z d\phi + i\hat{l}_z d\phi\hat{A}_y + \hat{l}_z d\phi\hat{A}_y\hat{l}_z d\phi &= \hat{A}_x d\phi - \hat{A}_y, \\ i(\hat{l}_z\hat{A}_y - \hat{A}_y\hat{l}_z)d\phi &= -\hat{A}_x d\phi. \end{aligned}$$

Problema No. 3.3

Determine la precesión del spin en un campo magnético homogéneo.

Solución

Si el cuerpo cargado se mueve en un campo magnético homogéneo circular alrededor de la dirección del campo con una frecuencia

$$\omega = 2\omega_L = \frac{-eB}{mc}.$$

Aquí, la carga del electrón es $-e$. Esto se sigue del hecho de que la fuerza de Lorentz equilibra la fuerza centrífuga.

$$\frac{eBv}{c} = m\gamma\omega^2,$$

entonces

$$\omega = -\frac{eB}{mc}.$$

Por lo tanto

$$\omega_L = \frac{eB}{2mc}$$

la cual, se conoce con el nombre de *frecuencia de Larmor*.

Problema No. 3.4

Resolver la Ec. de Laplace usando coordenadas esféricas

Solución

Asumiendo que podemos tener

$$U(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta, \phi),$$

de este modo vemos que

$$\frac{r}{R(r)} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [rR(r)] = \frac{1}{\Theta} \mathbf{L}^2 \Theta = l(l+1)$$

4. El Método WKB

Para estar en condiciones de estudiar los efectos de potenciales más realistas, que los correspondientes a *barreras y pozos de potencial*, es necesario encontrar métodos que permitan resolver la ecuación de Schrödinger para dichos potenciales.

En general no es posible construir soluciones exactas para tales casos, y lo que se hace, es recurrir a métodos de aproximación que proporcionen una solución suficientemente buena y simple, como para poder estudiar el comportamiento del sistema con ella.

Métodos como estos hay muchos, pero nos concentraremos en el método desarrollado simultáneamente por *G. Wentzel, M. A. Kramers y L. Brillouin* en 1926; y de cuyos apellidos deriva el acrónimo *WKB*.

Es importante mencionar que el método WKB, sólo es aplicable a la ecuación de Schrödinger 1-dimensional.

Para resolver la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + u(y)\psi = E\psi \quad (1)$$

supongamos que el potencial tiene la forma:

$$u(y) = u_0 f\left(\frac{y}{a}\right) \quad (2)$$

Y hacemos los cambios de variables:

$$\xi^2 = \frac{\hbar^2}{2mu_0 a^2} \quad (3)$$

$$\eta = \frac{E}{u_0} \quad (4)$$

$$x = \frac{y}{a} \quad (5)$$

de la ecuación (5) obtenemos:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial y}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} = a \frac{\partial}{\partial y} \quad (6)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(a \frac{\partial}{\partial y} \right) = \left(a \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(a \frac{\partial}{\partial x} \right) = a^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \quad (7)$$

y la ecuación de Schrödinger se escribe:

$$-\xi^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + f(x)\psi = \eta\psi \quad (8)$$

multiplicándola por $-1/\xi^2$ y definiendo $r(x) = \eta - f(x)$, es posible escribirla en la forma:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{1}{\xi^2} r(x)\psi = 0 \quad (9)$$

para resolver ésta última, proponemos la siguiente solución:

$$\psi(x) = \exp \left[\frac{i}{\xi} \int_a^x q(x) dx \right] \quad (10)$$

En general: $\int_a^x q(x)dx = Q(x)|_a^x = Q(x) - Q(a) \ni \frac{\partial Q(x)}{\partial x} = \frac{dQ(x)}{dx} = q(x)$. Esto de acuerdo con el teorema fundamental del cálculo.

Por lo que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{i}{\xi} q(x) \exp \left[\frac{i}{\xi} \int_a^x q(x) dx \right] \right\} \\ \Rightarrow \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= \frac{i}{\xi} \left\{ \frac{i}{\xi} q^2(x) \exp \left[\frac{i}{\xi} \int_a^x q(x) dx \right] + \frac{\partial q(x)}{\partial x} \exp \left[\frac{i}{\xi} \int_a^x q(x) dx \right] \right\} \end{aligned}$$

Factorizando ψ tenemos:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \left[-\frac{1}{\xi^2} q^2(x) + \frac{i}{\xi} \frac{\partial q(x)}{\partial x} \right] \psi \quad (11)$$

Olvidándonos de la dependencia en x , la ecuación de Schrödinger se escribe ahora:

$$\left[-\frac{1}{\xi^2} q^2 + \frac{i}{\xi} \frac{\partial q}{\partial x} + \frac{1}{\xi^2} r \right] \psi = 0 \quad (12)$$

En general $\psi \neq 0$ por lo que:

$$i\xi \frac{dq}{dx} + r - q^2 = 0 \quad (13)$$

que es una ecuación diferencial lineal tipo Riccati, cuya solución se busca como una serie de potencias de ξ ; suponiendo que ξ es muy pequeña.

Dicha serie proponemos que tiene la forma:

$$q(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (-i\xi)^n q_n(x) \quad (14)$$

Sustituimos ésta en la Riccati para obtener:

$$i\xi \sum_{n=0}^{\infty} (-i\xi)^n \frac{dq_n}{dx} + r(x) - \sum_{\mu=0}^{\infty} (-i\xi)^\mu q_\mu \sum_{\nu=0}^{\infty} (-i\xi)^\nu q_\nu = 0 \quad (15)$$

Rearreglando los términos de la ecuación (15) tenemos:

$$\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n (i\xi)^{n+1} \frac{dq_n}{dx} + r(x) - \sum_{\mu=0}^{\infty} \sum_{\nu=0}^{\infty} (-i\xi)^{\mu+\nu} q_\mu q_\nu = 0 \quad (16)$$

Las series dobles cumplen con:

$$\sum_{\mu=0}^{\infty} \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\mu\nu} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n a_{m, n-m}$$

Donde: $\mu = n - m \quad \nu = m$

De ésta forma:

$$\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n (i\xi)^{n+1} \frac{dq_n}{dx} + r(x) - \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n (-i\xi)^{n-m+m} q_m q_{n-m} = 0 \quad (17)$$

Veamos por separado unos cuantos términos de cada una de las series contenidas en la ecuación (17):

$$\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n (i\xi)^{n+1} \frac{dq_n}{dx} = i\xi \frac{dq_0}{dx} + \xi^2 \frac{dq_1}{dx} - i\xi^3 \frac{dq_2}{dx} + \dots \quad (18)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n (-i\xi)^n q_m q_{n-m} = q_0^2 - i2\xi q_0 q_1 + \dots \quad (19)$$

Para que ambas series contengan en su primer término, de sus respectivos desarrollos a $i\xi$, debemos escribirlas:

$$\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} (i\xi)^n \frac{dq_{n-1}}{dx} + r(x) - q_0^2 - \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^n (-i\xi)^n q_m q_{n-m} = 0$$

De la cual obtenemos:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left[-(-i\xi)^n \frac{dq_{n-1}}{dx} - \sum_{m=0}^n (-i\xi)^n q_m q_{n-m} \right] + \left[r(x) - q_0^2 \right] = 0 \quad (20)$$

Para que se satisfaga la igualdad anterior, debemos exigir que:

$$r(x) - q_0^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad q_0 = \pm \sqrt{r(x)} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} & -(-i\xi)^n \frac{dq_{n-1}}{dx} - \sum_{m=0}^n (-i\xi)^n q_m q_{n-m} = 0 \\ \Rightarrow & \frac{dq_{n-1}}{dx} = - \sum_{m=0}^n q_m q_{n-m} \quad n \geq 1 \end{aligned} \quad (22)$$

A la cual llamaremos **relación de recurrencia**. Recordando que definimos $r(x) = \eta - f(x)$, $\eta = \frac{E}{u_0}$ & $f(x) = \frac{u}{u_0}$; obtenemos con ayuda de la ecuación (21) que:

$$q_0 = \pm \sqrt{\eta - f(x)} = \pm \sqrt{\frac{E}{u_0} - \frac{u}{u_0}} = \pm \sqrt{\frac{2m(E - u)}{2mu_0}} \quad (23)$$

Ésta última es la conexión clásica para el momento de una partícula de energía E en el potencial u , en unidades de $\sqrt{2mu_0}$. Por ello:

$$q_0 = p(x) = \sqrt{\eta - f(x)}$$

(**que no es operador**) Si aproximamos hasta segundo orden, tenemos lo siguiente:

$$q(x) = q_0 - i\xi q_1 - \xi^2 q_2$$

y empleando la ecuación de recurrencia calculamos q_1 y q_2 :

$$\begin{aligned} \frac{dq_0}{dx} = -2q_0 q_1 \quad \Rightarrow \quad q_1 = -\frac{1}{2} \frac{\frac{dq_0}{dx}}{q_0} = -\frac{1}{2} \frac{d}{dx} (\ln |q_0|) \\ \Rightarrow \quad q_1 = -\frac{1}{2} \frac{d}{dx} (\ln |p(x)|) \end{aligned} \quad (24)$$

$$\frac{dq_1}{dx} = -2q_0 q_2 - q_1^2 \quad \Rightarrow \quad q_2 = -\frac{\frac{dq_1}{dx} - q_1^2}{2q_0} \quad (25)$$

De la ecuación (24), nos percatamos de que q_1 es la pendiente con el signo cambiado de $\ln |q_0|$; cuando q_0 es muy pequeño, $q_1 \ll 0 \Rightarrow -\xi q_1 \gg 0$, y en consecuencia la serie diverge. Lo que nos lleva a exigir la siguiente **condición WKB**:

$$|q_0| \gg |-\xi q_1| = \xi |q_1|$$

La condición WKB no se satisface para puntos x_k tales que:

$$q_0(x_k) = p(x_k) = 0$$

recordando que $q_0 = p = \sqrt{\frac{2m(E-u)}{2mu_0}}$, la ecuación anterior nos conduce a:

$$E = u(x_k) \quad (26)$$

En física clásica puntos x_k que satisfacen la ecuación (26), son llamados **puntos de retorno**; ya que en ellos la partícula invierte el sentido de su movimiento.

En base a lo anterior, podemos decir que q_0 es una solución clásica del problema, y que q_1 & q_2 son respectivamente, la primer y segunda correcciones cuánticas del problema.

Para obtener las funciones de onda, sólo consideraremos la solución clásica, y la primer corrección cuántica del problema; y las sustituimos en nuestra propuesta para ψ :

$$\begin{aligned} \psi = \exp \left[\frac{i}{\xi} \int_a^x q(x) dx \right] = \exp \left[\frac{i}{\xi} \int_a^x (q_0 - i\xi q_1) dx \right] \\ \Rightarrow \quad \psi = \exp \left(\frac{i}{\xi} \int_a^x q_0 dx \right) \cdot \exp \left(\int_a^x q_1 dx \right) \end{aligned}$$

Para el segundo factor tenemos:

$$\begin{aligned} \exp \left(\int_a^x q_1 dx \right) = \exp \left[-\frac{1}{2} \int_a^x \frac{d}{dx} (\ln |p(x)|) dx \right] = \\ = \exp \left[-\frac{1}{2} (\ln |p(x)|) \Big|_a^x \right] = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \end{aligned}$$

con A una constante. Para el primer factor tenemos:

$$\exp\left(\frac{i}{\xi} \int_a^x q_0 dx\right) = \exp\left[\pm \frac{i}{\xi} \int_a^x p(x) dx\right]$$

Y ψ puede ser escrita como:

$$\psi^\pm = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[\pm \frac{i}{\xi} \int_a^x p(x) dx\right] \quad (27)$$

y se llaman **las soluciones WKB de la ecuación de Schrödinger uno-dimensional**.

La solución general WKB en la región para la cual se cumple la condición WKB, se escribe:

$$\psi = a_+ \psi^+ + a_- \psi^- \quad (28)$$

Como ya se dijo, no hay solución WKB en los puntos de retorno; lo que nos lleva a cuestionarnos como es que $\psi(x < x_k)$ pasa a $\psi(x > x_k)$, y para esto se hace necesaria la introducción de las fórmulas de conexión.

Las Fórmulas De Conexión

Ya se dijo que las soluciones WKB, son singulares en los puntos clásicos de retorno; no obstante estas soluciones son válidas a la izquierda, y a la derecha de un punto clásico de retorno x_k . Y por ello nos cuestionamos como es que $\psi(x < x_k)$ pasa a $\psi(x > x_k)$; es decir, debemos encontrar las fórmulas de conexión.

De la teoría de ecuaciones diferenciales ordinarias, y con apoyo del análisis de funciones de variable compleja, puede demostrarse que las fórmulas de conexión existen y que son las siguientes:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= \frac{1}{[-r(x)]^{\frac{1}{4}}} \exp\left(-\int_x^{x_k} \sqrt{-r(x)} dx\right) \rightarrow \\ &\rightarrow \frac{2}{[r(x)]^{\frac{1}{4}}} \cos\left(\int_{x_k}^x \sqrt{r(x)} dx - \frac{\pi}{4}\right) \end{aligned} \quad (29)$$

donde $\psi_1(x)$ sólo tiene un comportamiento exponencial decreciente para $x < x_k$. Lo que significa nuestra primer fórmula de conexión, es que una función $\psi(x)$, que a la izquierda de un punto clásico de retorno se comporte como una exponencial decreciente, pasa a la derecha del punto clásico de retorno como un *coseno* de fase $\phi = \frac{\pi}{4}$, y con el doble de la amplitud de la exponencial.

Ahora, en el caso de una función $\psi(x)$ más general; es decir, una función que tenga un comportamiento exponencial creciente y decreciente; la fórmula de conexión correspondiente es:

$$\begin{aligned} \sin\left(\phi + \frac{\pi}{4}\right) \frac{1}{[-r(x)]^{\frac{1}{4}}} \exp\left(\int_x^{x_k} \sqrt{-r(x)} dx\right) \leftarrow \\ \leftarrow \frac{1}{[r(x)]^{\frac{1}{4}}} \cos\left(\int_{x_k}^x \sqrt{r(x)} dx + \phi\right) \end{aligned} \quad (30)$$

siempre que ϕ no tenga un valor muy cercano a $-\frac{\pi}{4}$; la razón de ello es que si $\phi = -\frac{\pi}{4}$, el *seno* se anula. Esta segunda fórmula de conexión, significa que una función que se comporta como un

coseno a la derecha de un punto clásico de retorno, pasa a la izquierda de él como una exponencial creciente con amplitud modulada por un *seno*.

Para ver los detalles de como son obtenidas estas fórmulas de conexión, debe consultarse el libro: *Mathematical Methods of Physics* by *J. Mathews & R.L. Walker*.

Estimación Del Error Introducido en la Aproximación WKB

Hemos encontrado la solución a la ecuación de Schrödinger en cualquier región donde se satisfaga la condición WKB; no obstante, las soluciones WKB divergen en los puntos clásicos de retorno como ya se ha señalado. Analizaremos un tanto superficialmente esta problemática a fin de proponer las llamadas *fórmulas de conexión* en una vecindad próxima a los puntos clásicos de retorno.

Supongamos que $x = x_k$, es un punto clásico de retorno; es decir, es un punto tal que se cumple: $q_0(x_k) = p(x_k) = 0 \Rightarrow E = u(x_k)$. Ahora bien, a la izquierda de x_k ; es decir para puntos del espacio 1-dimensional tales que $x < x_k$, supongamos que $E < u(x)$, de modo que en esta región la solución WKB es:

$$\begin{aligned} \psi(x) = & \frac{a}{\left[\frac{u(x)-E}{u_0}\right]^{\frac{1}{4}}} \exp\left(-\frac{1}{\xi} \int_x^{x_k} \sqrt{\frac{u(x)-E}{u_0}} dx\right) + \\ & + \frac{b}{\left[\frac{u(x)-E}{u_0}\right]^{\frac{1}{4}}} \exp\left(\frac{1}{\xi} \int_x^{x_k} \sqrt{\frac{u(x)-E}{u_0}} dx\right) \end{aligned} \quad (31)$$

de igual forma a la derecha de x_k , es decir para puntos del espacio 1-dimensional tales que $x > x_k$ supondremos que $E > u(x)$, en consecuencia la solución WKB en esta región es:

$$\begin{aligned} \psi(x) = & \frac{c}{\left[\frac{E-u(x)}{u_0}\right]^{\frac{1}{4}}} \exp\left(\frac{i}{\xi} \int_{x_k}^x \sqrt{\frac{E-u(x)}{u_0}} dx\right) + \\ & + \frac{d}{\left[\frac{E-u(x)}{u_0}\right]^{\frac{1}{4}}} \exp\left(-\frac{i}{\xi} \int_{x_k}^x \sqrt{\frac{E-u(x)}{u_0}} dx\right) \end{aligned} \quad (32)$$

Si $\psi(x)$ es una función real, lo será tanto a la derecha como a la izquierda de x_k , a esto le llamaremos "*reality condition*", y establece que si $a, b \in \mathfrak{R}$, entonces $c = d^*$.

Nuestro problema es conectar las aproximaciones a cada lado de x_k a modo de que se refieran a la misma solución exacta; esto es encontrar c y d si conocemos a y b , y viceversa. Para hacer dicha conexión, debemos utilizar una solución aproximada, la cual sea válida a lo largo de un camino que conecte las regiones a ambos lados de x_k , donde las soluciones WKB sean válidas también.

Lo más común es recurrir a un método propuesto por *Zwann* y *Kemble*, el cual consiste en evadir el eje real en las cercanías de x_k , mediante el recorrido de un camino que encierre a x_k en el plano complejo; a lo largo de este camino las soluciones WKB seguirán siendo válidas. En esta exposición recurriremos a dicho método, pero sólo con la finalidad de obtener un medio de estimar errores en la aproximación WKB.

La estimación de errores es importante, a causa de que se desea obtener soluciones aproximadas, en un amplio intervalo de puntos del espacio 1-dimensional; y se debe estar preocupado en si el error se acumula, y si posteriormente traerá consigo corrimientos de fase.

Para esto definimos las funciones WKB asociadas como:

$$W_{\pm} = \frac{1}{\left[\frac{E-u(x)}{u_0}\right]^{\frac{1}{4}}} \exp\left(\pm \frac{i}{\xi} \int_{x_k}^x \sqrt{\frac{E-u(x)}{u_0}} dx\right) \quad (33)$$

a éstas las consideraremos como funciones de variable compleja respecto de x , y emplearemos cortes de tipo rama para eludir discontinuidades en los ceros de $r(x) = \frac{E-u(x)}{u_0}$. Estas funciones satisfacen una ecuación diferencial, que puede obtenerse diferenciándolas respecto a x , para tener:

$$\begin{aligned} W'_{\pm} &= \left(\pm \frac{i}{\xi} \sqrt{r} - \frac{1}{4} \frac{r'}{r}\right) W_{\pm} \\ W''_{\pm} + \left[\frac{r}{\xi^2} + \frac{1}{4} \frac{r''}{r} - \frac{5}{16} \left(\frac{r'}{r}\right)^2\right] W_{\pm} &= 0 \end{aligned} \quad (34)$$

nombramos a:

$$s(x) = \frac{1}{4} \frac{r''}{r} - \frac{5}{16} \left(\frac{r'}{r}\right)^2 \quad (35)$$

entonces las W_{\pm} son soluciones exactas de:

$$W''_{\pm} + \left[\frac{1}{\xi^2} r(x) + s(x)\right] W_{\pm} = 0 \quad (36)$$

mientras que sólo satisfacen aproximadamente a la ecuación de Schrödinger; la cula es regular en $x = x_k$, mientras que la ecuación satisfecha por las funciones WKB asociadas es singular en dicho punto.

Procedamos a definir funciones $\alpha_{\pm}(x)$ tales que cumplan con las dos relaciones siguientes:

$$\psi(x) = \alpha_+(x)W_+(x) + \alpha_-(x)W_-(x) \quad (37)$$

$$\psi'(x) = \alpha_+(x)W'_+(x) + \alpha_-(x)W'_-(x) \quad (38)$$

donde $\psi(x)$ es una solución a la ecuación de Schrödinger. Resolviendo las ecuaciones anteriores para las α_{\pm} ; tenemos:

$$\alpha_+ = \frac{\psi W'_- - \psi' W_-}{W_+ W'_- - W'_+ W_-} \quad \alpha_- = -\frac{\psi W'_+ - \psi' W_+}{W_+ W'_- - W'_+ W_-}$$

siendo el denominador de éstas el **Wronskiano** de W_+ y W_- ; no es difícil demostrar que éste toma el valor $-\frac{2}{\xi}i$, así que las α_{\pm} se simplifican a:

$$\alpha_+ = \frac{\xi}{2}i (\psi W'_- - \psi' W_-) \quad (39)$$

$$\alpha_- = -\frac{\xi}{2}i (\psi W'_+ - \psi' W_+) \quad (40)$$

Tomando la derivada respecto a x de las ecuaciones (9) y (10), tenemos:

$$\frac{d\alpha_{\pm}}{dx} = \frac{\xi}{2}i (\psi' W'_{\mp} + \psi W''_{\mp} - \psi'' W_{\mp} - \psi' W'_{\mp}) \quad (41)$$

dentro del paréntesis el primer y cuarto término se anulan; recordemos que:

$$\psi'' + \frac{1}{\xi^2} r(x) \psi = 0 \quad \& \quad W''_{\pm} + \left[\frac{1}{\xi^2} r(x) + s(x) \right] W_{\pm} = 0$$

podemos escribir la ecuación (11) como:

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_{\pm}}{dx} &= \frac{\xi}{2} i \left[-\psi \left(\frac{r}{\xi^2} + s \right) W_{\mp} + \frac{r}{\xi^2} \psi W_{\mp} \right] \\ \frac{\alpha_{\pm}}{dx} &= \mp \frac{\xi}{2} i s(x) \psi(x) W_{\mp}(x) \end{aligned} \quad (42)$$

y en base a las ecuaciones (3) y (7):

$$\frac{d\alpha_{\pm}}{dx} = \mp \frac{\xi}{2} i \frac{s(x)}{[r(x)]^{\frac{1}{2}}} \left[\alpha_{\pm} + \alpha_{\mp} \exp \left(\mp \frac{2}{\xi} i \int_{x_k}^x \sqrt{r(x)} dx \right) \right] \quad (43)$$

Las ecuaciones (12) y (13) son usadas para *estimar el error que se comete en la aproximación WKB para un punto particular del espacio 1-dimensional*.

La razón de que se considere a $\frac{d\alpha_{\pm}}{dx}$, como una estimación del error que se comete en la aproximación WKB, es que en las ecuaciones (1) y (2) las constantes a , b y c , d respectivamente, tan sólo nos dan soluciones ψ aproximadas; mientras que las funciones α_{\pm} al introducirlas en las ecuaciones (7) y (8), nos proporcionan soluciones ψ exactas; y al tomar su derivada obtenemos la pendiente de la recta tangente a ellas, y ésta nos dice cuanto es que se desvian las α_{\pm} de las constantes a , b , c y d .

Nota: Los artículos WKB originales son:

G. Wentzel, "Eine Verallgemeinerung der Wellenmechanik",
Zeitschrift für Physik **38**, 518-529 (1926) [received 18 June 1926]

L. Brillouin, "La mécanique ondulatoire de Schrödinger; une méthode générale de resolution par approximations successives",
Compte Rendue **183**, 24-26 (1926) [received 5 July 1926]

H.A. Kramers, "Wellenmechanik und halbzahlige Quantisierung",
Zf. Physik **39**, 828-840 (1926) [received 9 Sept. 1926]

H. Jeffreys, "On certain approx. solutions of linear diff. eqs. of the second order",
Proc. Lond. Math. Soc. **23**, 428-436 (1925)

P r o b l e m a s

Problema 4.1

Veamos un ejemplo de como se usa el método WKB en mecánica cuántica: Consideremos una partícula de energía E que se mueve en un potencial $u(x)$, la correspondiente ecuación estacionaria de Schrödinger es:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - u(x)] \psi = 0 \quad (44)$$

y consideremos que $u(x)$ tiene la forma que se muestra en la figura 4.1.

