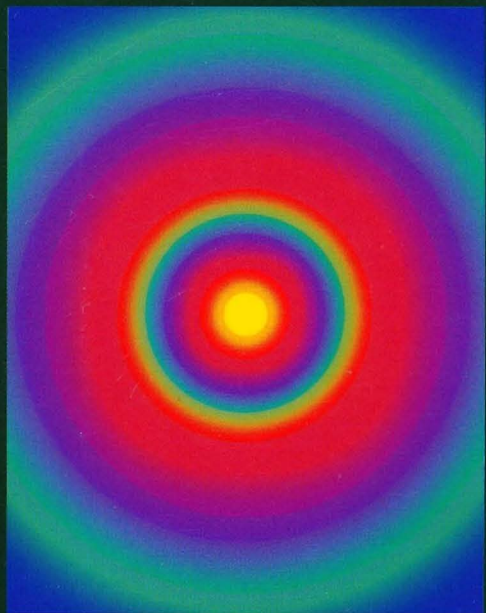


Francisco José Yndurain Muñoz

# Mecánica cuántica

2.<sup>a</sup>  
EDICIÓN  
ACTUALIZADA

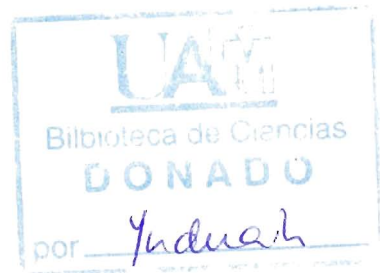
*Ariel Ciencia*



Francisco José Ynduráin Muñoz

# MECÁNICA CUÁNTICA

TEORÍA GENERAL



5410541024



*Ariel*

Diseño de la cubierta: Joana Gironella

1.ª edición en Alianza Editorial: 1990

2.ª edición en Ariel: junio 2003

© 2003: Francisco José Ynduráin Muñoz

Derechos exclusivos de edición en español  
reservados para todo el mundo:

© 2003: Editorial Ariel, S. A.

Diagonal, 662-664 - 08034 Barcelona

ISBN: 84-344-8060-3

Depósito legal: B. 21.524 - 2003

Impreso en España

HUROPE, S. L.

Lima, 3 bis

08030 Barcelona

Ninguna parte de esta publicación, incluido el diseño de la cubierta, puede ser reproducida, almacenada o transmitida en manera alguna ni por ningún medio, ya sea eléctrico, químico, mecánico, óptico, de grabación o de fotocopia, sin permiso previo del editor.

## Prólogo a la segunda edición

Además de su interés por sí misma, la mecánica cuántica tiene el añadido de ser una herramienta esencial en muchos campos de la física y de la química. Ésta es una de las razones que han dictado la estructura del presente libro que pretende no sólo dar una descripción de los fundamentos de la disciplina, sino también presentar ejemplos que ilustren cómo se trabaja con ella. Por este motivo, este texto está diseñado de manera que pueda utilizarse, al menos, de tres maneras distintas: como texto de referencia; para adquirir un conocimiento razonablemente concreto y completo de la mecánica cuántica; o para explicar dos o más cursos sobre la asignatura, uno elemental (más o menos, hasta el capítulo 9) y otro, u otros, avanzado, a partir de allí. Esta última función la he experimentado en ya casi veinte años de clases.

La función de texto de referencia me ha sido útil más de una vez, y es ella la que me ha hecho no caer en la tentación de utilizar unidades astutas (como las atómicas, o las naturales). Las unidades apropiadas a un problema rara vez lo son para los demás, y su utilización es latosa a la hora de aplicarlas fuera del contexto en el que, al autor, le parecían “naturales”. Por motivos similares he procurado utilizar las notaciones habituales; de todas maneras, se recopilan unidades y fórmulas en los apéndices.

Con respecto a la nomenclatura, este texto se diferencia en dos casos de la utilizada en la primera edición: utilizo la palabra *desfase*, en lugar del innecesario galicismo *defasaje* o *desfasaje*; y llamo *momento* a lo que en la primera edición se llamaba *impulso* (con harto dolor de mi corazón, pero es que esta nomenclatura es ya de uso totalmente generalizado).

Es costumbre en los libros de texto introducir ejercicios y problemas. Este libro no es una excepción, y contiene varios cientos. Aparte de su utilidad para (como su mismo nombre indica) ejercitarse en el manejo de la asignatura, ejercicios y problemas son parte importante del texto. Están escogidos en buena medida para extender las aplicaciones de la mecánica cuántica, tratar cuestiones importantes –pero no lo suficientemente básicas conceptualmente como para ir en el texto principal– y para aclarar puntos de la teoría.