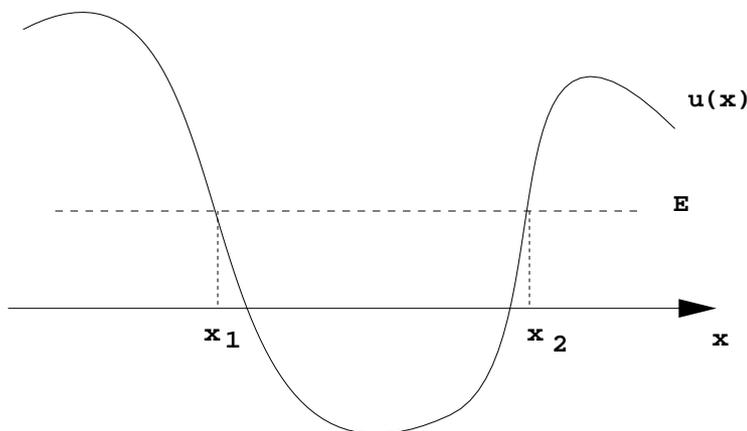


Fig. 4.1

Como podemos ver:

$$r(x) = \frac{2m}{\hbar^2} [E - u(x)] \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{es positiva para } a < x < b \\ \text{es negativa para } x < a, x > b \end{array} \right.$$

Si $\psi(x)$ corresponde a puntos tales que $x < a$, al pasar al intervalo $a < x < b$, nuestra fórmula de conexión es la ecuación (29) y nos dice que:

$$\psi(x) \approx \frac{A}{[E - u]^{\frac{1}{4}}} \cos \left(\int_a^x \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - u)} dx - \frac{\pi}{4} \right) \quad (45)$$

donde A es una constante arbitraria,

Cuando $\psi(x)$ corresponde a $x > b$, al pasar al intervalo $a < x < b$ similarmente:

$$\psi(x) \approx -\frac{B}{[E - u]^{\frac{1}{4}}} \cos \left(\int_x^b \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - u)} dx - \frac{\pi}{4} \right) \quad (46)$$

donde B es una constante arbitraria. La razón de que nuestra fórmula de conexión sea nuevamente la ecuación (29), es que cuando la partícula llega al segundo punto clásico de retorno, $x = b$, ésta invierte la dirección de su movimiento, y entonces es como si hubiera venido de derecha a izquierda; lo que equivale a ver la primer situación de izquierda a derecha en el punto $x = a$, en un espejo.

Estas dos expresiones independientemente de las constantes A y B , deben de ser las mismas; así que:

$$\begin{aligned} \cos \left(\int_a^x \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-u)} dx - \frac{\pi}{4} \right) &= -\cos \left(\int_x^b \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-u)} dx - \frac{\pi}{4} \right) \\ \Rightarrow \cos \left(\int_a^x \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-u)} dx - \frac{\pi}{4} \right) + \cos \left(\int_x^b \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-u)} dx - \frac{\pi}{4} \right) &= 0 \end{aligned} \quad (47)$$

Recordando que:

$$\cos A + \cos B = 2 \cos \left(\frac{A+B}{2} \right) \cos \left(\frac{A-B}{2} \right)$$

la ecuación (47) se escribe:

$$\begin{aligned} 2 \cos \left[\frac{1}{2} \left(\int_a^x \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-u)} dx - \frac{\pi}{4} + \int_x^b \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-u)} dx - \frac{\pi}{4} \right) \right] \cdot \\ \cdot \cos \left[\frac{1}{2} \left(\int_a^x \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-u)} dx - \frac{\pi}{4} - \int_x^b \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-u)} dx + \frac{\pi}{4} \right) \right] &= 0 \end{aligned} \quad (48)$$

lo que implica que los argumentos de estos *cosenos* sean un múltiplo entero de $\frac{\pi}{2}$; el argumento del segundo *coseno* no nos lleva a algún resultado interesante, por lo que sólo prestaremos atención al argumento del primer *coseno*, el cual por el contrario si nos lleva a un resultado de gran importancia; entonces:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left(\int_a^x \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-u)} dx - \frac{\pi}{4} + \int_x^b \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-u)} dx - \frac{\pi}{4} \right) &= \frac{n}{2} \pi \quad \text{para } n \text{ impar} \\ \Rightarrow \int_a^b \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-u)} dx - \frac{\pi}{2} &= n\pi \\ \Rightarrow \int_a^b \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-u)} dx &= (n + \frac{1}{2})\pi \\ \Rightarrow \int_a^b \sqrt{2m(E-u)} dx &= (n + \frac{1}{2})\pi\hbar \end{aligned} \quad (49)$$

Este resultado es muy similar a las reglas de cuantización de *Bohr - Sommerfeld*.

Recordemos que el postulado de Bohr establece que el momento angular de un electrón, que se mueve en una órbita permitida en torno a un núcleo atómico, está cuantizado y su valor es igual a: $L = n\hbar$, $n = 1, 2, 3, \dots$. Y recordemos también que las reglas de cuantización de Wilson - Sommerfeld, establecen que toda coordenada de un sistema físico que varíe periódicamente en el tiempo deberá satisfacer la condición cuántica: $\oint p_q dq = n_q h$; donde q es una coordenada periódica, p_q es el momento asociado con ella, n_q es un número entero y h es la constante de Planck. Y como podemos ver el resultado obtenido de la aproximación WKB es muy similar a estos dos.

Problema 4.2

Estimemos el error que se comete en la solución WKB, en un punto $x_1 \neq x_k$, con x_k un punto clásico de retorno; para la ecuación diferencial $y'' + xy = 0$. La solución de este problema en física, es importante para el estudio de campos uniformes; tales como el campo gravitacional ó el campo eléctrico uniforme debido a placas planas con carga eléctrica.

Solución:

Para esta ecuación diferencial tenemos que:

$$\xi = 1, \quad r(x) = x \quad \& \quad s(x) = -\frac{5}{16}x^{-2}$$

$r(x) = x$ solamente tiene un cero en $x_k = 0$, así que para $x \gg 0$:

$$W_{\pm} = x^{-\frac{1}{4}} \exp\left(\pm i \int_0^x \sqrt{x} dx\right) = x^{-\frac{1}{4}} \exp\left(\pm \frac{2}{3}ix^{\frac{3}{2}}\right) \quad (50)$$

Derivando las W_{\pm} una y dos veces respecto a x , nos damos cuenta de que satisfacen la siguiente ecuación diferencial:

$$W_{\pm}'' + \left(x - \frac{5}{16}x^{-2}\right)W_{\pm} = 0 \quad (51)$$

La solución exacta $y(x)$ a esta ecuación diferencial, la escribiremos como una combinación lineal de las W_{\pm} , tal y como se indicó en la sección correspondiente a la estimación de error en la aproximación WKB; si recordamos la combinación lineal se propuso de la forma:

$$y(x) = \alpha_+(x)W_+(x) + \alpha_-(x)W_-(x)$$

Para x muy grandes una solución general de nuestra ecuación diferencial, está descrita por la aproximación WKB como:

$$y(x) = Ax^{-\frac{1}{4}} \cos\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}} + \delta\right) \quad \text{cuando } x \rightarrow \infty \quad (52)$$

de modo que $\alpha_+ \rightarrow \frac{A}{2}e^{i\delta}$ y $\alpha_- \rightarrow \frac{A}{2}e^{-i\delta}$ para $x \rightarrow \infty$. Deseamos calcular el error en esta solución WKB; el cual es medido por la desviación de α_+ y α_- respecto de las constantes A . Para esto utilizamos la ecuación:

$$\frac{d\alpha_{\pm}}{dx} = \mp \frac{\xi}{2} i \frac{s(x)}{\sqrt{r(x)}} \left[\alpha_{\pm} + \alpha_{\mp} \exp\left(\mp 2i \int_{x_k}^x \sqrt{r(x)} dx\right) \right]$$

y efectuando las sustituciones correspondientes:

$$\frac{d\alpha_{\pm}}{dx} = \mp \frac{i}{2} \left(-\frac{5}{16}x^{-2}\right) x^{-\frac{1}{2}} \left[\frac{A}{2}e^{\pm i\delta} + \frac{A}{2}e^{\mp i\delta} \exp\left(\mp 2i \frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right) \right] \quad (53)$$

sabemos que $\Delta\alpha_{\pm}$, representa los cambios que sufren las α_{\pm} cuando x va desde x_1 hasta ∞ , y estos cambios se calcula mediante:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\alpha_{\pm}}{A/2} &= \frac{2}{A} \int_{x_1}^{\infty} \frac{d\alpha_{\pm}}{dx} dx = \\ &= \pm i \frac{5}{32} e^{\pm i\delta} \left[\frac{2}{3} x_1^{-\frac{3}{2}} + e^{\mp 2i\delta} \int_{x_1}^{\infty} x^{-\frac{5}{2}} \exp\left(\mp i \frac{4}{3} x^{\frac{3}{2}}\right) dx \right] \end{aligned} \quad (54)$$

El segundo término dentro del paréntesis es menos importante que el primero, esto se debe a que la exponencial compleja, oscila entre 1 y -1 y $x^{-\frac{5}{2}} < x^{-\frac{3}{2}}$. de este modo:

$$\frac{\Delta\alpha_{\pm}}{A/2} \approx \pm \frac{5}{48} i e^{\pm i\delta} x_1^{-\frac{3}{2}} \quad (55)$$

y como podemos ver el error que se introduce es realmente pequeño, esto porque igualmente la exponencial compleja oscila entre -1 y 1 , y $x_1^{-\frac{3}{2}}$ será también pequeño.

Problema 4.3

¿Porqué la ecuación diferencial que satisfacen las funciones WKB asociadas, difiere de la ecuación de Schrödinger que es satisfecha por las funciones WKB; en la inclusión de la función $s(x)$, si las funciones WKB y las asociadas WKB tienen la misma forma?

Justificación:

Recordemos que en el proceso de obtención de las soluciones WKB, nos encontramos con una ecuación diferencial tipo Riccati; para la cual propusimos una solución en forma de serie de potencias de $-i\xi$, dicha serie es $q(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (-i\xi)^n q_n(x)$. Pero recordemos también que ésta la aproximamos sólo hasta segundo orden, por lo que nuestras funciones $\psi^{\pm}(x)$ satisfacen la ecuación de Schrödinger *sólo aproximadamente*. Por otra parte se proponen las funciones WKB asociadas W_{\pm} , como funciones que tienen la misma forma que las funciones ψ^{\pm} ; y para obtener la ecuación diferencial que éstas satisfacen, simplemente las derivamos; y en consecuencia esta ecuación diferencial es satisfecha exactamente por ellas, y como vemos se introduce de manera natural la función $s(x)$; y hace su aparición para indicarnos que tanto se “*desvian*” las funciones ψ^{\pm} de la solución exacta a la ecuación de Schrödinger 1 - dimensional.

5. EL OSCILADOR ARMONICO

Solución de la ecuación de Schrödinger

El oscilador armónico es quizá el modelo más usado en la Física, y su utilidad va desde los campos de la Física clásica hasta la Electrodinámica cuántica.

De la mecánica clásica sabemos que muchos potenciales complicados, pueden ser aproximados en la vecindad de sus puntos de equilibrio por un oscilador armónico

$$V(x) \sim \frac{1}{2}V''(a)(x-a)^2 \quad (1)$$

Esto en el caso unidimensional. Para este caso tenemos que la función hamiltoniana clásica, de una partícula con masa m , oscilando con frecuencia ω , toma la siguiente forma :

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (2)$$

y el correspondiente hamiltoniano cuántico en el espacio de configuraciones es :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(-i\hbar \frac{d}{dx})^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (3)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (4)$$

Dado que el potencial es independiente del tiempo, lo que determina las eigenfunciones Ψ_n y sus correspondientes eigenvalores E_n , es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo :

$$\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n \quad (5)$$

Considerando el hamiltoniano para el oscilador armónico , se tiene que la ecuación de Schrödinger correspondiente es :

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + [\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2]\Psi = 0 \quad (6)$$

Hemos suprimido los subíndices de E y Ψ por comodidad. Definiremos ahora las siguientes cantidades:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (7)$$

$$\lambda = \frac{m\omega}{\hbar} \quad (8)$$

Con estas definiciones, nuestra ecuación de Schrödinger es:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + [k^2 - \lambda^2 x^2]\Psi = 0 \quad (9)$$

A esta última ecuación se le conoce como “ecuación diferencial de Weber”

Haremos enseguida la transformación:

$$y = \lambda x^2 \quad (10)$$

En general, en un cambio de variable, suponiendo que hacemos el cambio de la variable x a la variable y , se tiene que los operadores diferenciales toman la forma siguiente:

$$\frac{d}{dx} = \frac{dy}{dx} \frac{d}{dy} \quad (11)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left(\frac{dy}{dx} \frac{d}{dy} \right) = \frac{d^2 y}{dx^2} \frac{d}{dy} + \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 \frac{d^2}{dy^2} \quad (12)$$

Aplicando esto a la transformación propuesta obtenemos la siguiente ecuación diferencial en la variable y :

$$y \frac{d^2\Psi}{dy^2} + \frac{1}{2} \frac{d\Psi}{dy} + \left[\frac{k^2}{4\lambda} - \frac{1}{4} y \right] \Psi = 0 \quad (13)$$

o bien, definiendo:

$$\kappa = \frac{k^2}{2\lambda} = \frac{\bar{k}^2}{2m\omega} = \frac{E}{\hbar\omega} \quad (14)$$

Obtenemos entonces la ecuación:

$$y \frac{d^2 \Psi}{dy^2} + \frac{1}{2} \frac{d\Psi}{dy} + \left[\frac{\kappa}{2} - \frac{1}{4} y \right] \Psi = 0 \quad (15)$$

Pasaremos enseguida a resolver esta ecuación, haciendo primeramente el análisis asintótico en el límite $y \rightarrow \infty$, para hacer esto reescribimos la ecuación anterior como sigue :

$$\frac{d^2 \Psi}{dy^2} + \frac{1}{2y} \frac{d\Psi}{dy} + \left[\frac{\kappa}{2y} - \frac{1}{4} \right] \Psi = 0 \quad (16)$$

Observamos que , en el límite $y \rightarrow \infty$, esta ecuación se comporta así:

$$\frac{d^2 \Psi_\infty}{dy^2} - \frac{1}{4} \Psi_\infty = 0 \quad (17)$$

Esta ecuación tiene como solución:

$$\Psi_\infty(y) = A \exp \frac{y}{2} + B \exp \frac{-y}{2} \quad (18)$$

Desechamos $\exp \frac{y}{2}$ dado que ésta diverge en el límite $y \rightarrow \infty$, nos quedamos entonces con la exponencial decreciente. Podemos sugerir entonces que Ψ tiene la siguiente forma:

$$\Psi(y) = \exp \frac{-y}{2} \psi(y) \quad (19)$$

Sustituyendo esto en la ecuación diferencial para y (ec. 15) se tiene:

$$y \frac{d^2 \psi}{dy^2} + \left(\frac{1}{2} - y \right) \frac{d\psi}{dy} + \left(\frac{\kappa}{2} - \frac{1}{4} \right) \psi = 0 \quad (20)$$

Lo que hemos obtenido es la ecuación hipergeométrica confluyente ⁵ :

$$z \frac{d^2 y}{dz^2} + (c - z) \frac{dy}{dz} - ay = 0 \quad (21)$$

⁵también conocida como la ecuación diferencial de Kummer

La solución general a esta ecuación es :

$$y(z) = A {}_1F_1(a; c, z) + B z^{1-c} {}_1F_1(a - c + 1; 2 - c, z) \quad (22)$$

Con la función hipergeométrica confluyente :

$${}_1F_1(a; c, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n x^n}{(c)_n n!} \quad (23)$$

Comparando entonces nuestra ecuación , con la ecuación hipergeométrica confluyente , se observa que la solución general a nuestra ecuación es :

$$\psi(y) = A {}_1F_1(a; \frac{1}{2}, y) + B y^{\frac{1}{2}} {}_1F_1(a + \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, y) \quad (24)$$

donde

$$a = -\left(\frac{\kappa}{2} - \frac{1}{4}\right) \quad (25)$$

Si dejamos estas soluciones así como están, entonces la condición de normalización de la función de onda no se cumple, pues del comportamiento asintótico de la función hipergeométrica confluyente ⁶ se sigue que (considerando únicamente el comportamiento exponencial, dado que es el dominante) :

$$\Psi(y) = e^{-\frac{y}{2}} \psi(y) \rightarrow \text{const. } e^{\frac{y}{2}} y^{a-\frac{1}{2}} \quad (26)$$

Esto nos lleva a una divergencia en la integral de normalización, lo cual es físicamente inaceptable. Lo que se hace entonces, es imponer la condición de terminación de la serie ⁷, esto es,

⁶El comportamiento asintótico para $|x| \rightarrow \infty$ es:

$${}_1F_1(a; c, z) \rightarrow \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} e^{-ia\pi} x^{-a} + \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} e^x x^{a-c}$$

⁷La condición de truncamiento de la serie para la función hipergeométrica confluyente ${}_1F_1(a; c, z)$ es $a = -n$, con n un entero no negativo (esto es, incluye el cero).

la serie se corta y surge entonces un polinomio de grado n .

Observamos entonces que, el hecho de pedir que la integral de normalización sea finita (para tener significado físico en términos de probabilidades), nos lleva al truncamiento de la serie, y esto a su vez es lo que da lugar a la cuantización de la energía.

Consideremos enseguida los dos posibles casos :

$$1) \quad a = -n \quad \text{y} \quad B = 0$$

$$\frac{\kappa}{2} - \frac{1}{4} = n \quad (27)$$

Con las eigenfunciones:

$$\Psi_n(x) = D_n \exp \frac{-\lambda x^2}{2} {}_1F_1(-n; \frac{1}{2}, \lambda x^2) \quad (28)$$

y la energía:

$$E_n = \hbar\omega(2n + \frac{1}{2}) \quad (29)$$

$$2) \quad a + \frac{1}{2} = -n \quad \text{y} \quad A = 0$$

$$\frac{\kappa}{2} - \frac{1}{4} = n + \frac{1}{2} \quad (30)$$

Teniendo las eigenfunciones siguientes:

$$\Psi_n(x) = D_n \exp \frac{-\lambda x^2}{2} x {}_1F_1(-n; \frac{3}{2}, \lambda x^2) \quad (31)$$

y para la energía se tiene:

$$E_n = \hbar\omega[(2n + 1) + \frac{1}{2}] \quad (32)$$

Los polinomios dados anteriormente por las funciones hipergeométricas, son conocidos como polinomios de Hermite, y están definidos en términos de la función hipergeométrica como sigue :

$$H_{2n}(\eta) = (-1)^n \frac{(2n)!}{n!} {}_1F_1(-n; \frac{1}{2}, \eta^2) \quad (33)$$

$$H_{2n-1}(\eta) = (-1)^n \frac{2(2n+1)!}{n!} \eta \, {}_1F_1\left(-n; \frac{3}{2}; \eta^2\right) \quad (34)$$

Podemos finalmente combinar los resultados obtenidos (pues unos nos dan los valores pares y otros los impares) en una sola expresión para los eigenvalores y las eigenfunciones , obteniéndose :

$$\Psi_n(x) = D_n \exp \frac{-\lambda x^2}{2} H_n(\sqrt{\lambda}x) \quad (35)$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad n = 0, 1, 2 \dots \quad (36)$$

El espectro de energía del oscilador armónico es equidistante, esto es, existe la misma diferencia $\hbar\omega$ entre cualesquiera dos estados . Otra observación que podemos hacer, es acerca del mínimo valor de energía que toma el oscilador; lo sorprendente es que éste es distinto de cero; esto es un resultado puramente mecánico cuántico, a este valor se le conoce como *energía de punto cero* y el hecho de que sea distinta de cero , es una característica de todos los potenciales ligantes (aquellos que confinan a las partículas) .

La constante de normalización puede ser calculada, y tiene el valor:

$$D_n = \left(\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \frac{1}{2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (37)$$

Con lo cual obtenemos finalmente las eigenfunciones del oscilador armónico unidimensional, normalizadas :

$$\Psi_n(x) = \left(\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \frac{1}{2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}} \exp \frac{-\lambda x^2}{2} H_n(\sqrt{\lambda}x) \quad (38)$$

Operadores de creación (\hat{a}^\dagger) y aniquilación (\hat{a})

Existe otra forma de tratar el oscilador armónico de una forma distinta a la convencional de resolver la ecuación de Schrodinger, esta otra manera es llamada el método algebraico o método de operadores, éste es un poderoso método el cual es aplicado también en otra clase de problemas mecánico cuánticos.

Definiremos dos operadores no hermiteanos a y a^\dagger :

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{ip}{m\omega} \right) \quad (39)$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{ip}{m\omega} \right) \quad (40)$$

Estos operadores son conocidos como *operador de aniquilación* y *operador de creación*, respectivamente (las razones para estos nombres se verán después).

Vamos a calcular ahora el conmutador de estos dos operadores:

$$[a, a^\dagger] = \frac{m\omega}{2\hbar} \left[x + \frac{ip}{m\omega}, x - \frac{ip}{m\omega} \right] = \frac{1}{2\hbar} (-i[x, p] + i[p, x]) = 1 \quad (41)$$

Donde hemos usado el conmutador:

$$[x, p] = i\hbar \quad (42)$$

Esto es, tenemos que los operadores de creación y aniquilación satisfacen la relación de conmutación :

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (43)$$

Vamos a definir también el llamado operador de número \hat{N} como:

$$\hat{N} = a^\dagger a \quad (44)$$

Este operador es hermiteano como lo podemos demostrar fácilmente usando $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$

:

$$\hat{N}^\dagger = (a^\dagger a)^\dagger = a^\dagger (a^\dagger)^\dagger = a^\dagger a = \hat{N} \quad (45)$$

Ahora bien, considerando que :

$$a^\dagger a = \frac{m\omega}{2\hbar} \left(x^2 + \frac{p^2}{m^2\omega^2} \right) + \frac{i}{2\hbar} [x, p] = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \quad (46)$$

observamos que el hamiltoniano está dado de una manera simple en términos del operador de número :

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right) \quad (47)$$

El operador de número recibe su nombre debido a que sus eigenvalores son justo el índice de la función de onda sobre la que opera, esto es:

$$\hat{N} | n \rangle = n | n \rangle \quad (48)$$

Donde hemos usado la notación:

$$| \Psi_n \rangle = | n \rangle \quad (49)$$

Aplicando este hecho a (47) tenemos :

$$\hat{H} | n \rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) | n \rangle \quad (50)$$

Pero sabemos de la ecuación de Schrödinger que $\hat{H} | n \rangle = E | n \rangle$ de lo cual se sigue que los valores de la energía están dados por :

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (51)$$

El cual es idéntico (como debía ser) con el resultado (36).