No sería equitativo terminar este prólogo sin decir unas palabras de explicación acerca de omisiones de las que no me siento plenamente satisfecho. Específicamente, el lector no encontrará nada de teoría de grupos y pocas justificaciones matemáticamente rigurosas de los cálculos que se realizan. Los textos de Wigner (1959) y Galindo y Pascual (1978) pueden servir de referencia al lector interesado en complementar estas cuestiones. En el segundo puede encontrarse también un capítulo sobre fundamentos epistemológicos de la mecánica cuántica, en especial el problema de la medida.

Una cuestión distinta es la mecánica cuántica relativista. Me ha parecido poco oportuno incluir uno o dos capítulos con sus elementos. En efecto, dada

la por la propia naturaleza del tema, extraordinariamente complejo, siempre hubieran sido insuficientes; incluso, tal vez, contraproducentes. El lector interesado en esta línea puede referirse al texto del autor citado en la bibliografía.

En el capítulo de agradecimientos quiero citar a Alfredo Poves, que hizo una lectura detallada de este texto, a Editorial Ariel, por su interés y apoyo, y a Alianza Editorial (que se encargó de la primera edición de este libro) por su gentileza al revertir todos los derechos de autor.

Madrid, diciembre, 2002

# Contenido

## CAPÍTULO 1. Fundamentos

1.1. Origen histórico de la mecánica cuántica .....	1
1.2. Rendijas de Young cuánticas. El microscopio de Bohr–Heisenberg .....	5
1.3. Función de onda. Interpretación probabilística .....	10
1.4. De nuevo las rendijas de Young. Límite clásico .....	12
Problemas .....	13

## CAPÍTULO 2. Observables, operadores

2.1. Cantidades observables. Valores propios y funciones de onda propias .....	15
2.2. Valores esperados de cantidades observables .....	17
2.3. Espectro continuo .....	18
2.4. Observables compatibles .....	20
2.5. Valores propios degenerados. Conjuntos completos de observables .....	21
2.6. Principio de correspondencia .....	22
Problemas .....	23

## CAPÍTULO 3. Paquetes de onda. Operadores posición y momento. Relación de incertidumbre. Formulación en un retículo

3.1. Ondas planas. Paquetes de ondas. Gaussianas .....	25
3.2. Operador posición .....	27
3.3. Operador momento .....	29
3.4. Relaciones de conmutación .....	30
3.5. Funciones y valores propios de $\hat{Q}$ y $\hat{P}$ . Representación de momentos .....	31
3.6. Discretización de espectros continuos: mecánica cuántica en un retículo .....	34
Problemas .....	37

## CAPÍTULO 4. Evolución temporal. Ecuación de Schrödinger

4.1. El límite clásico de la función de onda .....	39
4.2. La ecuación de Schrödinger (dependiente del tiempo) .....	41
4.3. Estados estacionarios. Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo .....	43
4.4. Evolución de operadores con el tiempo. Corchetes de Poisson y variables conjugadas. Formulación canónica .....	43
4.4.1. Evolución en el tiempo .....	43
4.4.2. Formulación canónica de la mecánica cuántica .....	44

4.5.	Forma general del hamiltoniano .....	46
4.5.1.	Representación de posición .....	47
4.5.2.	Representación de momentos .....	49
4.6.	La ecuación de continuidad .....	50
4.7.	Sistemas de $n$ partículas .....	51
	Problemas .....	52
<b>CAPÍTULO 5. Simetrías y leyes de conservación</b>		
5.1.	Simetrías de un sistema cuántico .....	53
5.2.	Las translaciones espaciales y el operador momento .....	55
5.3.	El hamiltoniano como generador de translaciones en el tiempo ..	56
	Problemas .....	57
<b>CAPÍTULO 6. Problemas en una dimensión</b>		
6.1.	Generalidades .....	59
6.2.	Partícula libre .....	60
6.3.	Partícula en un pozo infinito. Barrera infinita .....	63
6.3.1.	Pozo infinito .....	63
6.3.2.	Barrera infinita .....	65
6.4.	Condiciones de contorno periódicas .....	66
6.5.	Pozo cuadrado. Empalmes. Pozo asimétrico con barrera infinita ..	67
6.5.1.	Pozo cuadrado: empalmes .....	67
6.5.2.	Potencial cuadrado con barrera infinita .....	70
6.6.	Barrera de potencial. Efecto túnel .....	37
6.7.	Ceros. Comportamiento de funciones de onda de estados ligados a gran distancia. Normalización de estados del continuo .....	73
6.7.1.	Ceros .....	73
6.7.2.	Funciones de onda de estados ligados a gran $x$ .....	74
6.7.3.	Normalización de estados del continuo .....	75
6.8.	Coefficientes de transmisión y reflexión a través de una barrera de potencial .....	77
	Problemas .....	79
<b>CAPÍTULO 7. El oscilador armónico</b>		
7.1.	Generalidades .....	81
7.2.	Método funcional .....	82
7.3.	Método algebraico .....	84
7.4.	Sistemas de osciladores independientes .....	86
7.5.	Osciladores acoplados. Vibraciones de un cristal: fonones. Estructura en bandas de las energías de un cristal .....	89
7.5.1.	Vibraciones de un sólido .....	89
7.5.2.	Modos normales (caso clásico) .....	90
7.5.3.	Vibraciones de un cristal: caso cuántico. Estructura en bandas ..	91
	Problemas .....	93