Vamos enseguida a mostrar el porqué de los nombres que se le dan a los operadores a y a^\dagger . Para hacer esto comenzaremos calculando los conmutadores:

$$[\hat{N}, a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger [a, a] + [a^\dagger, a]a = -a \quad (52)$$

Lo anterior se sigue de $[a, a] = 0$ y (43). Similarmente calculamos:

$$[\hat{N}, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger [a, a^\dagger] + [a^\dagger, a^\dagger]a = a^\dagger \quad (53)$$

Con estos dos conmutadores podemos escribir:

$$\begin{aligned} \hat{N}(a^\dagger |n\rangle) &= ([\hat{N}, a^\dagger] + a^\dagger \hat{N}) |n\rangle \\ &= (a^\dagger + a^\dagger \hat{N}) |n\rangle \\ &= a^\dagger(1+n) |n\rangle = (n+1)a^\dagger |n\rangle \end{aligned} \quad (54)$$

Con un procedimiento similar se obtiene también:

$$\hat{N}(a |n\rangle) = ([\hat{N}, a] + a\hat{N}) |n\rangle = (n-1)a |n\rangle \quad (55)$$

La expresión (54) implica que el ket $a^\dagger |n\rangle$ es un eigenket del operador de número, donde el eigenvalor se ha incrementado por uno, esto es, se ha creado un cuanto de energía al actuar a^\dagger sobre el ket, de ahí su nombre de operador de creación. Comentarios siguiendo la misma línea de razonamiento son válidos para el operador a , lo cual le da el nombre de operador de aniquilación (un cuanto de energía es disminuido al actuar este operador).

La ecuación (54) también implica que el ket $a^\dagger |n\rangle$ y el ket $|n+1\rangle$ son proporcionales, podemos escribir esta relación así:

$$a^\dagger |n\rangle = c |n+1\rangle \quad (56)$$

Donde c es una constante que hay que determinar. Considerando además que :

$$(a^\dagger | n \rangle)^\dagger = \langle n | a = c^* \langle n + 1 | \quad (57)$$

Podemos entonces realizar el siguiente cálculo:

$$\langle n | a(a^\dagger | n \rangle) = c^* \langle n + 1 | (c | n + 1 \rangle) \quad (58)$$

$$\langle n | aa^\dagger | n \rangle = c^* c \langle n + 1 | n + 1 \rangle \quad (59)$$

$$\langle n | aa^\dagger | n \rangle = |c|^2 \quad (60)$$

Pero de la relación de conmutación para los operadores a y a^\dagger :

$$[a, a^\dagger] = aa^\dagger - a^\dagger a = aa^\dagger - \hat{N} = 1 \quad (61)$$

Esto es :

$$aa^\dagger = \hat{N} + 1 \quad (62)$$

Sustituyendo en (60):

$$\langle n | \hat{N} + 1 | n \rangle = \langle n | n \rangle + \langle n | \hat{N} | n \rangle = n + 1 = |c|^2 \quad (63)$$

Pidiendo que c sea real y positiva (por convención), obtenemos su valor:

$$c = \sqrt{n + 1} \quad (64)$$

Con lo cual se tiene la relación:

$$a^\dagger | n \rangle = \sqrt{n + 1} | n + 1 \rangle \quad (65)$$

Siguiendo el mismo camino se llega a una relación para el operador de aniquilación :

$$a | n \rangle = \sqrt{n} | n - 1 \rangle \quad (66)$$

Vamos ahora a mostrar que los valores de n deben ser enteros no negativos. Para esto, acudiremos al requerimiento de positividad de la norma, aplicado en especial al vector de estado $a | n \rangle$. Este requerimiento nos dice que el producto interior de éste vector con su adjunto $(a | n \rangle)^\dagger = \langle n | a^\dagger$ debe ser mayor o igual que cero :

$$(\langle n | a^\dagger) \cdot (a | n \rangle) \geq 0 \quad (67)$$

Pero lo anterior no es mas que :

$$\langle n | a^\dagger a | n \rangle = \langle n | \hat{N} | n \rangle = n \geq 0 \quad (68)$$

Por lo tanto n nunca puede ser negativo. Y tiene que ser entero pues si no lo fuera al aplicar en repetidas ocasiones el operador de aniquilación nos llevaría a valores negativos de n , lo cual está en contraposición con lo anterior.

Es posible expresar el estado n ($| n \rangle$) en términos del estado base ($| 0 \rangle$) usando el operador de creación, veamos como hacerlo:

$$| 1 \rangle = a^\dagger | 0 \rangle \quad (69)$$

$$| 2 \rangle = \left[\frac{a^\dagger}{\sqrt{2}} \right] | 1 \rangle = \left[\frac{(a^\dagger)^2}{\sqrt{2!}} \right] | 0 \rangle \quad (70)$$

$$| 3 \rangle = \left[\frac{a^\dagger}{\sqrt{3}} \right] | 2 \rangle = \left[\frac{(a^\dagger)^3}{\sqrt{3!}} \right] | 0 \rangle \quad (71)$$

⋮

$$|n\rangle = \left[\frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} \right] |0\rangle \quad (72)$$

Podemos también aplicar éste método para encontrar las eigenfunciones en el espacio de configuraciones. Para hacer esto, partiremos del estado base:

$$a |0\rangle = 0 \quad (73)$$

En la representación x tenemos:

$$\hat{a}\Psi_0(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{i\hbar p}{m\omega} \right) \Psi_0(x) = 0 \quad (74)$$

Recordando la forma que toma el operador momento en la representación x , podemos llegar a una ecuación diferencial para la función de onda del estado base; introduciremos también la definición siguiente $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, con esto :

$$\left(x + x_0^2 \frac{d}{dx} \right) \Psi_0 = 0 \quad (75)$$

Esta ecuación se puede resolver fácilmente, resolviéndola y normalizándola (su integral de $-\infty$ a ∞ debe ser la unidad), llegamos a la función de onda del estado base:

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}x_0}} \right) e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2} \quad (76)$$

Las demás eigenfunciones, esto es, las eigenfunciones para los estados excitados del oscilador armónico, se pueden obtener usando el operador de creación, el procedimiento es el siguiente:

$$\Psi_1 = a^\dagger \Psi_0 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}x_0} \right) \left(x - x_0^2 \frac{d}{dx} \right) \Psi_0 \quad (77)$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger)^2 \Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2!}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}x_0} \right)^2 \left(x - x_0^2 \frac{d}{dx} \right)^2 \Psi_0 \quad (78)$$

Siguiendo con este procedimiento, por inducción se puede mostrar que:

$$\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n!}} \frac{1}{x_0^{n+\frac{1}{2}}} \left(x - x_0^2 \frac{d}{dx}\right)^n e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} \quad (79)$$

Evolución temporal del oscilador

En esta sección vamos a ilustrar con el oscilador armónico una manera en la cual se trabaja con la representación de Heisenberg, esto es, dejaremos que los estados estén fijos en el tiempo y haremos evolucionar a los operadores en él. Veremos a los operadores como funciones del tiempo, específicamente, encontraremos como es que evolucionan los operadores posición, momento, a y a^\dagger en el tiempo, para el caso del oscilador armónico. Las ecuaciones de movimiento de Heisenberg para p y x son :

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = -\frac{\partial}{\partial \hat{x}} V(\hat{x}) \quad (80)$$

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{\hat{p}}{m} \quad (81)$$

De aquí se sigue que las ecuaciones de movimiento para x y p en el caso del oscilador armónico son:

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = -m\omega^2 \hat{x} \quad (82)$$

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{\hat{p}}{m} \quad (83)$$

Se tiene un par de ecuaciones acopladas, estas son equivalentes a un par de ecuaciones para los operadores de creación y aniquilación, salvo que estas dos últimas no están acopladas,

veámoslas explícitamente :

$$\frac{da}{dt} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \frac{d}{dt} \left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) \quad (84)$$

$$\frac{da}{dt} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\frac{d\hat{x}}{dt} + \frac{i}{m\omega} \frac{d\hat{p}}{dt} \right) \quad (85)$$

Sustituyendo (82) y (83) en (85) :

$$\frac{da}{dt} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\frac{\hat{p}}{m} - i\omega\hat{x} \right) = -i\omega a \quad (86)$$

Similarmente se puede obtener una ecuación diferencial para el operador de creación, la cual no está acoplada:

$$\frac{da^\dagger}{dt} = i\omega a^\dagger \quad (87)$$

Las ecuaciones diferenciales que hemos encontrado para la evolución temporal de los operadores de creación y aniquilación , pueden ser integradas inmediatamente, dándonos la evolución explícita de estos operadores en el tiempo :

$$a(t) = a(0)e^{-i\omega t} \quad (88)$$

$$a^\dagger(t) = a^\dagger(0)e^{i\omega t} \quad (89)$$

Podemos observar de estos resultados y de las ecuaciones (44) y (47) , que tanto el hamiltoniano como el operador de número , no dependen del tiempo, tal y como podríamos esperar.

Con los dos resultados anteriores , podemos encontrar los operadores de posición y momento como función del tiempo, pues ellos están dados en términos de los operadores de creación y aniquilación:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger) \quad (90)$$

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (a^\dagger - a) \quad (91)$$

Sustituyendo los operadores de creación y aniquilación se obtiene:

$$\hat{x}(t) = \hat{x}(0) \cos \omega t + \frac{\hat{p}(0)}{m\omega} \sin \omega t \quad (92)$$

$$\hat{p}(t) = -m\omega \hat{x}(0) \sin \omega t + \hat{p}(0) \cos \omega t \quad (93)$$

La evolución temporal de los operadores de posición y momento es la misma que las ecuaciones clásicas de movimiento.

Hemos finalizado esta sección, mostrando la forma explícita en que evolucionan cuatro operadores en el caso del oscilador armónico, reflejando de esta manera una forma de trabajar en la poco mencionada representación de Heisenberg.

El oscilador armónico tridimensional

Al iniciar nuestro estudio cuántico del oscilador armónico, hacíamos comentarios acerca del porqué la importancia del oscilador armónico. Si hiciéramos un análogo tridimensional, consideraríamos entonces un desarrollo de Taylor en tres variables⁸ reteniendo términos solo hasta segundo orden, lo que tenemos es una forma cuadrática (en el caso más general), el problema de resolver para esta aproximación no es sencillo, es decir, para el caso :

$$V(x, y, z) = ax^2 + by^2 + cz^2 + dxy + exz + fyz \quad (94)$$

⁸Es posible expresar el desarrollo de Taylor como un operador exponencial como sigue:

$$e^{[(x-x_o)+(y-y_o)+(z-z_o)](\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z})} f(\mathbf{r}_o)$$

Esto es el desarrollo de Taylor en tres variables alrededor de \mathbf{r}_o .

Afortunadamente hay varios sistemas que se ajustan bien a la simetría esférica, esto es, para el caso:

$$V(x, y, z) = K(x^2 + y^2 + z^2) \quad (95)$$

Esto último, equivale a decir que las parciales segundas (no cruzadas) toman todas el mismo valor (en el caso anterior representado por K), y podríamos agregar que esta es una buena aproximación en el caso en que los valores de las parciales cruzadas sean pequeñas comparadas con las parciales segundas no cruzadas.

Cuando se satisfacen los requerimientos anteriores, y tenemos un potencial como el dado por (95), entonces tenemos el denominado *oscilador armónico tridimensional esféricamente simétrico*.

El hamiltoniano para este caso es de la forma:

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{m\omega^2}{2} r^2 \quad (96)$$

Donde el laplaciano está dado en coordenadas esféricas y r es la variable esférica convencional. Tenemos entonces que el potencial es independiente del tiempo, por tanto la energía se va a conservar; además dada la simetría esférica , el momento angular se conservará también, se tienen por tanto dos cantidades conservadas, y puesto que a cada cantidad conservada le corresponde un número cuántico, podemos adelantar que nuestra funciones de onda dependerán de dos números cuánticos (aunque en este caso, como veremos surge otro). Esto es , necesitamos solucionar la ecuación :

$$\hat{H}\Psi_{nl} = E_{nl}\Psi_{nl} \quad (97)$$

El laplaciano en coordenadas esféricas es :

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \quad (98)$$

Esto se sigue del hecho que :

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (99)$$

Las eigenfunciones de \hat{L}^2 son los armónicos esféricos, se tiene:

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = -\hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (100)$$

Podemos observar que el hecho de que los armónicos esféricos lleven el número cuántico m , produce la intrusión del mismo en la función de onda, es decir tendremos Ψ_{nlm} .

Para separar la ecuación diferencial se propone la sustitución:

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \frac{R_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (101)$$

Esto al sustituirlo en la ecuación de Schrödinger, nos va a separar la parte espacial de la parte angular; la parte angular, son las eigenfunciones del operador momento angular (al cuadrado), en la parte espacial llegamos a la ecuación :

$$R_{nl}'' + \left(\frac{2mE_{nl}}{\hbar^2} - \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{nl}(r) = 0 \quad (102)$$

Usando las definiciones (7) y (8), la ecuación anterior toma exactamente la misma forma que (9), excepto por el término del momento angular, éste término usualmente es llamado *la barrera*

de momento angular.

$$R_{nl}'' + (k^2 - \lambda^2 r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2})R_{nl} = 0 \quad (103)$$

Para resolver esta ecuación , partiremos del análisis asintótico de la misma. Si consideramos primero el $\lim r \rightarrow \infty$, observamos que el término del momento angular es despreciable, de manera que el comportamiento asintótico en este límite es idéntico a (9) con lo cual obtenemos:

$$R_{nl}(r) \sim \exp \frac{-\lambda r^2}{2} \quad \text{en } \lim r \rightarrow \infty \quad (104)$$

Si observamos ahora el comportamiento cerca de cero, vemos que el comportamiento dominante está dado por el término de momento angular, es decir, la ecuación diferencial (102) se convierte en este límite en :

$$R_{nl}'' - \frac{l(l+1)}{r^2}R_{nl} = 0 \quad (105)$$

Esta es una ecuación diferencial tipo Euler ⁹ , solucionándola encontramos dos soluciones independientes:

$$R_{nl}(r) \sim r^{l+1} \text{ o } r^{-l} \quad \text{en } \lim r \rightarrow 0 \quad (106)$$

Lo anterior nos lleva a proponer la sustitución :

$$R_{nl}(r) = r^{l+1} \exp \frac{-\lambda r^2}{2} \phi(r) \quad (107)$$

⁹Una ecuación tipo Euler es :

$$x^n y^{(n)}(x) + x^{n-1} y^{(n-1)}(x) + \dots + xy'(x) + y(x) = 0$$

La cual tiene soluciones del tipo x^α , se sustituye y se encuentra un polinomio para α .

Podríamos hacer también la sustitución:

$$R_{nl}(r) = r^{-l} \exp \frac{-\lambda r^2}{2} v(r) \quad (108)$$

Sin embargo esto lleva a las mismas soluciones que (107) (mostrar esto es un buen ejercicio).

Sustituyendo (107) en (103), se obtiene una ecuación diferencial para ϕ :

$$\phi'' + 2\left(\frac{l+1}{r} - \lambda r\right)\phi' - [\lambda(2l+3) - k^2]\phi = 0 \quad (109)$$

Haciendo ahora la sustitución de la variable $w = \lambda r^2$, obtenemos:

$$w\phi'' + \left(l + \frac{3}{2} - w\right)\phi' - \left[\frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2}\right) - \frac{\kappa}{2}\right]\phi = 0 \quad (110)$$

Donde hemos introducido $\kappa = \frac{k^2}{2\lambda} = \frac{E}{\hbar\omega}$. Tenemos nuevamente una ecuación diferencial tipo hipergeométrica confluyente la cual tiene por soluciones (véase (21) y (22)):

$$\phi(r) = A {}_1F_1\left[\frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2} - \kappa\right); l + \frac{3}{2}, \lambda r^2\right] + B r^{-(2l+1)} {}_1F_1\left[\frac{1}{2}\left(-l + \frac{1}{2} - \kappa\right); -l + \frac{1}{2}, \lambda r^2\right] \quad (111)$$

La segunda solución particular no puede ser normalizada, pues diverge fuertemente en cero, de manera que tomamos $B = 0$ y se tiene:

$$\phi(r) = A {}_1F_1\left[\frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2} - \kappa\right); l + \frac{3}{2}, \lambda r^2\right] \quad (112)$$

Empleando los mismos argumentos que para el oscilador unidimensional, es decir, pedimos que las soluciones sean regulares en el infinito, nos lleva a la condición de truncamiento de la serie, lo cual nos lleva nuevamente a la cuantización de la energía; imponiendo la condición de truncamiento:

$$\frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2} - \kappa\right) = -n \quad (113)$$

Esto es , poniendo explícitamente κ , obtenemos el espectro de energía :

$$E_{nl} = \hbar\omega(2n + l + \frac{3}{2}) \quad (114)$$

Podemos observar que se tiene una energía de punto cero igual a $\frac{3}{2}\hbar\omega$ para el oscilador armónico tridimensional esféricamente simétrico.

Las eigenfunciones son (no normalizadas):

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = r^l e^{-\frac{\lambda r^2}{2}} {}_1F_1(-n; l + \frac{3}{2}, \lambda r^2) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (115)$$

Problema 5.1

Encuentre los eigenvalores y eigenfunciones del oscilador armónico en el espacio de momentos

El hamiltoniano mecánico cuántico para el oscilador armónico está dado por:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

Ahora bien , en el espacio de momentos, los operadores \hat{x} y \hat{p} toman la siguiente forma :

$$\hat{p} \rightarrow p$$

$$\hat{x} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$$

Por tanto el hamiltoniano mecánico cuántico para el oscilador armónico en el espacio de los momentos es :

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2 \frac{d^2}{dp^2}$$

Tenemos entonces que resolver el problema de eigenvalores (esto es , encontrar las eigenfunciones y los eigenvalores) dado por (5) , lo cual nos lleva, con el hamiltoniano anterior, a la siguiente ecuación diferencial :

$$\frac{d^2\Psi(p)}{dp^2} + \left(\frac{2E}{m\hbar^2\omega^2} - \frac{p^2}{m^2\hbar^2\omega^2}\right)\Psi(p) = 0 \quad (116)$$

Se puede observar que la ecuación diferencial obtenida, es idéntica, salvo constantes, con la ecuación diferencial que obtuvimos en el espacio de configuraciones (ec. (6)). Solo que para ejemplificar otra forma de resolverla, no seguiremos exact amente el mismo camino que se siguió

para obtener la solución de aquella.

Definiremos dos parámetros, de manera similar a como hicimos en (7) y (8):

$$k^2 = \frac{2E}{m\hbar^2\omega^2} \quad \lambda = \frac{1}{m\hbar\omega} \quad (117)$$

Con estas definiciones, arribamos exactamente a la ecuación diferencial (9), se sigue por tanto que la solución buscada (después de realizar el análisis asintótico) es de la forma:

$$\Psi(y) = e^{-\frac{1}{2}y}\phi(y) \quad (118)$$

Donde y está dada por $y = \lambda p^2$ y λ definida en (117). Sustituiremos entonces (118) en (116)

, solo que regresando (118) a la variable p . Haciendo esta sustitución se obtiene una ecuación diferencial para ϕ :

$$\frac{d^2\phi(p)}{dp^2} - 2\lambda p \frac{d\phi(p)}{dp} + (k^2 - \lambda)\phi(p) = 0 \quad (119)$$

Haremos finalmente el cambio de variable $u = \sqrt{\lambda}p$, la ecuación anterior se transforma en la ecuación diferencial de Hermite:

$$\frac{d^2\phi(u)}{du^2} - 2u \frac{d\phi(u)}{du} + 2n\phi(u) = 0 \quad (120)$$

Con n un entero no negativo, y donde hemos hecho:

$$\frac{k^2}{\lambda} - 1 = 2n$$

De aquí y de las definiciones dadas en (117) se sigue que los eigenvalores de la energía están dados por:

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

Y las soluciones a (120) están dadas por los polinomios de Hermite, de manera que $\phi(u) = H_n(u)$

, con lo cual se tiene que las eigenfunciones (no normalizadas) están dadas por :

$$\Psi(p) = Ae^{-\frac{\lambda}{2}p^2} H_n(\sqrt{\lambda}p)$$

Problema 5.2

Demuestre que los polinomios de Hermite pueden ser expresados con la siguiente representación integral:

$$H_n(x) = \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (x + iy)^n e^{-y^2} dy \quad (121)$$

La representación anterior de los polinomios de Hermite es una poco usual, pero que es muy útil en ciertos casos. Lo que vamos a hacer para demostrar la igualdad , es desarrollar la integral que se presenta y mostrar que lo obtenido es idéntico con la representación en serie de los polinomios de Hermite, la cual está dada por :

$$\sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \frac{(-1)^k n!}{(n-2k)! k!} (2x)^{n-2k} \quad (122)$$

Donde el símbolo $[c]$ significa, el mayor entero menor o igual que c .

Lo primero que haremos es desarrollar el binomio que está dentro de la integral usando el teorema del binomio:

$$(x + y)^n = \sum_{m=0}^n \frac{n!}{(n-m)! m!} x^{n-m} y^m$$

Usando esto , el binomio dentro de la integral, tiene el desarrollo siguiente:

$$(x + iy)^n = \sum_{m=0}^n \frac{n!}{(n-m)! m!} i^m x^{n-m} y^m \quad (123)$$

Sustituyendo esto en la integral:

$$\frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \sum_{m=0}^n \frac{n!}{(n-m)!m!} i^m x^{n-m} \int_{-\infty}^{\infty} y^m e^{-y^2} dy \quad (124)$$

De la forma del integrando podemos ver que la integral es distinta de cero cuando m es par, pues de lo contrario el integrando sería impar y la integral se anula. Haremos por tanto el cambio $m = 2k$; con este cambio se tiene:

$$\frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \frac{n!}{(n-2k)!(2k)!} i^{2k} x^{n-2k} 2 \int_0^{\infty} y^{2k} e^{-y^2} dy \quad (125)$$

Con el cambio de variable $u = y^2$ la integral se convierte en una gama, haciendo el cambio de variable :

$$\frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \frac{n!}{(n-2k)!(2k)!} i^{2k} x^{n-2k} \int_0^{\infty} u^{k-\frac{1}{2}} e^{-u} du \quad (126)$$

La integral es precisamente $\Gamma(k + \frac{1}{2})$, la cual puede ser expresada en forma de factoriales (para k entero, desde luego) :

$$\Gamma(k + \frac{1}{2}) = \frac{(2k)!}{2^{2k} k!} \sqrt{\pi}$$

Sustituyendo este valor en la sumatoria y usando el hecho de que $i^{2k} = (-1)^k$

$$\sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \frac{(-1)^k n!}{(n-2k)!k!} (2x)^{n-2k} \quad (127)$$

El cual es idéntico con (122), con lo cual se completa la demostración.

Problema 5.3

Muestre que los eigenestados del oscilador armónico satisfacen la relación de incertidumbre

Debemos mostrar que para cualesquier eigenestado Ψ_n se satisface:

$$\langle (\Delta p)^2 (\Delta x)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (128)$$

Donde la notación $\langle \rangle$, significa promedio.

Vamos a calcular por separado $\langle (\Delta p)^2 \rangle$ y $\langle (\Delta x)^2 \rangle$, donde cada una de estas expresiones es

:

$$\langle (\Delta p)^2 \rangle = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \langle p^2 - 2p \langle p \rangle + \langle p \rangle^2 \rangle = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$$

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 - 2x \langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

Vamos primeramente a mostrar que tanto el promedio de x , como el de p se anulan. Consideremos primeramente el promedio de x :

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x [\Psi_n(x)]^2 dx$$

Esta integral se anula pues $[\Psi_n(x)]^2$ es una función par, esto se puede ver considerando que la paridad está dada por la parte polinomial (pues la exponencial involucrada es una función par). Los polinomios de Hermite tienen paridad definida, y se tienen solo dos casos, n es par o es impar. Si n es par se sigue de inmediato que $[\Psi_n(x)]^2$ lo es. Si n es impar entonces tenemos que $H_n(-x) = (-1)^n H_n(x)$, e inmediatamente se ve que esta función al cuadrado es par también (esto es, cualquier polinomio par o impar, elevado al cuadrado es par). Hemos mostrado que $[\Psi_n(x)]^2$ es una función par para n cualquiera, por tanto al multiplicarla por x se vuelve impar, de manera que la integral se anula. Tenemos entonces como resultado:

$$\langle x \rangle = 0 \quad (129)$$

Los mismos argumentos son válidos para el promedio de p , si calculamos éste en el espacio de momentos con las funciones encontradas en el problema 1, pues la forma funcional es la misma. De manera que :

$$\langle p \rangle = 0 \quad (130)$$

Calculemos ahora el promedio de x^2 . Para hacer esto usaremos el teorema del virial ¹⁰. Observemos primeramente que :

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 \langle x^2 \rangle$$

De manera que es posible relacionar el promedio de x^2 con el promedio del potencial (y poder usar el teorema del virial).

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{m \omega^2} \langle V \rangle \quad (131)$$

Necesitamos considerar también el promedio de la energía :

$$\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$$

Usando el teorema del virial (para $n = 2$) se obtiene:

$$\langle H \rangle = 2 \langle V \rangle \quad (132)$$

Con lo cual se obtiene:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\langle H \rangle}{m \omega^2} = \frac{\hbar \omega (n + \frac{1}{2})}{m \omega^2} \quad (133)$$

¹⁰El teorema del virial en mecánica cuántica nos dice que:

$$2 \langle T \rangle = \langle \mathbf{r} \cdot \nabla V(\mathbf{r}) \rangle$$

Para un potencial de la forma $V = \lambda x^n$ se satisface:

$$2 \langle T \rangle = n \langle V \rangle$$

Donde T representa la energía cinética y V la energía potencial.

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (134)$$

De forma similar calculamos el promedio de p^2 , explícitamente:

$$\langle p^2 \rangle = 2m \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = 2m \langle T \rangle = m \langle H \rangle = m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (135)$$

Con (133) y (135) se tiene:

$$\langle (\Delta p)^2 (\Delta x)^2 \rangle = \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \hbar^2 \quad (136)$$

De este resultado inmediatamente se puede ver que los eigenestados satisfacen la relación de incertidumbre, con el mínimo valor precisamente para el estado base ($n = 0$).

Problema 5.4

Obténganse los elementos de matriz de los operadores a , a^\dagger , \hat{x} y \hat{p}

Encontraremos primero los elementos de matriz de los operadores de creación y aniquilación, ya que estos nos ayudaran a encontrar los elementos de matriz para los otros dos operadores.

Usaremos las relaciones (65) y (66), con las cuales se tiene:

$$\langle m | a | n \rangle = \sqrt{n} \langle m | n - 1 \rangle = \sqrt{n} \delta_{m, n-1} \quad (137)$$

Similarmente para el operador de creación se tiene:

$$\langle m | a^\dagger | n \rangle = \sqrt{n+1} \langle m | n + 1 \rangle = \sqrt{\delta_{m, n+1}} \quad (138)$$

Pasaremos enseguida a calcular los elementos de matriz del operador de posición. Para hacer esto, expresaremos el operador de posición en términos de los operadores de creación y

aniquilación. Usando las definiciones (39) y (40) , se comprueba inmediatamente que el operador de posición está dado por :

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger) \quad (139)$$

Usando esto, los elementos de matriz de el operador \hat{x} pueden ser inmediatamente calculados:

$$\begin{aligned} \langle m | \hat{x} | n \rangle &= \langle m | \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger) | n \rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}] \end{aligned} \quad (140)$$

Siguiendo el mismo procedimiento podemos calcular los elementos de matriz del operador momento, considerando que \hat{p} está dado en términos de los operadores de creación y aniquilación ,de la forma que a continuación se muestra:

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(a^\dagger - a) \quad (141)$$

Usando esto se tiene:

$$\langle m | \hat{p} | n \rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}[\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} - \sqrt{n}\delta_{m,n-1}] \quad (142)$$

Hemos encontrado entonces , los elementos de matriz de los cuatro operadores y se puede observar la sencillez con la cual son calculados los mismos para los operadores de posición y momento con la ayuda de los operadores de creación y aniquilación. Finalmente podemos hacer la observación acerca de la no diagonalidad de los elementos de matriz que hemos encontrado, lo cual era de esperarse por el hecho de que la representación que estamos usando es la del operador de número, y ninguno de los cuatro operadores conmuta con él.

Problema 5.5

Encuéntrense los valores esperados de \hat{x}^2 y \hat{p}^2 para el oscilador armónico unidimensional y úsense estos para encontrar los valores esperados de la energía cinética y la energía potencial. Compárese este último resultado con el teorema del virial

Se encontrará primeramente el valor esperado de \hat{x}^2 . Para hacerlo recurriremos a la expresión (139), de la cual se sigue :

$$\hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(a^2 + (a^\dagger)^2 + a^\dagger a + aa^\dagger) \quad (143)$$

Recuérdese que los operadores de creación y aniquilación no conmutan entre sí. Con lo anterior podemos calcular el valor esperado de \hat{x}^2 :

$$\begin{aligned} \langle \hat{x}^2 \rangle &= \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} [\sqrt{n(n-1)}\delta_{n,n-2} + \sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{n,n+2} \\ &\quad + n \delta_{n,n} + (n+1) \delta_{n,n}] \end{aligned} \quad (144)$$

Esto es, el valor esperado de \hat{x}^2 está dado por :

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1) \quad (145)$$

Para calcular el valor esperado de \hat{p}^2 solo necesitamos expresar este operador en términos de los operadores de creación y aniquilación, lo cual lo podemos realizar a partir de (141), obteniéndose:

$$\hat{p}^2 = -\frac{m\hbar\omega}{2}(a^2 + (a^\dagger)^2 - aa^\dagger - a^\dagger a) \quad (146)$$

Para el valor esperado del cuadrado del momento se obtiene:

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \langle n | \hat{p}^2 | n \rangle = \frac{m\hbar\omega}{2}(2n+1) \quad (147)$$

Con este último resultado podemos encontrar el valor esperado de la energía cinética :

$$\langle \hat{T} \rangle = \langle \frac{\hat{p}^2}{2m} \rangle = \frac{1}{2m} \langle \hat{p}^2 \rangle \quad (148)$$

Usando el (147) , se obtiene el valor esperado de la energía cinética:

$$\langle \hat{T} \rangle = \langle n | \hat{T} | n \rangle = \frac{\hbar\omega}{4}(2n + 1) \quad (149)$$

Nos falta obtener ahora el valor esperado de la energía potencial:

$$\langle \hat{V} \rangle = \langle \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \rangle = \frac{1}{2}m\omega^2 \langle \hat{x}^2 \rangle \quad (150)$$

Con el resultado de (145) , inmediatamente se sigue el valor esperado para la energía potencial :

$$\langle \hat{V} \rangle = \langle n | \hat{V} | n \rangle = \frac{\hbar\omega}{4}(2n + 1) \quad (151)$$

Observamos que los valores esperados de la energía cinética y la energía potencial coinciden para toda n , esto es , para cualquier estado de energía , lo cual está en correspondencia con el teorema del virial el cual establece que para un potencial cuadrático , como el del oscilador armónico , los valores esperados de la energía cinética y la energía potencial deben coincidir, y mas aun estos deben ser iguales a un medio del valor esperado de la energía total del sistema, lo cual efectivamente se satisface.

Problema 5.6

Una partícula cargada (carga q) se mueve en la dirección z , en la presencia de un campo magnético uniforme en la misma dirección ($\vec{B} = B\hat{k}$). Comparando el hamiltoniano para este sistema con el del oscilador armónico unidimensional , muestre

que los eigenvalores de la energía pueden ser inmediatamente escritos:

$$E_{kn} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{|qB| \hbar}{mc} \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

donde $\hbar k$ es el eigenvalor continuo del operador p_z y n un entero no negativo.

El hamiltoniano para una partícula de carga eléctrica q , la cual se mueve en presencia de un campo electromagnético está dado por :

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q\vec{A}}{c}\right)^2 + q\phi \quad (152)$$

Donde \vec{A} , es el potencial vectorial que genera el campo magnético y ϕ es el potencial escalar que genera el campo eléctrico.

En nuestro problema no tenemos campos eléctricos presentes, de manera que el potencial escalar ϕ es igual a cero. Nuestro hamiltoniano toma entonces la forma :

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{q}{2mc} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + \frac{1}{2m} \left(\frac{q}{c}\right)^2 \mathbf{A}^2 \quad (153)$$

Esto dado que el potencial vectorial y el momento no conmutan, pues el potencial vectorial es función de las coordenadas.

Dado que la partícula se desplaza solo en la dirección z , solo tenemos momento lineal asociado a esta coordenada, esto es :

$$\vec{p} = (0, 0, p_z) \quad (154)$$

Y por otro lado, el potencial vectorial \vec{A} que genera el campo magnético en la dirección z es :

$$\vec{A} = (-By, 0, 0) \quad (155)$$

Esto último se puede comprobar sabiendo que $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$.

Bajo estas circunstancias , el segundo término del hamiltoniano en (153) se anula, de manera que el hamiltoniano a considerar es :

$$H = \frac{p_z^2}{2m} + \frac{q^2 B^2}{2mc^2} y^2 \quad (156)$$

Observamos que el hamiltoniano es la suma de una parte de partícula libre y otra de oscilador armónico , identificando $\omega = \frac{|Bq|}{mc}$ podemos escribir la energía asociada a cada contribución inmediatamente, con lo cual se obtiene:

$$E_{kn} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{|qB| \hbar}{mc} \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (157)$$

Obteniendo así el resultado buscado.

6. EL ÁTOMO DE HIDROGENO

Se estudia el átomo de hidrógeno resolviendo la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con un potencial debido a dos partículas cargadas como lo son el electrón y el protón, con el Laplaciano en coordenadas esféricas, mediante separación de variables, dando una interpretación física de la función de onda como una solución de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno, además de las interpretaciones de los números cuánticos y de las densidades de probabilidad.

INTRODUCCIÓN A LA MECÁNICA CUÁNTICA

Como nuestro interés es el de describir el átomo de hidrógeno, el cual está a una escala muy pequeña, se hará mediante el uso de la mecánica cuántica, la cual trata las relaciones entre magnitudes observables, pero el principio de incertidumbre altera radicalmente la definición de “magnitud observable” en el campo atómico. De acuerdo con el principio de incertidumbre, la posición y el momento de una partícula no se pueden medir simultáneamente con precisión. Las cantidades cuyas relaciones busca la mecánica cuántica son probabilidades. En vez de afirmar, por ejemplo, que el radio de la órbita del electrón en un estado fundamental del átomo de hidrógeno es siempre exactamente 5.3×10^{-11} m, la mecánica cuántica afirma que éste es el radio más probable; si realizamos un experimento adecuado, la mayor parte de las pruebas darán un valor distinto, más grande o más pequeño, pero el valor más probable será aproximadamente 5.3×10^{-11} m.

ECUACIÓN DE ONDA

Como ya se sabe, la cantidad con que está relacionada la mecánica cuántica es la función de onda Ψ de una partícula. Aunque Ψ no tiene interpretación física, el cuadrado de su valor absoluto $|\Psi|^2$ calculado para un punto y en un instante determinado es proporcional a la cantidad de encontrar experimentalmente a la partícula ahí y en ese instante. El problema de la mecánica cuántica es determinar Ψ para una partícula cuando su libertad de movimiento está limitada por la acción de fuerzas externas.

Antes de considerar el calculo real de Ψ , debemos establecer algunos requisitos que siempre se deben cumplir. En primer lugar, ya que $|\Psi|^2$ es proporcional a la probabilidad P de encontrar a la partícula descrita por Ψ , la integral de $|\Psi|^2$ sobre todo el espacio debe ser finita, ya que la partícula está en alguna parte. Si tenemos que

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dV = 0 \quad (1)$$

la partícula no existe y la integral evidentemente no puede ser ∞ y tener cierto significado; $|\Psi|^2$ no puede ser negativa o compleja a causa del camino seguido para definirla, y así la única posibilidad dada es que su integral sea una cantidad finita para que Ψ describa apropiadamente una partícula real. Generalmente es conveniente tener $|\Psi|^2$ igual a la probabilidad P de encontrar la partícula descrita por Ψ , en lugar de ser simplemente proporcional a P. Para que $|\Psi|^2$ sea igual a P se tiene que cumplir la relación

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dV = 1 \quad (2)$$

ya que

$$\int_{-\infty}^{\infty} P dV = 1 \quad (3)$$

es la afirmación matemática de que la partícula existe en algún lugar en todo momento. Una función que obedezca a la ec. 2 se dice que esta normalizada. Además de ser normalizable, Ψ debe tener un solo valor, ya que P debe tener un valor único en un tiempo y en un lugar determinados. Otra condición que Ψ debe obedecer es que ella y sus derivadas parciales $\frac{\partial \Psi}{\partial x}$, $\frac{\partial \Psi}{\partial y}$, $\frac{\partial \Psi}{\partial z}$ sean continuas en cualquier lugar.

La ecuación de Schrödinger, que es la ecuación fundamental de la mecánica cuántica, en el mismo sentido que la segunda ley del movimiento es la ecuación fundamental de la mecánica newtoniana, es una ecuación de onda en la variable Ψ . Antes de abordar la ecuación de Schrödinger repasemos la ecuación de onda general

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} \quad (4)$$

que gobierna a una onda cuya cantidad variable es y que se propaga en la dirección de x con la velocidad v . En el caso de una onda en una cuerda tensa, y es el desplazamiento de la cuerda medido desde el eje x ; en el caso de una onda sonora, y es la diferencia de presión; en el caso de una onda luminosa y es la magnitud del campo eléctrico o la del campo magnético.

Las soluciones de la ecuación de onda pueden ser de varios tipos, como consecuencia de la variedad de ondas que puede haber (un pulso único en desplazamiento, un tren de ondas de amplitud y longitud de onda constantes, un tren de ondas superpuestas de amplitudes y longitudes de onda idénticas, un tren de ondas superpuestas de amplitudes y longitudes de onda diferentes, una onda estacionaria en una cuerda fija por ambos extremos, etc.). Todas las soluciones deben ser de la forma

$$y(x, t) = F\left(t \pm \frac{x}{v}\right) \quad (5)$$

donde F es cualquier función que pueda ser diferenciada. Las soluciones $F(t - x/v)$ representan ondas que viajan en el sentido $+x$, y las soluciones $F(t + x/v)$ representan ondas que viajan en el sentido $-x$. Aquí nos interesa el equivalente ondulatorio de una partícula “libre”, es decir, una partícula que no esté bajo la influencia de ninguna fuerza y que, por lo tanto, viaja en una trayectoria recta a velocidad constante. Este equivalente corresponde a la solución general de la ec. 4 para ondas armónicas no amortiguadas (es decir, de amplitud constante A), monocromáticas (de frecuencia angular ω constante) en la dirección $+x$,

$$y(x, t) = Ae^{-i\omega(t-x/v)} \quad (6)$$

En esta formula, y es una cantidad compleja, con parte real e imaginaria. Como

$$e^{-i\theta} = \cos\theta - i\sin\theta \quad (7)$$

la ec. 6 se puede escribir en la forma

$$y(x, t) = A\cos\omega(t - x/v) - iA\sin\omega(t - x/v) \quad (8)$$

Únicamente la parte real de la ec. 7 tiene significado en el caso de ondas en una cuerda en tensión, donde y representa el desplazamiento de la cuerda con respecto a su posición normal, en este caso la parte imaginaria se descarta porque no se puede aplicar.

ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

En mecánica cuántica, la función de onda Ψ corresponde a la variable de onda y del movimiento ondulatorio general. Sin embargo, Ψ , a diferencia de y , no es una cantidad mensurable en sí misma y puede, por tanto, ser compleja. Por esta razón supondremos que Ψ está especificada en

la dirección x por

$$\Psi(x, t) = Ae^{-i\omega(t-x/v)} \quad (9)$$

Cuando se sustituye en esta fórmula ω por $2\pi\nu$ y v por $\lambda\nu$, obtenemos

$$\Psi(x, t) = Ae^{-2\pi i(\nu t - x/\lambda)} \quad (10)$$

que es conveniente, ya que sabemos que ν y λ están en función de la energía total E y del momento p de la partícula descrita por Ψ . Ya que

$$E = h\nu = 2\pi\hbar\nu \quad (11)$$

y

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p} \quad (12)$$

tenemos

$$\Psi(x, t) = Ae^{-(i/\hbar)(Et - px)} \quad (13)$$

La ec. 13 es una descripción matemática de la onda equivalente a una partícula libre, de energía total E y momento p , que se mueve en la dirección y sentido $+x$, del mismo modo que la ec. 6 es la descripción matemática de un desplazamiento de onda armónica que se mueve libremente a lo largo de una cuerda en tensión.

La expresión de la función de onda Ψ , dada por la ec. 13, es correcta solamente para partículas que se mueven libremente, pero estamos más interesados en situaciones donde el movimiento de una partícula está sujeto a varias restricciones, como el caso de un electrón ligado a un átomo por el campo eléctrico de su núcleo. Lo que debemos hacer ahora es obtener la ecuación diferencial fundamental para Ψ , la que se puede resolver en una situación específica.

Comenzamos por la diferenciación de la ec. 13 dos veces con respecto a x ,

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi \quad (14)$$

y una vez respecto a t

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \Psi \quad (15)$$

A velocidades pequeñas comparadas con la de la luz, la energía total E de una partícula es la suma de su energía cinética $p^2/2m$ y de su energía potencial V , donde V es una función general de la posición x y del tiempo t :

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \quad (16)$$

Multiplicando ambos miembros de esta ecuación por la función de onda

$$E\Psi = \frac{p^2\Psi}{2m} + V\Psi \quad (17)$$

De las ecs. 14 y 15 vemos que

$$E\Psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (18)$$

y

$$p^2\Psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \quad (19)$$

Sustituyendo estas expresiones de $E\Psi$ y $p^2\Psi$ en la ec. 17 obtenemos

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \quad (20)$$

La ec. 20 es la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, donde la energía potencial V es una función de x, y, z, t . En tres dimensiones, la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo es

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) + V\Psi \quad (21)$$

Una vez conocida V , se puede resolver la ecuación de Schrödinger para la función de onda Ψ de la partícula, cuya densidad de probabilidad $|\Psi|^2$ se puede determinar para x, y, z, t . En muchas situaciones, la energía potencial de una partícula no depende explícitamente del tiempo; las fuerzas que actúan sobre ella y, por lo tanto, V , varían solamente con la posición de la partícula. Cuando esto se cumple, la ecuación de Schrödinger se puede simplificar eliminando todo lo referente a t . Notemos que se puede escribir la función de onda unidimensional de una partícula libre

$$\begin{aligned}\Psi(x, t) &= Ae^{(-i/\hbar)(Et - px)} \\ &= Ae^{-(iE/\hbar)t} e^{(ip/\hbar)x} \\ &= \psi(x)e^{-(iE/\hbar)t}\end{aligned}\tag{22}$$

Esto es, $\Psi(x, t)$ es el producto de una función dependiente del tiempo $e^{-(iE/\hbar)t}$ y una función dependiente de la posición $\psi(x, t)$. Sucede que las variaciones con el tiempo de todas las funciones de partículas, sobre las que actúan fuerzas estacionarias, tienen la misma forma que las de una partícula libre. Sustituyendo la Ψ de la ec. 21 en la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, encontramos que

$$E\psi e^{-(iE/\hbar)t} = -\frac{\hbar^2}{2m} e^{-(iE/\hbar)t} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi e^{-(iE/\hbar)t}\tag{23}$$

y, así dividiendo ambos miembros entre el factor exponencial común,

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V)\psi = 0\tag{24}$$

que es la ecuación de Schrödinger en estado estacionario. En tres dimensiones es

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V)\psi = 0\tag{25}$$

En general, la ecuación de Schrödinger en estado estacionario se puede resolver únicamente para algunos valores de la energía E . Lo que queremos decir con esto no se refiere a las dificultades matemáticas que se pueden presentar, sino a algo más fundamental. “Resolver” la ecuación de Schrödinger para un sistema dado significa obtener una función de onda ψ que no solo obedezca a la ecuación y a las condiciones en la frontera que existan, sino que también cumplan las condiciones de una función de onda aceptable, es decir, que la función y su derivada sean continuas finitas y univaluadas. De esta manera, la cuantización de energía aparece en la mecánica ondulatoria como un elemento natural de la teoría. Así la cuantización de la energía en el mundo físico se ha revelado como un fenómeno universal característico de todos los sistemas estables.

ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER PARA EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO

A continuación aplicaremos la ecuación de Schrödinger al átomo de hidrógeno el cual está formado por un protón, partícula con carga eléctrica $+e$, y un electrón, que tiene carga $-e$ y que es 1,836 veces más ligero que el protón.

Ahora, si la interacción entre dos partículas es de tipo $u(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$, el problema de movimiento de tales partículas en mecánica cuántica y también en mecánica clásica se reduce al movimiento de una sola partícula en el campo de simetría esférica, entonces tenemos el siguiente Lagrangiano:

$$L = \frac{1}{2}m_1\dot{\vec{r}}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{\vec{r}}_2^2 - u(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \quad (26)$$

Introduciendo las siguientes expresiones:

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad (27)$$

y

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2} \quad (28)$$

por lo tanto el Lagrangiano nos queda:

$$L = \frac{1}{2} M \dot{R}^2 + \frac{1}{2} \mu \dot{r}^2 - u(r) \quad (29)$$

donde

$$M = m_1 + m_2 \quad (30)$$

y

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (31)$$

Por otro lado la introducción del impulso se hace con las formulas de Lagrange

$$\vec{P} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{R}}} = M \dot{\vec{R}} \quad (32)$$

y

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}} = m \dot{\vec{r}} \quad (33)$$

lo que permite escribir la función clásica de Hamilton

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2m} + u(r) \quad (34)$$

Entonces se puede obtener el operador Hamiltoniano del problema correspondiente cuántico

con conmutadores de tipo

$$[P_i, P_k] = -i\hbar\delta_{ik} \quad (35)$$

y

$$[p_i, p_k] = -i\hbar\delta_{ik} \quad (36)$$

por lo tanto el operador Hamiltoniano es de la forma

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2 + u(r) \quad (37)$$

Este operador Hamiltoniano es la parte fundamental de la ecuación de Schrödinger puesta en la forma

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (38)$$

lo cual es una forma muy practica de escribirla, pero lo mas importante hasta ahora escrito en ésta sección es que se ha tratado al sistema formado por el protón y el electrón como un sistema clásico con partículas de masa no despreciable, como lo demuestran las ecs. 24-29, ya que no se estan tomando en cuenta velocidades cercanas a la de la luz, por este motivo se puede aplicar perfectamente la ecuación de Schrödinger con resultados muy satisfactorios.

La ecuación de Schrödinger para el electrón en tres dimensiones, que es la que debemos emplear para el átomo de hidrógeno, es la ec. 21. Utilizaremos esta ecuación de Schrödinger independiente del tiempo debido a que el potencial V depende solamente de r y no del tiempo.

La energía potencial V , a causa de la energía potencial electrostática de una carga $-e$ a una distancia r de otra carga $+e$, es

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (39)$$

Puesto que V es una función de r en vez de serlo de x, y, z , no podemos sustituir la ec. 39 directamente en la ec. 21. Hay dos posibilidades: expresar V en función de las coordenadas cartesianas x, y, z sustituyendo a r por $\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, o expresar la ecuación de Schrödinger en función de las coordenadas polares esféricas r, θ, ϕ . Haciendo esto último debido a la simetría de la situación física, el problema se simplifica considerablemente.