**CAPÍTULO 8. Límites clásico y semiclásico. Teorema de Ehrenfest.****Aproximación WKB**

8.1. Teorema de Ehrenfest .....	95
8.2. Límite clásico del oscilador armónico. Estados coherentes .....	96
8.3. La aproximación WKB .....	98
8.4. Efecto túnel en la aproximación WKB .....	101
8.5. Operadores en el límite clásico .....	103
8.6. Desintegración alfa en el modelo de Gamow .....	104
Problemas .....	106

**CAPÍTULO 9. Formulación general de la mecánica cuántica.****Imágenes de Schrödinger, Heisenberg y Dirac. Matriz densidad**

9.1. Postulados de la mecánica cuántica en el formalismo de Dirac ..	107
9.2. Conexión con el formalismo de funciones de onda .....	108
9.3. Matriz densidad .....	110
9.4. Imágenes de Schrödinger y Heisenberg .....	112
9.5. Imagen de Dirac .....	113
9.6. Apéndice: ordenación temporal y T-exponencial .....	115
Problemas .....	117

**CAPÍTULO 10. Formulación de integrales de caminos de la mecánica cuántica**

10.1. Formalismo lagrangiano en mecánica clásica .....	119
10.2. Amplitud de transición para un tiempo infinitesimal .....	120
10.3. Formulación de integral sobre caminos de las amplitudes de transición .....	123
10.4. La aproximación WKB en formulación de integrales de caminos	127
Problemas .....	128

**CAPÍTULO 11. Teoría de perturbaciones y aproximaciones**

11.1. Perturbaciones de niveles no-degenerados. Oscilador anarmónico .....	131
11.1.1. Espectro discreto y no-degenerado .....	131
11.1.2. Espectro continuo no-degenerado .....	133
11.1.3. Espectro discreto no-degenerado: solución a orden arbitrario ..	134
11.1.4. Oscilador anarmónico .....	135
11.2. Perturbaciones de un espectro degenerado .....	136
11.3. Perturbaciones dependientes del tiempo .....	138
11.4. Transiciones bajo la influencia de una perturbación. Desintegraciones. Relación de incertidumbre tiempo-energía ...	140
11.4.1. Transiciones debidas a una perturbación .....	140
11.4.2. Desintegraciones. Relación de incertidumbre tiempo-energía ..	141
11.5. Otros métodos de aproximación: propiedad de extremo del estado fundamental; ecuación de Schrödinger en un retículo ...	145
11.5.1. Propiedad de extremo del estado fundamental .....	145
11.5.2. Ecuación de Schrödinger en un retículo .....	146



Problemas .....	147
<b>CAPÍTULO 12. Partículas idénticas</b>	
12.1. El principio de indistinguibilidad. El principio de exclusión de Pauli .....	149
12.2. Funciones de onda de $n$ partículas idénticas .....	151
12.3. Electrones en un conductor. Nivel de Fermi .....	153
12.4. Formalismo de operadores de creación-aniquilación para estados de varias partículas. Espacio de Fock .....	154
Problemas .....	155
<b>CAPÍTULO 13. Rotaciones. Momento angular</b>	
13.1. Rotaciones en mecánica cuántica. Parámetros normales. Operadores del momento angular .....	157
13.2. Sistemas invariantes bajo rotaciones .....	161
13.3. Momento angular: expresión de los $\hat{L}$ en coordenadas polares. Espectro de $\hat{L}_z$ .....	162
13.3.1. Operadores momento angular en polares; relación con la energía cinética .....	162
13.3.2. Valores propios de las componentes del momento angular ..	163
13.4. Componentes de Cartan; valores y vectores propios del momento angular .....	164
13.5. Funciones propias de $\hat{L}^2$ , $\hat{L}_z$ . Armónicos esféricos .....	167
13.6. Composición de momentos angulares. Coeficientes de Clebsch-Gordan .....	169
13.7. Propiedades de transformación de operadores vectoriales. Teorema de Wigner-Eckart .....	174
Problemas .....	176
<b>CAPÍTULO 14. El espín</b>	
14.1. Funciones de onda y operadores de espín .....	179
14.2. Valores propios del espín. Momento angular total .....	182
14.3. Partículas de espín $1/2$ . Matrices de Pauli .....	185
14.4. Función de onda del fotón. Espín del fotón .....	186
Problemas .....	193
<b>CAPÍTULO 15. Simetrías discretas: paridad e inversión temporal.</b>	
<b>Fases y reglas de superselección</b>	
15.1. Paridad .....	195
15.2. Inversión temporal .....	196
15.3. Simetrías y fases. Reglas de superselección .....	198
Problemas .....	199
<b>CAPÍTULO 16. El problema de dos partículas. Potencial central</b>	
16.1. Sistema de dos cuerpos aislados .....	201
16.2. Potencial central. Ecuación radial. Comportamiento en el origen	203

16.3.	Partícula libre. Comportamiento en el infinito de las funciones de onda; desfases	206
16.3.1.	Partícula libre; cambio de base	206
16.3.2.	Partícula en interacción: comportamiento en el infinito. Desfases	208
16.4.	Pozo esférico tridimensional	209
16.4.1.	Estados ligados	210
16.4.2.	Estados del continuo. Desfases	210
	Problemas	211
<b>CAPÍTULO 17. Partícula en un potencial coulombiano.</b>		
El átomo de hidrógeno. Potencial lineal: quarkonio.		
Potenciales dependientes del espín:		
el sistema protón-neutrón. El deuterón		
17.1.	Estados ligados electrón-protón: el átomo de hidrógeno	215
17.2.	Propiedades elementales del átomo de hidrógeno	219
17.3.	Partícula en un campo coulombiano: estados del continuo	220
17.4.	Potencial lineal. Quarkonio	224
17.4.1.	Potencial lineal	224
17.4.2.	Quarkonio	226
17.5.	Potenciales dependientes del espín	227
17.6.	El sistema protón-neutrón. El deuterón	229
17.7.	Fuerzas dependientes de la velocidad: estructura fina del hidrógeno	232
	Problemas	235
<b>CAPÍTULO 18. Partícula en campos electromagnéticos (clásicos)</b>		
18.1.	Sustitución mínima. Potencial de Coulomb. Invariancia gauge de la ecuación de Schrödinger. Sustitución mínima en un retículo	239
18.1.1.	Sustitución mínima. Ecuación de Schrödinger en presencia de un campo magnético	239
18.1.2.	Transformaciones de gauge	241
18.1.3.	Observables y reglas de conmutación en presencia de campos electromagnéticos	243
18.1.4.	Sustitución mínima en un retículo	244
18.2.	Partícula en un campo magnético uniforme	243
18.2.1.	Espectro de energías	245
18.2.2.	Precesión del espín	246
18.3.	Átomo de hidrógeno en un campo magnético uniforme. Efecto Zeeman	247
18.4.	Interacción con un campo eléctrico constante. Extracción fría de electrones de un sólido. Efecto Stark	249
18.4.1.	Extracción de electrones	250
18.4.2.	Átomos en un campo eléctrico: efecto Stark	251
18.5.	Relevancia de los potenciales electromagnéticos en mecánica cuántica: efecto Bohm-Aharonov	252