Por lo tanto, en coordenadas polares esféricas, la ecuación de Schrödinger es

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \text{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\text{sen} \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \text{sen}^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi = 0 \quad (40)$$

Sustituyendo la energía potencial V de la ec. 39 y multiplicando toda la ecuación por $r^2 \text{sen}^2 \theta$, se obtiene

$$\text{sen}^2 \theta \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \text{sen} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\text{sen} \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + \frac{2mr^2 \text{sen}^2 \theta}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) \psi = 0 \quad (41)$$

Esta ecuación, es la ecuación diferencial parcial de la función de onda $\psi(r, \theta, \phi)$ del electrón en un átomo de hidrógeno. Junto con las diversas condiciones que $\psi(r, \theta, \phi)$ debe cumplir (por ejemplo, $\psi(r, \theta, \phi)$ tiene un solo valor para cada punto r, θ, ϕ), esta ecuación especifica totalmente el comportamiento del electrón. Para ver cual es este comportamiento, resolveremos la ec. 41 para $\psi(r, \theta, \phi)$ e interpretaremos los resultados obtenidos.

SEPARACIÓN DE VARIABLES EN LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

Lo verdaderamente valioso de escribir la ecuación de Schrödinger en coordenadas esféricas para el problema del átomo de hidrógeno está en que de esta forma se puede separar fácilmente en tres ecuaciones independientes, cada una de ellas con una sola coordenada. El procedimiento consiste en buscar las soluciones en que la función de onda $\psi(r, \theta, \phi)$ tiene la forma de un producto de tres funciones diferentes: $R(r)$, que depende solamente de r ; $\Theta(\theta)$ que depende solamente de θ ; y $\Phi(\phi)$ que solo depende de ϕ . Esto es, suponemos que

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi) \quad (42)$$

La función $R(r)$ describe la variación de la función de onda ψ del electrón a lo largo de un radio vector desde el núcleo, siendo θ y ϕ constantes. La variación de ψ con el ángulo cenital θ a lo largo de un meridiano de una esfera centrada sobre el núcleo está descrita por la función $\Theta(\theta)$ para r y ϕ constantes. Finalmente, la función $\Phi(\phi)$ describe cómo varía ψ con el ángulo azimutal ϕ a lo largo de un paralelo de una esfera centrada sobre el núcleo, siendo r y θ constantes.

La ec. 42 se puede escribir más fácilmente como $\psi = R\Theta\Phi$ de donde vemos que

$$\frac{\partial\psi}{\partial r} = \Theta\Phi \frac{\partial R}{\partial r} \quad (43)$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial\theta} = R\Phi \frac{\partial\Theta}{\partial\theta} \quad (44)$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} = R\Theta \frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2} \quad (45)$$

Al sustituir las ecs. 43-45 en la ec. 41, que es la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno, y se divide la ecuación total entre $R\Theta\Phi$ se tiene que

$$\frac{\text{sen}^2\theta}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{\text{sen}\theta}{\Theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\text{sen}\theta \frac{\partial\Theta}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2} + \frac{2mr^2 \text{sen}^2\theta}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) = 0 \quad (46)$$

El tercer término de esta ecuación sólo es función del ángulo ϕ , mientras que los otros dos son función de r y θ . Volviendo a escribir la ecuación anterior, tenemos

$$\frac{\text{sen}^2\theta}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{\text{sen}\theta}{\Theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\text{sen}\theta \frac{\partial\Theta}{\partial\theta} \right) + \frac{2mr^2 \text{sen}^2\theta}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) = -\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2} \quad (47)$$

Esta ecuación solamente puede ser correcta si sus dos miembros son iguales a la misma constante, ya que son funciones de variables diferentes. A esta constante es conveniente llamarla m_l^2 . La ecuación diferencial para la función Φ es

$$-\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2} = m_l^2 \quad (48)$$

Si se sustituye m_l^2 en el segundo miembro de la ec. 47, se divide la ecuación resultante entre $\text{sen}^2\theta$ y se reagrupan términos, se tiene

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) = \frac{m_l^2}{\text{sen}^2\theta} - \frac{1}{\Theta \text{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\text{sen}\theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) \quad (49)$$

Se tiene otra vez una ecuación en que aparecen variables diferentes en cada miembro, requiriendose que ambas sean iguales a la misma constante. A esta constante se le llamará, por razones que veremos más adelante, $l(l+1)$. Las ecuaciones para las funciones $\Theta(\theta)$ y $R(r)$ son

$$\frac{m_l^2}{\text{sen}^2\theta} - \frac{1}{\Theta \text{sen}\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\text{sen}\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) = l(l+1) \quad (50)$$

y

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) = l(l+1) \quad (51)$$

Las ecs. 48,50 y 51 se escriben normalmente como

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + m_l^2\Phi = 0 \quad (52)$$

$$\frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\text{sen}\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m_l^2}{\text{sen}^2\theta} \right] \Theta = 0 \quad (53)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0 \quad (54)$$

Cada una de estas ecuaciones es una ecuación diferencial ordinaria de una función con una sola variable. Con ello se ha conseguido simplificar la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno que, al principio, era una ecuación diferencial parcial de una función ψ de tres variables.

LOS NÚMEROS CUÁNTICOS

0.1 Solución Para La Parte Azimutal

La ec. 52 se resuelve fácilmente para encontrar que su solución es

$$\Phi(\phi) = A_\phi e^{im_l\phi} \quad (55)$$

donde A_ϕ es la constante de integración. Una de las condiciones establecidas previamente que debe cumplir una función de onda (y por lo tanto Φ , que es una componente de la función completa ψ) es que tenga un único valor para cada punto del espacio. Por ejemplo se observa que ϕ y $\phi + 2\pi$ se identifican en el mismo plano meridiano. Por tanto, debe ser cierto que $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$, o bien, que $Ae^{im_l\phi} = Ae^{im_l(\phi+2\pi)}$, lo que solamente puede ser cuando m_l sea 0 o un número entero positivo o negativo ($\pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$). La constante m_l se conoce como el número cuántico magnético del átomo de hidrógeno y gobierna a la dirección del momento angular L . El número cuántico magnético m_l está determinado por el número cuántico orbital l que a su vez determina la magnitud del momento angular del electrón.

La interpretación del número cuántico orbital l no es tan evidente. Examinemos la ec. 54, que corresponde a la parte radial $R(r)$ de la función de onda ψ . Esta ecuación está relacionada únicamente con el aspecto radial del movimiento de los electrones, es decir, con el movimiento de aproximación y alejamiento de los mismos al núcleo; sin embargo, está presente en ella la energía total del electrón E . Esta energía incluye la energía cinética del electrón en su movimiento orbital que no tiene nada que ver con el movimiento radial. Esta contradicción se puede eliminar con el siguiente razonamiento: la energía cinética T del electrón tiene dos partes, T_{radial} debido a su movimiento de aproximación y alejamiento del núcleo, y $T_{orbital}$ debida a su movimiento alrededor de él. La energía potencial V del electrón es la energía electrostática dada por la ec. 39. Por lo tanto, la energía total del electrón es

$$E = T_{radial} + T_{orbital} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (56)$$

Sustituyendo esta expresión de E en la ec. 54 obtenemos, después de reagrupar terminos,

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[T_{radial} + T_{orbital} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] R = 0 \quad (57)$$

Si los dos últimos términos entre corchetes de esta ecuación se anulan entre sí tenemos lo que necesitábamos: una ecuación diferencial para $R(r)$ constituida exclusivamente por funciones del radio vector. Por lo tanto, necesitamos que

$$T_{orbital} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (58)$$

La energía cinética orbital del electrón es

$$T_{orbital} = \frac{1}{2} m v_{orbital}^2 \quad (59)$$

Puesto que el momento angular L del electrón es

$$L = m v_{orbital} r \quad (60)$$

podemos expresar la energía cinética orbital

$$T_{orbital} = \frac{L^2}{2mr^2} \quad (61)$$

Por lo tanto, en la ec. 58 tenemos

$$\frac{L^2}{2mr^2} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (62)$$

lo que nos da

$$L = \sqrt{l(l+1)} \hbar \quad (63)$$

La interpretación de este resultado es que, puesto que el número cuántico orbital l está limitado a los valores $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$, el electrón puede tener solamente los momentos angulares L que

se especifican mediante la ec. 63. Al igual que la energía total E , el momento angular se conserva y está cuantizado. El término $\hbar = h/2\pi = 1.054 \times 10^{-34}$ J-s es la unidad natural del momento angular.

En el movimiento planetario macroscópico, una vez más, el número cuántico que describe el momento angular es tan grande que la separación en estados discretos del momento angular no se puede observar experimentalmente. Por ejemplo, un electrón (o para este caso, cualquier otro cuerpo) cuyo número cuántico orbital sea 2, tiene un momento angular $L = 2.6 \times 10^{-34}$ J-s. Por el contrario, el momento angular orbital de la tierra es ¡ 2.7×10^{40} J-s!

Se acostumbra designar a los estados del momento angular con la letra s para $l = 0$, con la letra p cuando $l = 1$, y así sucesivamente. Este original código se originó en la clasificación empírica de los espectros en las llamadas series que recibieron los nombres de definida, principal, difusa y fundamental, nombres que se les dio desde antes de que se desarrollara la teoría del átomo. Así un estado s es el que no tiene momento angular, un estado p tiene el momento angular $\sqrt{2}\hbar$, etc.

La combinación del número cuántico total con la letra que representa al momento angular orbital proporciona una notación apropiada, y que es muy común para los estados atómicos. En esta notación, por ejemplo un estado en el que $n = 2, l = 0$ es un estado $2s$ y uno en el que $n = 4, l = 2$ es un estado $4d$.

Por otro lado para la interpretación número cuántico magnético, tenemos que, al igual que el momento lineal, el momento angular es un vector, de modo que para describirlo se requiere que se especifique su dirección, su sentido y su magnitud. (El vector L es perpendicular al plano en el que tiene lugar el movimiento de rotación, y su dirección y sentido están dados por la regla

de la mano derecha: cuando los dedos apuntan en la dirección del movimiento, el pulgar tiene la dirección y el sentido de L .)

¿Qué significado posible pueden tener una dirección y un sentido en el espacio para un átomo de hidrógeno ? La respuesta es sencilla si pensamos que un electrón que gira alrededor de un núcleo es un diminuto circuito que, como dipolo magnético, tiene también un campo magnético. En consecuencia, un electrón atómico que posee momento angular interactúa con un campo magnético externo B . El número cuántico magnético m_l especifica la dirección de L , determinando la componente de L en la dirección del campo. Este fenómeno se conoce comúnmente con el nombre de cuantización espacial.

Si hacemos que la dirección del campo magnético sea paralela al eje z , la componente de L en esta dirección es

$$L_z = m_l \hbar \quad (64)$$

Los valores posibles de m_l para un valor dado de l , van desde $+l$ hasta $-l$, pasando por 0, de modo que las posibles orientaciones del vector momento angular L en un campo magnético son $2l + 1$. Cuando $l = 0$, L_z puede tener solamente el valor cero; cuando $l = 1$, L_z puede ser \hbar , 0, ó $-\hbar$; cuando $l = 2$, L_z puede ser $2\hbar$, \hbar , 0, $-\hbar$, ó $-2\hbar$, y así sucesivamente. Aclaremos que L nunca puede estar alineado exactamente (paralela o antiparalelamente) con B , ya que L_z es siempre más pequeño que la magnitud $\sqrt{l(l+1)}\hbar$ del momento angular total.

La cuantización espacial del momento angular orbital del átomo de hidrógeno se muestra en la fig. 6.1.

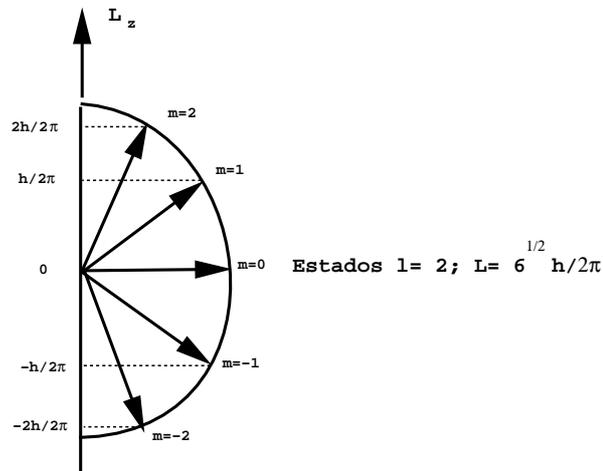


Fig. 6.1: Cuantización del espacio del mom. angular.

Debemos considerar al átomo caracterizado por un cierto valor de m_l como preparado para tomar una determinada orientación de su momento angular L , relativo a un campo magnético externo en el caso de encontrarse en él.

En ausencia de un campo magnético externo, la dirección del eje z es completamente arbitraria. Por tanto, debe ser cierto que la componente de L en cualquier dirección que escojamos es $m_l \hbar$; el significado de un campo magnético externo es que proporciona una dirección de referencia importante experimentalmente. Un campo magnético no es la única dirección de referencia posible. Por ejemplo, la línea entre los dos átomos H en la molécula de hidrógeno H_2 tiene tanto significado experimental como la dirección de un campo magnético y, a lo largo de esta línea, las componentes de los momentos angulares de los átomos de H están determinados por sus valores m_l .

¿Por qué está cuantizada únicamente la componente de L ? La respuesta se relaciona estrechamente con el hecho de que L nunca puede apuntar a cualquier dirección z específica; en

lugar de ello describe un cono en el espacio, de manera que su proyección L_z es $m_l \hbar$. La razón de este fenómeno es el principio de incertidumbre: si L estuviera fijo en el espacio, de manera que L_x , L_y y L_z tuvieran valores definidos, el electrón estaría confinado en un plano definido. Por ejemplo, si L estuviera en la dirección z , el electrón tendría que estar en el plano xy todo el tiempo (fig. 6.2a).

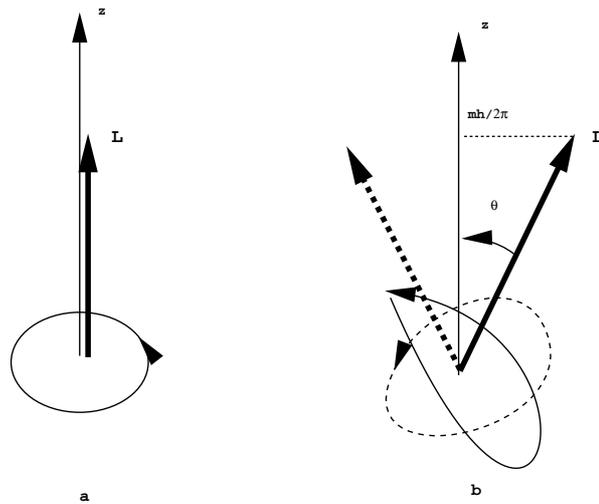


Fig. 6.2: El principio de incertidumbre prohíbe que el vector L del momento angular tenga una dirección definida en el espacio.

Esto únicamente puede ocurrir si la componente del momento del electrón p_z en la dirección z es infinitamente incierta, lo que, por supuesto, es imposible si es parte de un átomo de hidrógeno. Sin embargo, como en realidad únicamente una componente L_z de L junto con su magnitud L tiene valores definidos y $|L| > |L_z|$, el electrón no está limitado a un plano único (fig. 6.2b), y si así fuera, habría una fundada incertidumbre en la coordenada z del electrón. La dirección de L cambia constantemente (fig. 6.3) y así los valores promedio de L_x y L_y son 0, aunque L_z tenga

siempre el valor específico $m_l \hbar$.

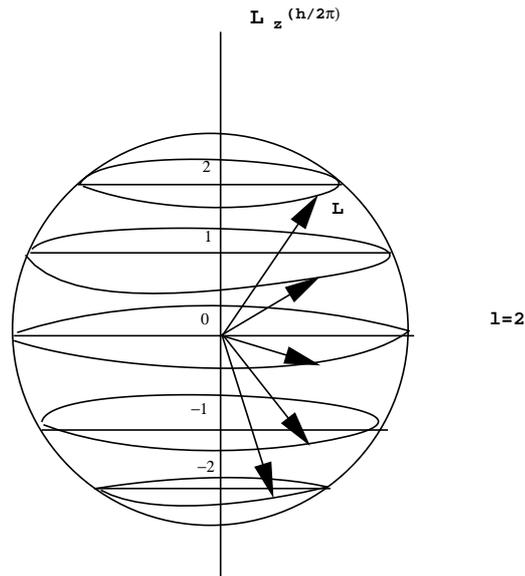


Fig. 6.3: El vector L de mom. angular tiene precesion constante en torno al eje z .

La solución para Φ también debe cumplir con la condición de normalización la cual está dada por la ec. 2, entonces para Φ tenemos

$$\int_0^{2\pi} |\Phi|^2 d\phi = 1 \quad (65)$$

al sustituir Φ se tiene

$$\int_0^{2\pi} A_\phi^2 d\phi = 1 \quad (66)$$

con lo cual se tiene que $A_\phi = 1/\sqrt{2\pi}$ y por lo tanto Φ ya normalizada está dado por

$$\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l \phi} \quad (67)$$

Solución Para La Parte Polar

La ecuación diferencial 53 para $\Theta(\theta)$ tiene una solución más complicada y está dada por los polinomios asociados de Legendre

$$P_l^{m_l}(x) = (-1)^{m_l} (1-x^2)^{m_l/2} \frac{d^{m_l}}{dx^{m_l}} P_l(x) = (-1)^{m_l} \frac{(1-x^2)^{m_l/2}}{2^l l!} \frac{d^{m_l+l}}{dx^{m_l+l}} (x^2-1)^l \quad (68)$$

estas funciones cumplen con la relación de ortogonalidad

$$\int_{-1}^1 [P_l^{m_l}(\cos\theta)]^2 d\cos\theta = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m_l)!}{(l-m_l)!} \quad (69)$$

Ahora, $\Theta(\theta)$, que es la solución para la ec. 53, está dada por los polinomios de Legendre normalizados, esto es, si

$$\Theta(\theta) = A_\theta P_l^{m_l}(\cos\theta) \quad (70)$$

entonces la condición de normalización esta dada por

$$\int_{-1}^1 A_\theta^2 [P_l^{m_l}(\cos\theta)]^2 d\cos\theta = 1 \quad (71)$$

por lo tanto la constante de normalización para la parte polar es

$$A_\theta = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m_l)!}{(l+m_l)!}} \quad (72)$$

y por consiguiente, la función $\Theta(\theta)$ ya normalizada es

$$\Theta(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m_l)!}{(l+m_l)!}} P_l^{m_l}(\cos\theta) \quad (73)$$

Para nuestro propósito, lo más importante de estas funciones es que, como ya se dijo anteriormente, existen solamente cuando la constante l es un número entero igual o mayor que $|m_l|$, que es el valor absoluto de m_l . Esta exigencia se puede expresar como una condición de m_l en la forma

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \quad (74)$$

Armónicos Esféricos

Las soluciones para la parte azimutal y polar se pueden juntar para formar los llamados armónicos esféricos, estos dependen de ϕ y θ y de alguna forma hacen más facil el manejo de la función de onda completa $\psi(r, \theta, \phi)$. Los armónicos esféricos estan dados de la siguiente manera:

$$Y_l^{m_l}(\theta, \phi) = (-1)^{m_l} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m_l)!}{(l+m_l)!}} P_l^{m_l}(\cos\theta) e^{im_l\phi} \quad (75)$$

El factor $(-1)^{m_l}$ que se ha introducido sin ningun problema debido a que la ecuación de Schrödinger es lineal y homogenea y ademas de que particularmente es conveniente para el estudio del momento angular. Este factor es un factor fase llamado fase Condon-Shortley y el efecto es para introducir una alternancia de signo.

Solución Para La Parte Radial

La solución de la ecuación final, ec. 54, para la parte radial $R(r)$ de la función de onda ψ del átomo de hidrógeno también es complicada, y viene dada por los polinomios asociados de Laguerre. La ec. 54 sólo se puede resolver cuando E es positivo o tiene uno de los valores negativos E_n (lo que significa que el electrón está unido al átomo), dados por

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \left(\frac{1}{n^2}\right) \quad (76)$$

donde n es un número entero y se conoce como número cuántico principal y describe la cuantización de la energía del electrón en el átomo de hidrógeno. Esta ecuación es la que obtuvo Bohr para los niveles de energía del átomo de hidrógeno.

Otra condición que se debe cumplir para resolver la ec. 54, es que n , conocido como número cuántico principal, sea igual o mayor que $l + 1$. Esto se puede expresar como una condición para

l en la forma

$$l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1) \quad (77)$$

La ec. 54 tambien se puede poner de la siguiente forma

$$r^2 \frac{d^2 R}{dr^2} + 2r \frac{dR}{dr} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} r^2 + \frac{2me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} r - l(l+1) \right] R = 0 \quad (78)$$

y su solución está dada por los polinomios asociados de Laguerre los cuales cumplen con la siguiente condición de normalización

$$\int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{2l} [L_{n+l}^{2l+1}(\rho)]^2 \rho^2 d\rho = \frac{2n[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!} \quad (79)$$

Por lo tanto la solución para la ec. 78, que corresponde a la parte radial, es:

$$R(r) = -\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \left(\frac{2}{na_0}\right)^{3/2} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \quad (80)$$

donde $\rho = 2r/na_0$ y $a_0 = \hbar^2/me^2$.

Ahora que ya tenemos las soluciones de cada una de las ecuaciones que solo dependen de una variable, ya podemos construir nuestra función de onda para cada estado del electrón en el átomo de hidrógeno, esto es si tenemos que $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$, entonces la función de onda completa es

$$\psi(r, \theta, \phi) = -\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m_l)!}{(l+m_l)!} \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \left(\frac{2}{na_0}\right)^{3/2} (\alpha r)^l e^{-\alpha r/2} L_{n+l}^{2l+1}(\alpha r) P_l^{m_l}(\cos\theta) e^{im_l\phi} \quad (81)$$

donde $\alpha = 2/na_0$.

Utilizando los armónicos esféricos nuestra solución queda de la siguiente manera

$$\psi(r, \theta, \phi) = -\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \left(\frac{2}{na_0}\right)^{3/2} (\alpha r)^l e^{-\alpha r/2} L_{n+l}^{2l+1}(\alpha r) Y_l^{m_l}(\theta, \phi) \quad (82)$$

Esta es la solución a la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno, la cual describe cada uno de los estados del electrón. Esta función de onda por si sola no tiene interpretación física como se dijo anteriormente, pero el cuadrado de su valor absoluto $|\psi|^2$ calculado para un punto y en un instante determinado es proporcional a la probabilidad de encontrar experimentalmente al electrón ahí y en ese instante.

LA DENSIDAD DE PROBABILIDAD ELECTRONICA

En el modelo de Bohr del átomo de hidrógeno, el electrón gira alrededor del núcleo con una trayectoria circular. Si se realizara un experimento adecuado, se vería que el electrón estaría siempre a una distancia del núcleo $r = n^2 a_0$ (donde n es el número cuántico de la órbita y $a_0 = 0.53A$ es el radio de la órbita más próxima al núcleo) y en el plano ecuatorial $\theta = 90$, mientras que el ángulo azimutal ϕ varía con el tiempo.

La teoría cuántica del átomo de hidrógeno modifica las conclusiones del modelo de Bohr en dos aspectos. En primer lugar, no se pueden dar valores correctos de r, θ, ϕ , sino únicamente probabilidades relativas de encontrar al electrón en un lugar dado. Esta imprecisión es, por supuesto, una consecuencia de la naturaleza ondulatoria del electrón. En segundo lugar, no se puede pensar que el electrón se mueve alrededor del núcleo en un sentido convencional, ya que la densidad de probabilidad $|\psi|^2$ es independiente del tiempo y puede variar considerablemente de un lugar a otro.

La función de onda del electrón ψ en un átomo de hidrógeno viene dada por $\psi = R\Theta\Phi$ donde $R = R_{nl}(r)$ describe cómo varía ψ con r cuando los números cuánticos orbital y total tienen los valores n y l ; $\Theta = \Theta_{lm_l}(\theta)$ describe a su vez la variación de ψ con θ cuando los números cuánticos

magnético y orbital tienen los valores l y m_l ; y $\Phi = \Phi_{m_l}(\phi)$ que proporciona la variación de ψ con ϕ cuando el número cuántico magnético es m_l . Entonces, la densidad de probabilidad $|\psi|^2$ se puede escribir como

$$|\psi|^2 = |R|^2 |\Theta|^2 |\Phi|^2 \quad (83)$$

donde se comprende que si la función es compleja, hay que tener en cuenta que su cuadrado se debe sustituir por el producto de ella y su conjugada compleja.

La densidad de probabilidad $|\Phi|^2$, que mide la posibilidad de encontrar al electrón con un ángulo azimutal ϕ dado, es una constante que no depende para nada de ϕ . Por lo tanto, la densidad de probabilidad del electrón es simétrica respecto al eje de las z , independientemente del estado cuántico, de manera que el electrón tiene igual oportunidad de encontrarse en un ángulo ϕ como en otro.

La parte radial R de la función de onda, en contraste con Φ , no solamente varía con r , sino que lo hace de una manera diferente para cada combinación de números cuánticos n y l . La fig. 6.4 muestra gráficas de R en función de r para los estados $1s$, $2s$, y $2p$ del átomo de hidrógeno. Evidentemente, R es máximo al ser $r = 0$ (esto es, en el núcleo mismo) para todos los estados s , mientras que es cero en $r = 0$ para todos los estados que poseen momento angular.

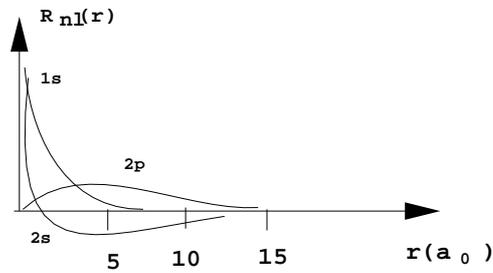


Fig. 6.4: Variación con la distancia al núcleo de las funciones de onda radiales 1s, 2s, 2p; $a_0 = 0.53$ angstroms (radio Bohr)

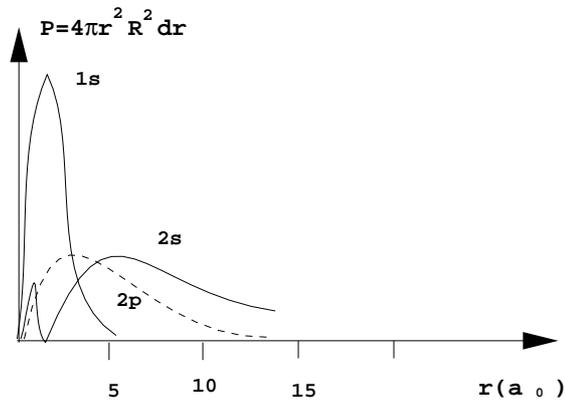


Fig. 6.5: Probabilidad de encontrar un electrón del átomo de hidrógeno entre r y $r+dr$ con respecto al núcleo para 1s, 2s, 2p.

La densidad de probabilidad del electrón en el punto r, θ, ϕ es proporcional a $|\psi|^2$, pero la probabilidad real de encontrarlo en el elemento de volumen infinitesimal dV es $|\psi|^2 dV$. Ahora, en coordenadas polares esféricas

$$dV = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi \tag{84}$$

de manera que, como Θ y Φ son funciones normalizadas, la probabilidad numérica real $P(r)dr$ de

encontrar al electrón en el átomo de hidrógeno, a una distancia comprendida entre r y $r + dr$ del núcleo, es

$$\begin{aligned}
 P(r)dr &= r^2 |R|^2 dr \int_0^\pi |\Theta|^2 \text{sen}\theta d\theta \int_0^{2\pi} |\Phi|^2 d\phi \\
 &= r^2 |R|^2 dr
 \end{aligned}
 \tag{85}$$

Esta ecuación está representada en la fig. 6.5 para los mismos estados cuyas funciones radiales R aparecen en la fig. 6.4; en principio, las curvas son completamente diferentes. Observamos de inmediato que P no es máximo en el núcleo para los estados s , como lo es R , sino que tiene su máximo a una distancia finita de él. El valor más probable de r para un electrón $1s$ es exactamente a_0 , que es el radio de la órbita del electrón en estado fundamental en el modelo de Bohr. Sin embargo, el valor medio de r para un electrón $1s$ es $1.5a_0$, lo cual parece enigmático a primera vista, ya que los niveles de energía son los mismos en mecánica cuántica y en el modelo atómico de Bohr. Esta aparente discrepancia se elimina cuando se tiene en cuenta que la energía del electrón depende de $1/r$ y no directamente de r , y el valor medio de $1/r$ para un electrón $1s$ es precisamente $1/a_0$.

La función Θ varía con el ángulo polar θ para todos los números cuánticos l y m_l , excepto para $l = m_l = 0$, que son estados s . La densidad de probabilidad $|\Theta|^2$ para un estado s , es una constante ($1/2$), lo que significa que, como $|\Phi|^2$ es también constante, la densidad de probabilidad electrónica $|\psi|^2$ tiene el mismo valor, para un valor de r dado, en todas las direcciones. Los electrones en otros estados tienen preferencias angulares que algunas veces llegan a ser muy complicadas. Esto se puede observar en la fig.6.5, donde se muestran, para varios estados atómicos, las densidades de probabilidad electrónica en función de r y θ . (El término

que se representa es $|\psi|^2$, y no $|\psi|^2 dV$.) Puesto que $|\psi|^2$ es independiente de ϕ , una representación tridimensional de $|\psi|^2$ se obtiene haciendo girar una representación particular alrededor de un eje vertical. Al hacerlo, las densidades de probabilidad para los estados s tienen evidentemente simetría esférica, mientras que las otras no la tienen. Los tipos de lóbulos pronunciados, característicos de muchos de los estados, tienen importancia en química ya que estos modelos ayudan a determinar la manera como interactúan en las moléculas los átomos adyacentes.

Notas:

1. E. Schrödinger consiguió el premio Nobel en 1933 (junto con Dirac) por “el descubrimiento de nuevas formas productivas de la teoría atómica”. Schrödinger escribió una serie notable de cuatro artículos intitulada “Quantisierung als Eigenwertproblem” (I-IV, recibidos por *Annalen der Physik* el 27 de Enero, el 23 de Febrero, el 10 de Mayo y el 21 de Junio de 1926).

Problemas

Problema 6.1 - Obtener las ecuaciones para las órbitas estables y para los niveles de energía del electrón en el átomo de hidrógeno.

Respuesta: Tenemos que la longitud de onda del electrón esta dada por

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

mientras que por otro lado al igualar la fuerza electrica con la fuerza centrípeta, esto es

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$$

nosotros obtenemos que la velocidad del electrón esta dada por

$$v = \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 mr}}$$

entonces la longitud de onda del electrón es

$$\lambda = \frac{h}{e} \sqrt{\frac{4\pi\epsilon_0 r}{m}}$$

Ahora, si damos el valor 5.3×10^{-11} m al radio r de la órbita electrónica, vemos que la longitud de onda del electrón es $\lambda = 33 \times 10^{-11}$ m. Esta longitud de onda tiene exactamente el mismo valor que la circunferencia de la órbita del electrón, $2\pi r = 33 \times 10^{-11}$ m. Como se puede ver, la órbita de un electrón en un átomo de hidrógeno corresponde así a una onda completa cerrada sobre sí misma. Esto se puede comparar con las vibraciones de un anillo de alambre, si las longitudes de onda estan en un número entero de veces en su circunferencia éste podra seguir vibrando indefinidamente, pero si un número no entero de longitudes de onda tiene lugar sobre el anillo se producirá una interferencia negativa a medida que las ondas se desplacen en torno a él, y las

vibraciones desaparecerán rápidamente. Con esto se puede afirmar que un electrón puede girar indefinidamente alrededor de un núcleo sin irradiar energía con tal que su órbita contenga un número entero de longitudes de la onda de De Broglie. Con esto tenemos que la condición de estabilidad es

$$n\lambda = 2\pi r_n$$

donde r_n designa el radio de la órbita que contiene n longitudes de onda. Al sustituir λ tenemos

$$\frac{nh}{e} \sqrt{\frac{4\pi\epsilon_0 r_n}{m}} = 2\pi r_n$$

por lo tanto las órbitas estables del electrón son

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2 \epsilon_0}{\pi m e^2}$$

Para los niveles de energía tenemos que $E = T + V$, al sustituir las energías potencial y cinéticas obtenemos

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

o lo que es igual

$$E_n = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_n}$$

al sustituir el valor de r_n en esta última ecuación obtenemos

$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} \left(\frac{1}{n^2} \right)$$

lo que nos da los niveles de energía.

Problema 6.2 - El teorema de Unsöld dice que, para cualquier valor del número cuántico orbital l , las densidades de probabilidad, sumadas para todos los estados posibles, desde $m_l = -l$ hasta $m_l = +l$ da una constante independiente de los ángulos θ o ϕ esto es

$$\sum_{m_l=-l}^{+l} |\Theta_{lm_l}|^2 |\Phi_{m_l}|^2 = cte.$$

Este teorema significa que todo átomo o ion con subcapa cerrada tiene una distribución simétrica esférica de carga eléctrica. Comprobar el teorema de Unsöld para $l = 0$, $l = 1$ y $l = 2$.

Respuesta: Tenemos que para $l = 0$, $\Theta_{00} = 1/\sqrt{2}$ y $\Phi_0 = 1/\sqrt{2\pi}$ por lo tanto del teorema de Unsöld vemos que

$$|\Theta_{0,0}|^2 |\Phi_0|^2 = \frac{1}{4\pi}$$

Para $l = 1$ tenemos que

$$\sum_{m_l=-1}^{+1} |\Theta_{lm_l}|^2 |\Phi_{m_l}|^2 = |\Theta_{1,-1}|^2 |\Phi_{-1}|^2 + |\Theta_{1,0}|^2 |\Phi_0|^2 + |\Theta_{1,1}|^2 |\Phi_1|^2$$

por otro lado las funciones de onda son: $\Theta_{1,-1} = (\sqrt{3}/2)\text{sen}\theta$, $\Phi_{-1} = (1/\sqrt{2\pi})e^{-i\phi}$, $\Theta_{1,0} = (\sqrt{6}/2)\text{cos}\theta$, $\Phi_0 = 1/\sqrt{2\pi}$, $\Theta_{1,1} = (\sqrt{3}/2)\text{sen}\theta$, $\Phi_1 = (1/\sqrt{2\pi})e^{i\phi}$ que al sustituir las en la ecuación anterior nos queda

$$\sum_{m_l=-1}^{+1} |\Theta_{lm_l}|^2 |\Phi_{m_l}|^2 = \frac{3}{8\pi}\text{sen}^2\theta + \frac{3}{4\pi}\text{cos}^2\theta + \frac{3}{8\pi}\text{sen}^2\theta = \frac{3}{4\pi}$$

lo que demuestra que también es una constante.

Para $l = 2$ tenemos que

$$\sum_{m_l=-2}^{+2} |\Theta_{lm_l}|^2 |\Phi_{m_l}|^2 =$$

$$|\Theta_{2,-2}|^2 |\Phi_{-2}|^2 + |\Theta_{2,-1}|^2 |\Phi_{-1}|^2 + |\Theta_{2,0}|^2 |\Phi_0|^2 + |\Theta_{2,1}|^2 |\Phi_1|^2 + |\Theta_{2,2}|^2 |\Phi_2|^2$$

y las funciones de onda son: $\Theta_{2,-2} = (\sqrt{15}/4)\text{sen}^2\theta$, $\Phi_{-2} = (1/\sqrt{2\pi})e^{-2i\phi}$, $\Theta_{2,-1} = (\sqrt{15}/2)\text{sen}\theta\cos\theta$,

$\Phi_{-1} = (1/\sqrt{2\pi})e^{-i\phi}$, $\Theta_{2,0} = (\sqrt{10}/4)(3\cos^2\theta - 1)$, $\Phi_0 = 1/\sqrt{2\pi}$, $\Theta_{2,1} = (\sqrt{15}/2)\text{sen}\theta\cos\theta$,

$\Phi_1 = (1/\sqrt{2\pi})e^{i\phi}$, $\Theta_{2,2} = (\sqrt{15}/4)\text{sen}^2\theta$, $\Phi_2 = (1/\sqrt{2\pi})e^{2i\phi}$, sustituyendo en la ecuación anterior

nos queda

$$\sum_{m_l=-2}^{+2} |\Theta_{lm_l}|^2 |\Phi_{m_l}|^2 = \frac{5}{4\pi}$$

con lo que queda demostrado el teorema de Unsöld.

Problema 6.3 - La probabilidad de encontrar un electrón atómico cuya función de onda radial sea $R(r)$, fuera de una esfera de radio r_0 centrada en el núcleo, es

$$\int_{r_0}^{\infty} |R(r)|^2 r^2 dr$$

La función de onda $R_{10}(r)$ corresponde al estado fundamental de un átomo de hidrógeno, y a_0 es el radio de la órbita de Bohr correspondiente a este estado. Calcular la probabilidad de encontrar un electrón en estado fundamental en un átomo de hidrógeno a una distancia del núcleo mayor que a_0 .

Respuesta: Tenemos que la función de onda radial que corresponde al estado fundamental

es

$$R_{10}(r) = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$$

sustituyendo en la integral nos queda

$$\int_{a_0}^{\infty} |R(r)|^2 r^2 dr = \frac{4}{a_0^3} \int_{a_0}^{\infty} r^2 e^{-2r/a_0} dr$$

o lo que es igual

$$\int_{a_0}^{\infty} |R(r)|^2 r^2 dr = \frac{4}{a_0^3} \left[-\frac{a_0}{2} r^2 e^{-2r/a_0} - \frac{a_0^2}{2} r e^{-2r/a_0} - \frac{a_0^3}{4} e^{-2r/a_0} \right]_{a_0}^{\infty}$$

esto nos da como resultado al evaluar

$$\int_{a_0}^{\infty} |R(r)|^2 r^2 dr = \frac{5}{e^2}$$

que es la probabilidad de encontrar al electrón.

7. DISPERSION EN LA MC

Introducción

Para la teoría cuántica de dispersión nos ayudaremos de los resultados ya conocidos de la dispersión en campos de fuerzas centrales, y asumiremos ciertas situaciones que simplificarán los cálculos, si bien no nos alejarán demasiado del problema “real”. Sabemos que en el análisis experimental de una colisión podemos obtener datos que nos ayuden a entender el estado de la materia “blanco”, o bien, la interacción entre el haz incidente y el “blanco”. Las hipótesis que asumiremos son:

i) Asumiremos que las partículas no tienen espín, lo cual *no* implica que éste no sea importante en la dispersión.

ii) Nos ocuparemos sólo de la dispersión elástica, en la cual no consideramos la posible estructura interna de las partículas.

iii) Asumiremos que el blanco es lo suficientemente delgado como para no permitir la dispersión múltiple.

iv) Asumiremos que las interacciones son descritas por un potencial que depende sólo de la posición relativa de las partículas.

Así, usaremos los resultados ya conocidos de la teoría de dispersión de la mecánica clásica, ahí se define:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{I(\theta, \varphi)}{I_0} \quad (1)$$

donde $d\sigma$ es el elemento de ángulo sólido, I_0 es el número de partículas incidentes por unidad de área, e $I d\Omega$ el número de partículas dispersadas en el elemento de ángulo sólido.

Con esto, llegamos a que:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\rho}{\sin\theta} \left| \frac{d\rho}{d\theta} \right| \quad (2)$$

Si deseamos conocer en términos de mecánica cuántica lo que sucede, debemos estudiar la evolución en el tiempo de un paquete de ondas. Sea ahora F_i el flujo de partículas del haz incidente, es decir, el número de partículas por unidad de tiempo que atraviesan una superficie unitari perpendicular al eje. Colocamos un detector lejos de la región de influencia del potencial, y que subtende un ángulo sólido $d\Omega$; con esto, podemos contar el número de partículas dn dispersadas por unidad de tiempo en $d\Omega$ en la dirección (θ, φ) .

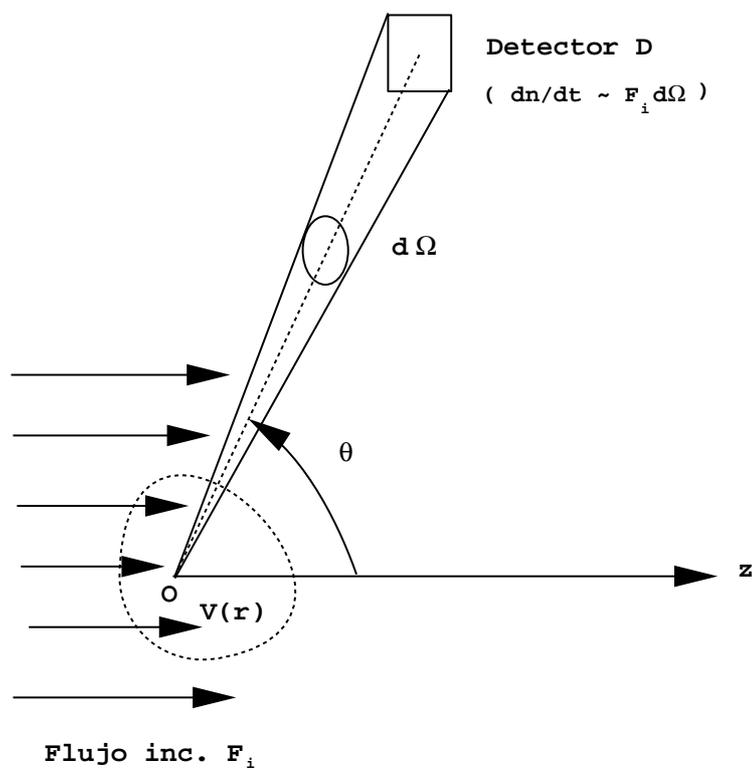


Fig. 7.1

dn es proporcional a $d\Omega$ y a F_i . Llamaremos $\sigma(\theta, \varphi)$ al coeficiente de proporcionalidad entre dn y $F_i d\Omega$:

$$dn = \sigma(\theta, \varphi) F_i d\Omega, \quad (3)$$

esta es la llamada sección diferencial transversal.

El número de partículas por unidad de tiempo que alcanzan el detector es igual al número de partículas que cruzarían una superficie $\sigma(\theta, \varphi) d\Omega$ colocada perpendicular al eje del haz. La sección total de dispersión se define por:

$$\sigma = \int \sigma(\theta, \varphi) d\Omega \quad (4)$$

Ya que podemos orientar los ejes de coordenadas a nuestra elección, lo haremos de tal forma que el eje del haz incidente de partículas coincida con, digamos, el eje z (por simplicidad en los cálculos, donde usaremos coordenadas esféricas).

En la región negativa del eje, para t negativo grande, la partícula será prácticamente libre: no se verá afectada por $V(\mathbf{r})$, y su estado se puede representar por ondas planas, por lo tanto la función de onda debe contener términos de la forma e^{ikz} , donde k es la constante que aparece en la ecuación de Helmholtz. Por analogía con óptica, la forma de la onda dispersada es:

$$f(r) = \frac{e^{ikr}}{r} \quad (5)$$

en efecto, pues:

$$(\nabla^2 + k^2)e^{ikr} \neq 0 \quad (6)$$

y

$$(\nabla^2 + k^2)\frac{e^{ikr}}{r} = 0 \quad (7)$$

para $r > r_0$, donde r_0 es cualquier número positivo.

Asumamos que el movimiento de la partícula está descrito por el hamiltoniano:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V = H_0 + V \quad (8)$$

V es diferente de cero sólo para una pequeña vecindad del origen. Sabemos la evolución y descripción de un paquete de ondas en $t = 0$:

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int \varphi(\mathbf{k}) \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)] d^3\mathbf{k} \quad (9)$$

donde, como ya se sabe, ψ es una función de ancho $\Delta\mathbf{k}$, centrada alrededor de \mathbf{k}_0 . Asumimos también que \mathbf{k}_0 es paralela a \mathbf{r}_0 pero en dirección opuesta. Para averiguar que sucede con el paquete de onda—que es lo que nos interesa—cuando en un tiempo posterior el paquete ha chocado con el blanco y ha sido dispersado por éste, podemos valernos de la expansión de $\psi(\mathbf{r}, 0)$ en términos de las eigenfunciones $\psi_n(\mathbf{r})$, de H . Así, podemos expandir: $\psi(\mathbf{r}, 0) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{r})$. De esta forma, el paquete de onda al tiempo t es:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n \varphi_n(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right). \quad (10)$$

Esta es una eigenfunción del operador H_0 y no de H , pero podemos sustituir estas eigenfunciones por eigenfunciones particulares de H , que designaremos por $\psi_k^{(+)}(\mathbf{r})$. La forma asintótica de estas últimas son de la forma:

$$\psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) \simeq e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \mathbf{f}(\mathbf{r}) \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{r}, \quad (11)$$

donde, como es usual, $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ y $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

Esto corresponde a una onda plana para el haz incidente, y otra onda esférica divergente, como resultado de la interacción entre el haz y el blanco. Estas soluciones de la ecuación de Schrödinger existen en realidad, y podemos expandir $\psi(\mathbf{r}, 0)$ en términos de ondas planas o en términos de $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$:

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \int \varphi(\mathbf{k}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_0) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3k \quad (12)$$

donde $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

Esto puede verse entonces como que la onda esférica divergente no tiene contribución alguna al paquete de ondas inicial.

Dispersión

Al viajar la onda, necesariamente sufre una dispersión, de manera que aquí no podemos ya pasar por alto el efecto de la onda divergente, pero podemos usar lo siguiente:

$$\omega = \frac{\hbar}{2m} k^2 = \frac{\hbar}{2m} [\mathbf{k}_0 + (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)]^2 = \frac{\hbar}{2m} [2\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{k} - \mathbf{k}_0^2 + (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2], \quad (13)$$

para poder despreciar el último término del paréntesis, al sustituir ω en la relación para ψ , requerimos que: $\frac{\hbar}{2m} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2 T \ll 1$, donde $T \simeq \frac{2mr_0}{\hbar k_0}$, con lo que obtenemos:

$$\frac{(\Delta k)^2 r_0}{k_0} \ll 1 \quad (14)$$

Esta condición implica que el paquete de onda no se dispersa de manera apreciable al desplazarse una distancia macroscópica r_0 .

Escogiendo la dirección del vector \mathbf{k} de la onda incidente alineado con el sistema de coordenadas esféricas, podemos escribir:

$$\psi_k(r, \theta, \varphi) \simeq e^{ikz} + \frac{f(k, \theta, \varphi)e^{ikr}}{r}$$

Ya que H , el operador hamiltoniano (que hemos considerado hasta ahora no como operador, pero cuyos resultados son los mismos) es invariante ante rotaciones en el eje z , podemos escoger condiciones de frontera que también sean invariantes, de manera que:

$$\psi_k(r, \theta, \varphi) \simeq e^{ikz} + \frac{f(\theta)e^{ikr}}{r}$$

estas se conocen como funciones de onda de choque. El coeficiente $f(\theta)$ se conoce como amplitud de choque.

Amplitud de probabilidad

Recordemos ahora la ecuación de Schrödinger a resolver:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r}, t)\psi \quad (15)$$

Y, tenemos

$$P(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (16)$$

se interpreta, de acuerdo a Max Born, como una densidad de probabilidad. Esta función de onda debe estar normalizada de manera tal que:

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = 1. \quad (17)$$

El coeficiente de normalización de ψ , y la integral de normalización deben ser independientes del tiempo, si ha de cumplir con la ecuación de Schrödinger. Esto lo podemos notar de la siguiente manera:

$$I = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} P(\mathbf{r}, t) d^3 r = \int_{\Omega} (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi) d^3 r \quad (18)$$

de la ecuación de Schrödinger:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \psi - \frac{i}{\hbar} V(\mathbf{r}, t) \psi \quad (19)$$

entonces:

$$\begin{aligned} I &= \frac{i\hbar}{2m} \int_{\Omega} [\psi^* \nabla^2 - (\nabla^2 \psi^*) \psi] d^3 r = \frac{i\hbar}{2m} \int_{\Omega} \nabla \cdot [\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi] d^3 r = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int_A [\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi]_n dA \end{aligned} \quad (20)$$

donde se ha usado el teorema de Green para evaluar la integral sobre el volumen. A es la superficie que limita la región de integración y $[]_n$ denota la componente en la dirección normal a la superficie dA .

Definiendo:

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} [\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi] \quad (21)$$

obtenemos:

$$I = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} P(\mathbf{r}, t) d^3 r = - \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{S} d^3 r = - \int_A S_n dA \quad (22)$$

para paquetes de onda en los que ψ se hace cero a grandes distancias y la integral de normalización converge, la integral de superficie es cero cuando Ω es todo el espacio. Se puede demostrar (vease P. Dennery y A. Krzywicki, *Mathematical methods for physicists*) que la integral de superficie

es cero, de manera que la integral de normalización es constante en el tiempo, y se cumple el requerimiento inicial. De la misma ecuación para \mathbf{S} obtenemos:

$$\frac{\partial P(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (23)$$

esto nos recuerda la ecuación de continuidad de electrodinámica, en este caso con un flujo de densidad P y corriente de densidad \mathbf{S} , sin fuentes o sumideros. Así, es razonable interpretar \mathbf{S} como una densidad de corriente de probabilidad. Por semejanza con la electrodinámica, $\frac{\hbar}{im}\nabla$ es el operador velocidad y:

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}, t) = \text{Re}(\psi^* \frac{\hbar}{im} \nabla \psi) \quad (24)$$

Función de Green en teoría de dispersión

Otra forma de escribir la ecuación de Schrödinger a resolver es $(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V)\psi = E\psi$ o $(\nabla^2 + k^2)\psi = U\psi$ donde: $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, y $U = \frac{2mV}{\hbar^2}$.

Resulta mas conveniente transformar esta ecuación a una de forma integral. Esto podemos hacerlo si consideramos a $U\psi$ del lado derecho de la ecuación como una inhomogeneidad, y de esta manera una solución de la ecuación se construye con las funciones de Green, por medio de:

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (25)$$

entonces, una solución a la ecuación de Schrödinger, se obtendrá de la suma de la solución a la ecuación homogénea y la solución a la parte inhomogénea:

$$\psi(\mathbf{r}) = \lambda(\mathbf{r}) - \int \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{U}(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \mathbf{d}^3 \mathbf{r}' \quad (26)$$

Buscamos una función G que sea producto de funciones linealmente independientes, como lo son las ondas planas:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int A(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d\mathbf{q} \quad (27)$$

usando la ecuación 25:

$$\int A(\mathbf{q})(k^2 - q^2) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d\mathbf{q} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (28)$$

lo cual se cumple como identidad si:

$$A(\mathbf{q}) = (2\pi)^{-3} (k^2 - q^2)^{-1} \quad (29)$$

de lo que resulta:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}}}{k^2 - q^2} d^3q, \quad (30)$$

con $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Tras un cálculo usando los métodos de variable compleja ¹¹, llegamos a:

$$G(r) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \quad (31)$$

Ésta función no está determinada de manera unívoca; la función de Green puede ser cualquier solución de la ecuación 25 y existen una infinidad de ellas; por lo tanto, la elección de una en particular impone condiciones a la frontera sobre las eigenfunciones $\psi_k(\mathbf{r})$.

La función de Green obtenida es por lo tanto de la forma:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\left(\frac{e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) \quad (32)$$

¹¹Véase el problema 7.1

De esta forma, llegamos a la ecuación integral para la función de onda de choque:

$$\psi(k, \mathbf{r}) = \varphi(k, \mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') \psi(k, \mathbf{r}) d\mathbf{r}' , \quad (33)$$

donde φ es una solución de la ecuación de Helmholtz. Haciendo: $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = R$,

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = (\nabla^2 + k^2)[\varphi + \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 r'] \quad (34)$$

asumiendo que podemos intercambiar el orden y poner el operador ∇ dentro de la integral:

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = \int (\nabla^2 + k^2) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 r' = U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (35)$$

y se verifica entonces que $G(R) = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikR}}{R}$ es solución.

Teorema óptico

La sección diferencial total está dada por:

$$\sigma_{tot}(k) = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (36)$$

Expresamos ahora $f(\theta)$ expresada en términos del corrimiento de fase $S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}$ de

forma que:

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k) P_l(\cos \theta) \quad (37)$$

entonces

$$\sigma_{tot} = \int \left[\frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k) P_l(\cos \theta) \right] \left[\frac{1}{k} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l'+1) e^{i\delta_{l'}(k)} \sin \delta_{l'}(k) P_{l'}(\cos \theta) \right] . \quad (38)$$

Usando ahora $\int P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{ll'}$ obtenemos

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) . \quad (39)$$

Lo que aquí nos interesa es que:

$$\text{Im}f(0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \text{Im}[e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k)] P_l(1) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) = \frac{k}{4\pi} \sigma_{tot} \quad (40)$$

Esta relación es conocida como el *teorema óptico*. Su significado físico es que la interferencia de la onda incidente con la onda dispersada en ángulo cero produce la salida de la partícula de la onda incidente, lo que permite la conservación de la probabilidad.

Aproximación de Born

Consideremos la siguiente situación (Fig. 7.2).

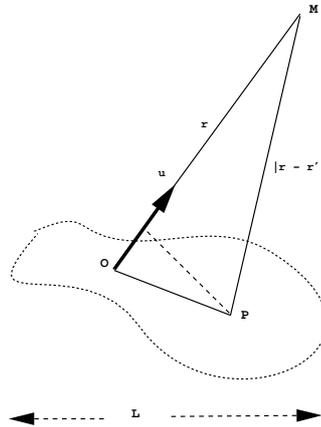


Fig. 7.2

Nos situamos en un punto muy alejado de P, que corresponde a la región de influencia del potencial U , y $r \gg L$ $r' \ll l$. La longitud MP, que corresponde a $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ es aproximadamente igual a la proyección de MP en MO:

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \simeq r - \mathbf{u} \cdot \mathbf{r}' \quad (41)$$

donde \mathbf{u} es el vector unitario en la dirección \mathbf{r} . Entonces, para r grande:

$$G = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ik\mathbf{u}\cdot\mathbf{r}} . \quad (42)$$

Sustituimos ahora en la expresión integral para la función de onda de choque, y obtenemos:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-ik\mathbf{u}\cdot\mathbf{r}} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 r' . \quad (43)$$

Esta ya no es una función de la distancia $r = OM$, sino solamente de θ y ψ , y entonces:

$$f(\theta, \psi) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-ik\mathbf{u}\cdot\mathbf{r}} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 r' \quad (44)$$

Definimos ahora el vector de onda incidente \mathbf{k}_i como un vector de módulo k dirigido a lo largo del eje polar del haz tal que: $e^{ikz} = e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}}$; de manera similar, \mathbf{k}_d , con módulo k y con dirección fijada por θ y φ se llama vector de onda desplazada en la dirección (θ, φ) : $\mathbf{k}_d = k\mathbf{u}$

El vector de onda transferido en la dirección (θ, φ) se define como: $\mathbf{K} = \mathbf{k}_d - \mathbf{k}_i$

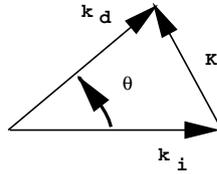


Fig. 7.3

Con esto, podemos escribir la ecuación integral de dispersión como:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}} + \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 r' \quad (45)$$

Ahora podemos intentar resolver esta ecuación por iteración. Hacemos el cambio $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$; $\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}''$ y con esto escribimos:

$$\psi(\mathbf{r}') = e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}'} + \int G(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') \psi(\mathbf{r}'') d^3 r'' \quad (46)$$

Sustituyendo esta expresión en 45 obtenemos:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'} d^3 r' + \int \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') \psi(\mathbf{r}'') d^3 r'' d^3 r' \quad (47)$$

Los dos primeros términos de lado derecho de la ecuación son conocidos y solamente el tercero contiene la función desconocida $\psi(\mathbf{r})$. Podemos repetir este procedimiento: cambiando \mathbf{r} por \mathbf{r}'' y \mathbf{r}' por \mathbf{r}''' nos da $\psi(\mathbf{r}'')$ la cual podemos reinsertar en la ecuación 47 con esto obtenemos:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'} + \int \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}''} d^3 r'' d^3 r' \\ + \int \int \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'''} G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') U(\mathbf{r}''') \psi(\mathbf{r}''') . \end{aligned} \quad (48)$$

Los primeros tres términos son conocidos; la función desconocida $\psi(\mathbf{r})$ se ha ido hasta el cuarto término. De esta forma, por iteración construimos la función de onda de dispersión estacionaria. Notese que cada término de la expansión lleva una potencia mayor del potencial que la que le precede. Podemos continuar de esta forma hasta obtener una expresión despreciable del lado derecho, y obtenemos $\psi(\mathbf{r})$ en términos de cantidades conocidas.

Sustituyendo la expresión de $\psi(\mathbf{r})$ en $f(\theta, \varphi)$ obtenemos la expansión de Born de la amplitud de dispersión. Limitandonos al primer orden en U , todo lo que hay que hacer es sustituir $\psi(\mathbf{r}')$ por $e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'}$ en el lado derecho de la ecuación, con esto obtenemos:

$$f^{(B)}(\theta, \varphi) = \frac{-1}{4\pi} \int e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{k}_d \cdot \mathbf{r}'} d^3 r' = \frac{-1}{4\pi} \int e^{-i(\mathbf{k}_d - \mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') d^3 r' = \frac{-1}{4\pi} \int e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') d^3 r' \quad (49)$$

\mathbf{K} es el vector de onda dispersada definido anteriormente. La sección de dispersión se relaciona entonces de manera muy sencilla a la transformada de Fourier del potencial, recordando: $V(\mathbf{r}) =$

$\frac{\hbar^2}{2m}U(\mathbf{r})$, y $\sigma(\theta, \varphi) = |f(\theta, \varphi)|^2$ tenemos que:

$$\sigma^{(B)}(\theta, \varphi) = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d^3r \right|^2 \quad (50)$$

La dirección y módulo del vector de onda dispersada \mathbf{K} depende del módulo k de \mathbf{k}_i y \mathbf{k}_d y de la dirección de dispersión (θ, φ) . Para un θ y φ , la sección eficaz varía con k , la energía del haz incidente, y de manera análoga, con una energía dada $\sigma^{(B)}$ varía con θ y φ . Con esta aproximación de Born estudiando la variación de la sección diferencial eficaz en términos de la dirección de dispersión y la energía incidente nos dá información del potencial $V(\mathbf{r})$.

Notas: Uno de los primeros trabajos de dispersión cuántica es:

M. Born, "Quantenmechanik der Stossvorgänge", Zf. f. Physik **37**, 863-867 (1926)

P r o b l e m a s

Problema 7.1

Cálculo por medio de variable compleja de la función de Green

Recuérdese que obtuvimos:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{iqR}}{k^2 - q^2} d^3q, \text{ con } R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|. \text{ Ya que } d^3q = q^2 \sin \theta dq d\theta d\phi, \text{ llegamos,}$$

después de la integración angular, a que:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{i}{4\pi^2 R} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(e^{-iqR} - e^{iqR})}{k^2 - q^2} q dq.$$

Hacemos: $C = \frac{i}{4\pi^2 R}$; y dividimos la integral en dos partes:

$$C \left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-iqR}}{k^2 - q^2} q dq - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{iqR}}{k^2 - q^2} q dq \right).$$

Hacemos ahora $q \rightarrow -q$ en la primera integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i(-q)R}}{k^2 - (-q)^2} (-q) d(-q) = \int_{\infty}^{-\infty} \frac{e^{iqR}}{k^2 - q^2} q dq = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{iqR}}{k^2 - q^2} q dq$$

por lo que:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -2C \left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{q e^{iqR}}{k^2 - q^2} dq \right)$$

sustituyendo C , obtenemos:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{-i}{2\pi^2 R} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{q e^{iqR}}{k^2 - q^2} dq$$

Ahora, esta integral podemos evaluarla por los residuos que posee, usando los métodos de variable compleja. Notamos que existen polos simples en $q = \pm k$.

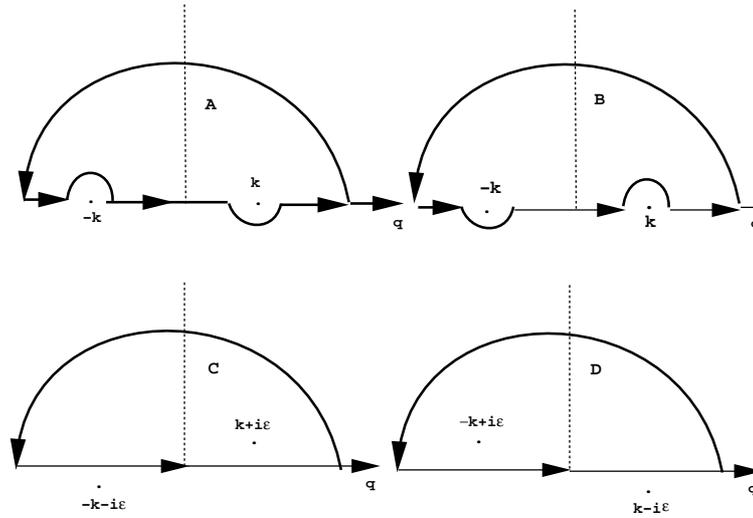


Fig. 7.4: Reglas de camino alrededor de los polos para G_+ y G_- .

Usamos el contorno mostrado en la figura 7.4, el cual rodee a los polos de la manera señalada, lo cual dará el efecto físico buscado, pues notemos que, de acuerdo al teorema del residuo,

$$G(r) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \quad (\text{Im}k > 0),$$

$$G(r) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-ikr}}{r} \quad (\text{Im}k < 0)$$

La solución que nos interesa es la primera, porque dá ondas dispersadas *divergentes*, mientras que la otra solución representa ondas dispersadas convergentes, y aún más, la combinación lineal

$$\frac{1}{2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} [G_{k+i\epsilon} + G_{k-i\epsilon}] = -\frac{1}{4\pi} \frac{\cos kr}{r}$$

corresponde a ondas estacionarias.

La evaluación formal de la integral se puede hacer tomando $k^2 - q^2 \rightarrow k^2 + i\epsilon - q^2$, de tal manera que: $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{qe^{iqR}}{k^2 - q^2} dq \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \frac{qe^{iqR}}{(k^2 + i\epsilon) - q^2} dq$.

Esto es posible porque $R > 0$, de manera que el contorno a calcular estará en el semiplano complejo superior. Así, los polos del integrando están en: $q = \pm \sqrt{k^2 + i\epsilon} \simeq \pm (k + \frac{i\epsilon}{2k})$. El proceso

límite cuando $\epsilon \rightarrow 0$ debe hacerse *después* de la evaluación de la integral.

Problema 7.2

Forma asintótica de la expresión radial

Como ya se vió antes¹², la parte radial de la ecuación de Schrödinger se puede escribir como:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr}\right) R_{nlm}(r) - \frac{2m}{\hbar^2} [V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}] R_{nlm}(r) + \frac{2mE}{\hbar^2} R_{nlm}(r) = 0$$

n, l, m son los números cuánticos. De aquí en adelante se eliminarán por comodidad, y donde se

sabe que R depende sólo de r . Asumiremos que los potenciales decaen a cero mas rápido que $1/r$,

y: $\lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) = 0$.

Usamos ahora $u(r) = rR$, y como: $\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr}\right) \frac{u}{r} = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} u$ tenemos que

$$\frac{d^2}{dr^2} u + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}] u = 0 .$$

Nótese que el potencial ahora tiene un término mas:

$$V(r) \rightarrow V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$$

que corresponde a una barrera repulsiva centrífuga. Para una partícula libre $V(r) = 0$ y la ecuación

toma la forma

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R + k^2 R = 0 .$$

Introduciendo la variable $\rho = kr$, obtenemos

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R + R = 0 .$$

Las soluciones a esta ecuación son las llamadas *funciones esféricas de Bessel*. La solución

regular es:

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho}\right)^l \left(\frac{\sin \rho}{\rho}\right)$$

¹²Véase *El átomo de hidrógeno*, Edgar A. Anell

y la solución irregular:

$$n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho}\right)^l \left(\frac{\cos \rho}{\rho}\right)$$

Para ρ grande, las funciones de interés son las funciones esféricas de Hankel:

$$h_l^{(1)}(\rho) = j_l(\rho) + in_l(\rho) \text{ y}$$

$$h_l^{(2)}(\rho) = [h_l^{(1)}(\rho)]^*$$

De especial interés es el comportamiento para $\rho \gg l$, cuyo comportamiento asintótico es:

$$\begin{aligned} j_l(\rho) &\simeq \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right) \\ n_l(\rho) &\simeq -\frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right) \end{aligned} \quad (51)$$

y entonces

$$h_l^1 \simeq -\frac{i}{\rho} e^{i(\rho - l\pi/2)}$$

La solución regular en el origen es: $R_l(r) = j_l(kr)$

La forma asintótica es, usando la ecuación 51

$$R_l(r) \simeq \frac{1}{2ikr} [e^{-ikr - l\pi/2} - e^{ikr - l\pi/2}] .$$

Problema 7.3

La aproximación de Born para potencial de Yukawa

Consideramos un potencial de la forma:

$$V(\mathbf{r}) = V_0 \frac{e^{-\alpha r}}{r} \quad (52)$$

con V_0 y α constantes reales y α positiva. El potencial es atractivo o repulsivo dependiendo de si

V_0 es negativo o positivo; entre mas grande $|V_0|$, mas intenso el potencial. Asumimos que $|V_0|$ es

suficientemente pequeño para que la aproximación de Born sea válida. De acuerdo a la fórmula ya

obtenida antes en el apartado de amplitud de probabilidad, la amplitud de dispersión está dada

por:

$$f^{(B)}(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2mV_0}{\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \frac{e^{-\alpha r}}{r} d^3r .$$

Como este potencial depende sólo de r las integraciones angulares pueden hacerse fácilmente,

y llegamos a la forma:

$$f^{(B)}(\theta, \varphi) = \frac{1}{4\pi} \frac{2mV_0}{\hbar^2} \frac{4\pi}{|\mathbf{K}|} \int_0^\infty \sin |\mathbf{K}|r \frac{e^{-\alpha r}}{r} r dr .$$

Con esto llegamos a:

$$f^{(B)}(\theta, \varphi) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} \frac{1}{\alpha^2 + |\mathbf{K}|^2} .$$

De la figura se observa que: $|\mathbf{K}| = 2k \sin \frac{\theta}{2}$; por lo tanto:

$$\sigma^{(B)}(\theta) = \frac{4m^2 V_0^2}{\hbar^4} \frac{1}{[\alpha^2 + 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}]^2} .$$

La sección de dispersión total se obtiene por integración:

$$\sigma^{(B)} = \int \sigma^{(B)}(\theta) d\Omega = \frac{4m^2 V_0^2}{\hbar^4} \frac{4\pi}{\alpha^2(\alpha^2 + 4k^2)} .$$

8. LAS ONDAS PARCIALES

Explicamos brevemente en que consiste el método de ondas parciales en el estudio de problemas de dispersión.

Introducción.

El problema de dispersión desde el punto de vista cuántico, consiste en tratar a una partícula que interacciona con otra llamada dispersor (en la presente exposición supondremos que el dispersor siempre se encuentra fijo) en una región muy pequeña del espacio. Fuera de esta región, la interacción entre ambas partículas es despreciable. De esta manera es posible describir a la partícula dispersada por el siguiente Hamiltoniano:

$$H = H_0 + V \quad (1)$$

Donde H_0 corresponde al hamiltoniano para la partícula libre. Entonces nuestro problema consiste en resolver la siguiente ecuación:

$$(H_0 + V) | \psi \rangle = E | \psi \rangle \quad (2)$$

Es evidente que el espectro será continuo (estamos tratando el caso de dispersión elástica).

La solución a la ecuación anterior está dada por:

$$| \psi \rangle = \frac{1}{E - H_0} V | \psi \rangle + | \phi \rangle \quad (3)$$

De un ligero análisis podemos ver que en el caso que $V = 0$ obtenemos la solución: $| \phi \rangle$, es decir, la solución correspondiente al caso de la partícula libre. Hay que notar que el operador $\frac{1}{E - H_0}$ en cierto sentido es anómalo, pues tiene un continuo de polos en el eje real que coinciden con los

valores propios de H_0 , para “librarnos” de ese problema induscamos un pequeño desplazamiento de el corte que yace sobre el eje real, de esta manera tenemos:

$$|\psi^\pm\rangle = \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} V |\psi^\pm\rangle + |\phi\rangle \quad (4)$$

La ecuación anterior es conocida como la ecuación de Lippmann-Schwinger. Al final el desplazamiento de los polos será en el sentido positivo de el eje imaginario (para que el principio de causalidad no se viole [según Feynman]). Tomemos la x-representación:

$$\langle \mathbf{x} | \psi^\pm \rangle = \langle \mathbf{x} | \phi \rangle + \int d^3x' \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle \langle \mathbf{x}' | V | \psi^\pm \rangle \quad (5)$$

En el primer término del lado derecho de la ecuación anterior vemos que corresponde a una partícula libre y el segundo término se interpreta como una onda esférica que emerge del dispersor. El kernel de la integral anterior lo podemos asociar con una función de Green o propagador y es muy sencillo calcular:

$$G_\pm(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}, \quad (6)$$

donde $E = \hbar^2 k^2 / 2m$. Como veíamos anteriormente la función de onda la podemos escribir como una onda plana más una onda esférica que emana del dispersor (salvo un factor constante):

$$\langle \mathbf{x} | \psi^+ \rangle = e^{\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (7)$$

A la cantidad $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ que aparece en la ecuación 7 se le conoce como amplitud de dispersión y explícitamente la podemos escribir como:

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | V | \psi^+ \rangle \quad (8)$$

Definamos ahora un operador T tal que:

$$T | \phi \rangle = V | \psi^+ \rangle \quad (9)$$

Si multiplicamos la ecuación de Lippman-Schwinger por V y a partir de la definición anterior obtenemos:

$$T | \phi \rangle = V | \phi \rangle + V \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} T | \phi \rangle \quad (10)$$

Así iterando la ecuación anterior (como en teoría de perturbaciones) podemos obtener la aproximación de Born y sus correcciones de orden superior.

El método de ondas parciales.

Ahora consideremos el caso de un potencial central no nulo. Entonces de la definición (9) del operador T se deduce que conmuta con \vec{L}^2 y con \vec{L} de ahí que se diga que T es un operador escalar. De esta manera para facilitar los cálculos es conveniente utilizar coordenadas esféricas, puesto que dada la simetría, el operador T será diagonal. Ahora veamos que forma adquiere la expresión (8) para la amplitud de dispersión:

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \sum_l \sum_m \sum_{l'} \sum_{m'} \int dE \int dE' \langle \mathbf{k}' | E' l' m' \rangle \langle E' l' m' | T | Elm \rangle \langle Elm | \mathbf{k} \rangle \quad (11)$$

después de algunos cálculos podemos obtener:

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{4\pi^2}{k} \sum_l \sum_m T_l(E) Y_l^m(\mathbf{k}') Y_l^{m*}(\mathbf{k}) \quad (12)$$

Escogiendo el sistema de coordenadas tal que \mathbf{k} tenga la misma dirección que el eje orientado z , de esta manera a la amplitud de dispersión únicamente contribuirán los armónicos esféricos con

m igual a cero; si definimos que θ sea el ángulo entre \mathbf{k} y \mathbf{k}' tenemos:

$$Y_l^0(\mathbf{k}') = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta) \quad (13)$$

hagamos la siguiente definición:

$$f_l(k) \equiv -\frac{\pi T_l(E)}{k} \quad (14)$$

así la ecn. (12) se puede escribir de la siguiente manera:

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\cos\theta) \quad (15)$$

A la cantidad $f_l(k)$ le podemos dar una interpretación sencilla a partir del desarrollo de una onda plana en ondas esféricas, veamos el comportamiento de la función $\langle \mathbf{x} | \psi^+ \rangle$ para grandes valores de r , que como ya habíamos establecido previamente debe tener la forma:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | \psi^+ \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right] = \\ \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} &\left[\sum_l (2l+1) P_l(\cos\theta) \left(\frac{e^{ikr} - e^{i(kr-l\pi)}}{2ikr} \right) + \sum_l (2l+1) f_l(k) P_l(\cos\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right] = \\ \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} &\sum_l (2l+1) \frac{P_l(\cos\theta)}{2ik} \left[[1 + 2ik f_l(k)] \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{i(kr-l\pi)}}{r} \right] \end{aligned} \quad (16)$$

La ecuación anterior la podemos interpretar de la manera siguiente. Los dos términos exponenciales corresponden a ondas esféricas, el primero a una onda emergente y el segundo a una onda convergente; y el efecto de la dispersión se ve en el coeficiente de la onda emergente, y es igual a uno cuando no existe un dispersor.

Corrimientos de fase

Imaginemos ahora una superficie cerrada centrada en el dispersor, si asumimos que no hay creación ni aniquilación de partículas se verifica:

$$\int \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S} = 0 \quad (17)$$

Donde la región de integración es evidentemente la superficie anteriormente definida y \mathbf{j} es la densidad de corriente de probabilidad. Aún más, debido a la conservación del momento angular la ecuación anterior debe verificarse para cada onda parcial (en otras palabras, todas las ondas parciales tienen diferentes valores de las proyecciones del momento angular, lo cual las hace en esencia diferentes y la formulación sería equivalente si tratáramos al paquete de ondas como un haz de partículas que no interactúan entre sí; más aún, debido a que el potencial de nuestro problema es central el momento angular de cada “partícula” se conservará de tal manera que podríamos decir que las partículas continúan siendo las mismas). Por las consideraciones anteriores, podemos decir que tanto la onda divergente como la emergente difieren a lo mucho en un factor de fase, es decir, si definimos:

$$S_l(k) \equiv 1 + 2ik f_l(k) \quad (18)$$

deberá suceder que

$$|S_l(k)| = 1 \quad (19)$$

Los resultados anteriores los podemos interpretar en vista de la conservación de las probabilidades, y era de esperarse pues hemos supuesto que no existe creación ni aniquilación de partículas, así que la influencia del dispersor consiste en agregar simplemente un factor de fase en las componentes de la onda emergente, en virtud de la unitariedad del factor de fase lo podemos escribir

como:

$$S_l = e^{2i\delta_l} \quad (20)$$

Donde δ_l es real y es función de k . A partir de la definición (18) podemos escribir:

$$f_l = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} = \frac{e^{i\delta_l} \sin(\delta_l)}{k} = \frac{1}{k \cot(\delta_l) - ik} \quad (21)$$

La sección total de dispersión adquiere la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \sigma_{total} &= \int |f(\theta)|^2 d\Omega = \\ &= \frac{1}{k^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos(\theta)) \sum_l \sum_{l'} (2l+1)(2l'+1) e^{i\delta_l} \sin(\delta_l) e^{i\delta_{l'}} \sin(\delta_{l'}) P_l P_{l'} \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2(\delta_{l'}) \end{aligned} \quad (22)$$

Determinación de los corrimientos de fase.

Consideremos ahora un potencial V tal que V se anula para $r > R$, el parámetro R se le conoce como el “alcance del potencial”, así que en la región $r > R$ evidentemente debe corresponder a una onda esférica libre. Por otro lado la forma más general de la expansión de una onda plana en ondas esféricas es de la forma:

$$\langle \mathbf{x} | \psi^+ \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_l i^l (2l+1) A_l(r) P_l(\cos \theta) \quad (r > R) \quad (23)$$

Donde el coeficiente A_l está definido como:

$$A_l = c_l^{(1)} h_l^{(1)}(kr) + c_l^{(2)} h_l^{(2)}(kr) \quad (24)$$

donde $h_l^{(1)}$ y $h_l^{(2)}$ son las funciones de Hankel esféricas y sus formas asintóticas están dadas

por:

$$h_l^{(1)} \sim \frac{e^{i(kr-l\pi/2)}}{ikr}$$

$$h_l^{(2)} \sim -\frac{e^{-i(kr-l\pi/2)}}{ikr}$$

Al ver la forma asintótica de la expresión (23):

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_l (2l+1) P_l \left[\frac{e^{ikr}}{2ikr} - \frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{2ikr} \right] \quad (25)$$

De esta manera vemos que:

$$c_l^{(1)} = \frac{1}{2} e^{2i\delta_l} \quad c_l^{(2)} = \frac{1}{2} \quad (26)$$

Ahora podemos ver que la función de onda radial para $r > R$ se escribe como:

$$A_l = e^{2i\delta_l} [\cos \delta_l j_l(kr) - \sin \delta_l n_l(kr)] \quad (27)$$

A partir de ecuación anterior podemos evaluar su derivada logarítmica en $r=R$, i.e., justo afuera del alcance del potencial:

$$\beta_l \equiv \left(\frac{r}{A_l} \frac{dA_l}{dr} \right)_{r=R} = kR \left[\frac{j_l' \cos \delta_l - n_l'(kR) \sin \delta_l}{j_l \cos \delta_l - n_l(kR) \sin \delta_l} \right] \quad (28)$$

Donde j_l' es la derivada de j_l con respecto a kr y evaluada en $r = R$. Otro resultado importante que podemos obtener conociendo el resultado anterior es el corrimiento de fase:

$$\tan \delta_l = \frac{kR j_l'(kR) - \beta_l j_l(kR)}{kR n_l'(kR) - \beta_l n_l(kR)} \quad (29)$$

Para encontrar la solución completa a nuestro problema aún hay que hacer los cálculos para cuando $r < R$, es decir, dentro del rango del alcance del potencial. Para el caso de un potencial central la solución a la ecuación de Schrödinger en tres dimensiones la solución se reduce a resolver la ecuación:

$$\frac{d^2 u_l}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_l = 0 \quad (30)$$

donde $u_l = rA_l(r)$ y está sujeto a la condición de frontera $u_l|_{r=0} = 0$ de esta manera ya podemos calcular la derivada logarítmica, la cual por la propiedad de continuidad de la derivada logarítmica (que es equivalente a la continuidad de la derivada en un punto de discontinuidad):

$$\beta_l|_{dentro} = \beta_l|_{fuera} \quad (31)$$

Un ejemplo: dispersión por una esfera sólida.

Ahora tratemos un caso específico. Consideremos un potencial definido como:

$$V = \begin{cases} \infty & r < R \\ 0 & r > R \end{cases} \quad (32)$$

Es sabido que una partícula no puede penetrar en una región donde el potencial sea infinito, así que la función de onda se deberá anular en $r = R$; de que la esfera es impenetrable también se deduce que:

$$A_l(r)|_{r=R} = 0 \quad (33)$$

Así de la ecuación (27) tenemos:

$$\tan \delta_l = \frac{j_l(kR)}{n_l(kR)} \quad (34)$$

Vemos que se puede calcular fácilmente el corrimiento de fase para cualquier l . Consideremos ahora el caso $l = 0$ (dispersión de una onda S) de esta forma tenemos:

$$\delta_l = -kR$$

y de la ecuación (27):

$$A_{l=0}(r) \sim \frac{\sin kr}{kr} \cos \delta_0 + \frac{\cos kr}{kr} \sin \delta_0 = \frac{1}{kr} \sin(kr + \delta_0) \quad (35)$$

Vemos que la contribución al movimiento libre es la adición de una fase. Claro que en el caso más general diferentes ondas tendrán diferentes corrimientos de fase ocasionando una distorsión transitoria en el paquete de ondas dispersado. Estudiemos ahora el caso de energías pequeñas, i.e., $kR \ll 1$ en este caso las expresiones para las funciones de Bessel (usadas para escribir las funciones de Hankel esféricas) son las siguientes:

$$j_l(kr) \sim \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!} \quad (36)$$

$$n_l(kr) \sim -\frac{(2l-1)!!}{(kr)^{l+1}} \quad (37)$$

obteniendo así la expresión:

$$\tan \delta_l = \frac{-(kR)^{2l+1}}{(2l+1)[(2l-1)!!]^2} . \quad (38)$$

De la fórmula anterior podemos ver que la contribución apreciable al corrimiento de fase es principalmente de ondas con $l = 0$, pero como $\delta_0 = -kR$ tenemos para la sección eficaz de dispersión:

$$\sigma_{total} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = 4\pi R^2 \quad (39)$$

Vemos que la sección eficaz cuántica es cuatro veces mayor que la sección eficaz clásica, y coincide con el área total de la esfera. Para grandes valores de la energía del paquete incidente conjeturemos que todos los valores de l hasta un valor máximo $l_{max} \sim kR$ contribuyen a la sección eficaz total.

$$\sigma_{total} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l \sim kR} (2l+1) \sin^2 \delta_l . \quad (40)$$

De esta forma a partir de la ecuación (34) tenemos:

$$\sin^2 \delta_l = \frac{\tan^2 \delta_l}{1 + \tan^2 \delta_l} = \frac{[j_l(kR)]^2}{[j_l(kR)]^2 + [n_l(kR)]^2} \sim \sin^2 \left(kR - \frac{l\pi}{2} \right) . \quad (41)$$

Aquí hemos utilizado las expresiones:

$$j_l(kr) \sim \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)$$

$$n_l(kr) \sim -\frac{1}{kr} \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)$$

vemos que δ_l decrece en $\frac{\pi}{2}$ cada vez que l se incrementa en una unidad, así es evidente que se cumple $\sin^2\delta_l + \sin^2\delta_{l+1} = 1$, y aproximando $\sin^2\delta_l$ por su valor promedio $\frac{1}{2}$, así es sumamente sencillo obtener el resultado de la suma anterior, y la fórmula para la sección eficaz total es:

$$\sigma_{total} = \frac{4\pi}{k^2} (kR)^2 \frac{1}{2} = 2\pi R^2 \quad (42)$$

Una vez más el resultado del cálculo utilizando mecánica cuántica difiere del resultado clásico, pero veamos cuál es el origen del factor 2; primero a la ecuación (15) la vamos a separar en dos partes:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{l=kR} (2l+1) e^{2i\delta_l} P_l \cos(\theta) + \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{l=kR} (2l+1) P_l \cos(\theta) = f_{\text{reflexión}} + f_{\text{sombra}} \quad (43)$$

evaluando $\int |f_{\text{reflexión}}|^2 d\Omega$:

$$\int |f_{\text{reflexión}}|^2 d\Omega = \frac{2\pi}{4k^2} \sum_{l=0}^{l_{max}} \int_{-1}^1 (2l+1)^2 [P_l \cos(\theta)]^2 d(\cos \theta) = \frac{\pi l_{max}^2}{k^2} = \pi R^2 \quad (44)$$

Ahora analizando f_{sombra} para ángulos pequeños tenemos:

$$f_{\text{sombra}} \sim \frac{i}{2k} \sum (2l+1) J_0(l\theta) \sim ik \int_0^R b J_0(kb\theta) db = \frac{iR J_1(kR\theta)}{\theta} \quad (45)$$

Esta fórmula es bastante conocida en óptica, es la fórmula de difracción de Fraunhofer;

haciendo el cambio de variable $z = kR\theta$ podemos evaluar la integral $\int |f_{\text{sombra}}|^2 d\Omega$:

$$\int |f_{\text{sombra}}|^2 d\Omega \sim 2\pi R^2 \int_0^\infty \frac{[J_1(z)]^2}{z} dz \sim \pi R^2 \quad (46)$$

Finalmente despreciando la interferencia entre $f_{\text{reflexión}}$ y f_{sombra} (porque la fase oscila entre $2\delta_{l+1} = 2\delta_l - \pi$). De esta manera obtenemos el resultado (42). Hemos etiquetado un término con el nombre de sombra, el origen de esta contribución se explica fácilmente al apelar al comportamiento ondulatorio de la partícula dispersada (en este punto da lo mismo [físicamente] un paquete de ondas que una partícula), tiene su origen en las componentes del paquete dispersadas hacia atrás, entonces tendrán una diferencia de fase con las ondas incidentes y habrá una interferencia destructiva.

Dispersión en un campo de Coulomb

Ahora consideremos un ejemplo clásico y algo complicado: la dispersión de partículas en un campo coulombiano, para este caso la ecuación de Schrödinger es:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \right) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}), \quad E > 0 \quad (47)$$

donde m es la masa reducida de las partículas que interaccionan y evidentemente $E > 0$ debido a que tratamos el caso de dispersión sin creación de estados ligados. La ecuación anterior es equivalente a la siguiente expresión (para valores adecuados de las constantes k y γ):

$$\left(\nabla^2 + k^2 + \frac{2\gamma k}{r} \right) \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (48)$$

Si no consideramos la parte centrífuga del potencial efectivo, es decir, que nos quedamos únicamente con la interacción de un campo de Coulomb puro, por eso podemos proponer una solución de la forma:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \chi(u) \quad (49)$$

con

$$u = ikr(1 - \cos \theta) = ik(r - z) = ikw$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = kz$$

$\psi(\mathbf{r})$ es la solución completa a la ecuación de Schrödinger, y es de esperarse que su comportamiento asintótico conste de dos partes: una tipo onda plana $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$; y otra tipo onda esférica $r^{-1}e^{ikr}$. Definiendo nuevas variables:

$$z = z \quad w = r - z \quad \lambda = \phi$$

y con ayuda de las relaciones anteriores, la ecuación (48) adquiere la forma:

$$\left[u \frac{d^2}{du^2} + (1 - u) \frac{d}{du} - i\gamma \right] \chi(u) = 0 \quad (50)$$

Para resolver la ecuación anterior, primero hay que estudiar sus comportamientos asintóticos, pero como todo eso ya está hecho, la función de onda asintóticas normalizada que se obtiene al final de todos los cálculos anteriores es:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(e^{i[\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \gamma \ln(kr - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})]} + \frac{f_c(\mathbf{k}, \theta) e^{i[kr + \gamma \ln 2kr]}}{r} \right) \quad (51)$$

Como vemos, la función de onda anterior tiene algunos términos que la hacen diferir de manera apreciable a nuestra ecuación (7) y eso se debe a que una fuerza de tipo de Coulomb es de largo alcance. Hacer el cálculo exacto para la amplitud de dispersión de Coulomb es bastante difícil de hacer (de hecho casi todos los cálculos de este problema). Quien logre hacer todos los cálculos para obtener la función de onda normalizada encontrará:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(e^{i[\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \gamma \ln(kr - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})]} + \frac{g_1^*(\gamma)}{g_1(\gamma)} \frac{\gamma}{2k \sin(\theta/2)^2} \frac{e^{i[kr + \gamma \ln 2kr]}}{r} \right) \quad (52)$$

donde $g_1(\gamma) = \frac{1}{\Gamma(1-i\gamma)}$.

El análisis de ondas parciales lo reduciremos a mostrar resultados ya obtenidos de una manera lo más clara posible. Primero escribamos la función de onda (49) $\psi(\mathbf{r})$ de la siguiente manera:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\chi(u) = Ae^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \int_C e^{ut}t^{i\gamma-1}(1-t)^{-i\gamma} dt \quad (53)$$

donde A es una constante de normalización y toda la parte integral es la transformada de Laplace inversa de la transformada directa de la ecuación (50). La ecuación anterior se puede escribir de la siguiente forma:

$$\psi(\mathbf{r}) = A \int_C e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}(1-t)e^{ikrt}(1-t)d(t, \gamma)dt \quad (54)$$

con

$$d(t, \gamma) = t^{i\gamma-1}(1-t)^{-i\gamma-1} \quad (55)$$

Ya en el análisis de ondas parciales procedemos a escribir:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)i^l P_l(\cos \theta) A_l(kr) \quad (56)$$

donde

$$A_l(kr) = A \int_C e^{ikrt} j_l[kr(1-t)](1-t)d(t, \gamma) \quad (57)$$

Y dada la relación que hay entre las funciones de Bessel esféricas con las funciones esféricas de Hankel tenemos:

$$A_l(kr) = A_l^{(1)}(kr) + A_l^{(2)}(kr) \quad (58)$$

La evaluación de los coeficientes anteriores no la vamos a hacer aquí (dada su extensión), nos basta con saber que:

$$A_l^{(1)}(kr) = 0 \quad (59)$$

$$A_l^{(2)}(kr) \sim -\frac{Ae^{\pi\gamma/2}}{2ikr} [2\pi ig_1(\gamma)] \left(e^{-i[kr-(l\pi/2)+\gamma \ln 2kr]} - e^{2i\eta_l(k)} e^{i[kr-(l\pi/2)+\gamma \ln 2kr]} \right) \quad (60)$$

donde

$$e^{2i\eta_l(k)} = \frac{\Gamma(1+l-i\gamma)}{\Gamma(1+l+i\gamma)} \quad (61)$$

Cálculo de la amplitud de dispersión de Coulomb

Si tomamos la transformada de Laplace de la ecuación (50) obtenemos:

$$\chi(u) = A \int_C e^{ut} t^{i\gamma-1} (1-t)^{-i\gamma} dt \quad (62)$$

Donde el contorno C va de $-\infty$ a ∞ y se cierra por arriba del eje real, vemos que hay dos polos: cuando $t = 0$ y $t = 1$. Haciendo el cambio de variables $s = ut$ obtenemos:

$$\chi(u) = A \int_{C_1} e^s s^{i\gamma-1} (u-s)^{-i\gamma} ds \quad (63)$$

$\chi(u)$ debe ser regular en cero y en efecto:

$$\chi(0) = (-1)^{-i\gamma} A \int_{C_1} \frac{e^s}{s} ds = (-1)^{-i\gamma} A 2\pi i \quad (64)$$

Ahora tomando el límite $u \rightarrow \infty$ haciendo un desplazamiento infinitesimal (para quitarse el problema de que los polos están sobre la trayectoria) y un cambio de variable tal que $\frac{s}{u} = -\frac{(s_0 \pm i\varepsilon)}{i\kappa}$, pero como este término tiende a cero cuando $u \rightarrow \infty$ entonces podemos expandir $(u-s)$ en series de potencias de $\frac{s}{u}$ para el polo con $s = 0$. Pero el desarrollo anterior no es bueno en $s = 1$, porque aquí $s = -s_0 + i(\kappa \pm \varepsilon)$; y de ahí que $\frac{s}{u} = 1 - \frac{(s_0 \pm i\varepsilon)}{\kappa}$ tiende a 1 cuando $\kappa \rightarrow \infty$; pero si hacemos el cambio de variable $s' = s - u$ ya no hay problema:

$$\chi(u) = A \int_{C_2} \left([e^s s^{i\gamma-1} (u-s)^{-i\gamma}] ds + [e^{s'+u} (-s')^{i\gamma} (u+s')^{i\gamma-1}] ds' \right) \quad (65)$$

Desarrollando las series de potencias es sencillo calcular las integrales anteriores, pero del resultado aún hay que tomar el límite $\frac{s}{u} \rightarrow 0$ para obtener las formas asintóticas correctas para la dispersión de Coulomb:

$$\begin{aligned}\chi(u) &\sim 2\pi i A \left[u^{-i\gamma} g_1(\gamma) - (-u)^{i\gamma-1} e^u g_2(\gamma) \right] \\ 2\pi g_1(\gamma) &= i \int_{C_2} e^s s^{i\gamma-1} ds \\ 2\pi g_2(\gamma) &= i \int_{C_2} e^s s^{-i\gamma} ds\end{aligned}\tag{66}$$

Y después de tanto cambio de variables, regresamos a la s originales y vemos:

$$\begin{aligned}(u^*)^{i\gamma} &= (-i)^{i\gamma} [k(r-z)]^{i\gamma} = e^{\gamma\pi/2} e^{i\gamma \ln k(r-z)} \\ (u)^{-i\gamma} &= (i)^{-i\gamma} [k(r-z)]^{-i\gamma} = e^{\gamma\pi/2} e^{-i\gamma \ln k(r-z)}\end{aligned}\tag{67}$$

Ya hemos calculado χ , lo cual equivale a tener $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ a partir de (49).

Aproximación eikonal

Hacemos una breve exposición a cerca de la aproximación eikonal. La filosofía de la aproximación eikonal en este caso es el mismo que cuando hacemos el paso de la óptica ondulatoria a la óptica geométrica, por eso es válida cuando el potencial varía más lentamente que la longitud de onda del paquete de ondas dispersado, es decir, para el caso $E \gg |V|$. Así esta aproximación puede ser considerada como una aproximación cuasiclásica. Primero proponemos que la función de onda cuasiclásica es:

$$\psi \sim e^{iS(\mathbf{r})/\hbar}\tag{68}$$

Donde S satisface la ecuación de Hamilton-Jacobi, y su solución es:

$$\frac{S}{\hbar} = \int_{-\infty}^z \left[k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V \left(\sqrt{b^2 + z'^2} \right) \right]^{1/2} dz' + \text{constante} \quad (69)$$

La constante aditiva se escoje de tal forma que:

$$\frac{S}{\hbar} \rightarrow kz \quad \text{cuando} \quad V \rightarrow 0 \quad (70)$$

El término que multiplica el potencial lo podemos interpretar como un cambio de fase del paquete de ondas, su forma específica es la siguiente

$$\Delta(b) \equiv \frac{-m}{2k\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} V \left(\sqrt{b^2 + z^2} \right) dz \quad (71)$$

La anterior aproximación dentro del método de ondas parciales tiene la siguiente aplicación. Sabemos que la aproximación eikonal es válida para grandes energías, pero para altas energías hay muchas ondas parciales que contribuyen a la dispersión, así que podemos tratar a l como una variable continua y por analogía con la mecánica clásica: $l = bk$. Además como anteriormente ya habíamos mencionado $l_{max} = kR$, sustituyendo en la expresión (15) se obtiene:

$$f(\theta) = -ik \int b J_0(kb\theta) [e^{2i\Delta(b)} - 1] db \quad (72)$$