Problemas	256
<b>CAPÍTULO 19. Sistemas continuos. Campos cuánticos</b>	
19.1. Vibraciones de un medio continuo (caso clásico)	259
19.2. Vibraciones de un medio continuo (caso cuántico)	262
19.3. Campos. Campos cuánticos	265
Problemas	267
<b>CAPÍTULO 20. Teoría cuántica de la radiación</b>	
20.1. Cuantización del campo electromagnético	269
20.2. Límite clásico. Estados coherentes	273
20.3. Interacción de la radiación con la materia	275
20.4. Emisión de radiación por un átomo hidrogenoide	277
20.5. Desintegración del primer nivel excitado del átomo de hidrógeno	280
Problemas	282
<b>CAPÍTULO 21. Dispersión de partículas en mecánica cuántica</b>	
21.1. Evolución libre de un paquete de ondas: desperdigamiento	285
21.2. Experimentos de colisión	287
21.3. Colisiones de dos partículas: sistemas de referencia lab y c.m.	290
21.4. Secciones eficaces. Amplitud de dispersión	292
21.5. Ondas parciales; desfases. Teorema óptico.	
Aproximación semiclásica	294
21.5.1. Ondas parciales y desfases. Teorema óptico	294
21.5.2. Desfasajes en la aproximación WKB	296
21.6. Aproximación de Born. Serie de Born	297
21.7. Dispersión por un pozo esférico constante. Longitud de difusión. Resonancias. Teorema del alcance efectivo	299
21.8. Dispersión por un potencial coulombiano	302
21.8.1. Dispersión por un potencial coulombiano apantallado	302
21.8.2. Solución exacta de la dispersión coulombiana	304
21.9. Nota sobre colisiones de partículas idénticas	305
Problemas	306
<b>CAPÍTULO 22. Teoría formal de colisiones</b>	
22.1. Ecuación de Lippmann–Schwinger. Función de Green.	
Aproximación iconal	309
22.1.1. Ecuación de Lippmann–Schwinger	309
22.1.2. La ecuación de Lippmann–Schwinger en el formalismo de funciones de onda; función de Green y condiciones de contorno	310
22.1.3. Aproximación de Born; aproximación iconal	312
22.1.4. Otras ecuaciones del tipo Lippmann–Schwinger; soluciones	313
22.2. Estados asintóticos. Matriz $S$ . Amplitud de transición	314
22.3. Secciones eficaces en términos de la matriz $S$	318

22.4. Unitariedad de la matriz $S$ . Teorema óptico generalizado	323
22.5. Invariancia bajo inversión temporal. Teorema del balance detallado	324
22.6. Dispersión por varias interacciones	326
22.7. Colisiones relativistas	328
Problemas	329
<b>CAPÍTULO 23. Colisiones con emisión y absorción de radiación</b>	
23.1. Bremsstrahlung	331
23.2. Efecto fotoeléctrico	336
23.2.1. Efecto fotoeléctrico a baja energía	336
23.2.1. Efecto fotoeléctrico a alta energía	339
23.4. Colisión Compton	339
Problemas	344
<b>APÉNDICES</b>	
I. Espacios de Hilbert	347
II. Distribuciones	353
III. Coeficientes de Clebsch–Gordan; matrices de rotación	355
IV. Funciones especiales	357
V. Notaciones, fórmulas, magnitudes físicas, unidades	363
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	369
<b>ÍNDICE DE NOMBRES</b>	371

## CAPÍTULO 1.

# Fundamentos

### 1.1. Origen histórico de la Mecánica Cuántica

A finales del siglo XIX y principios del XX la mecánica, que aquí llamaremos *clásica*, de Galileo y Newton presentaba el aspecto de un edificio extraordinariamente sólido. En aquella época se pensaba que las pequeñas discrepancias o problemas entre la teoría y el experimento que existían eran cuestiones sin importancia, y su solución intrascendente.

Sin embargo, estas discrepancias condujeron a dos revoluciones que alteraron drásticamente el panorama de la física. Una de ellas llevó a la *teoría de la relatividad* que mostraba la necesidad de una nueva formulación para velocidades comparables con la de la luz,  $c \simeq 3 \times 10^8$  m/seg. La segunda implicó que la mecánica clásica (incluso con correcciones relativistas) deja de tener validez para objetos cuyas dimensiones características son comparables con la constante de Planck (con dimensiones de *acción*),

$$h \simeq 7 \times 10^{-27} \text{ erg.} \times \text{seg.},$$

para los que debe utilizarse otra mecánica radicalmente distinta, la *mecánica cuántica*. Aunque la mecánica cuántica vale tanto en el caso relativista como el no-relativista aquí nos concentraremos prácticamente sólo en el caso no-relativista.

A continuación mencionaremos algunas de las primeras indicaciones de que era necesario revisar las bases de la mecánica clásica.

#### (A) *La radiación del cuerpo negro.*

El cuerpo negro es una cavidad que se supone no refleja la luz.<sup>1</sup> Se puede tratar al campo electromagnético en su interior como un conjunto de osciladores clásicos. Para una frecuencia dada,  $\nu$ , el número de modos estacionarios en la cavidad es, por unidad de volumen y de frecuencia,

$$N(\nu) = 2 \times 4\pi\nu^2/c^3$$

---

<sup>1</sup> Por supuesto, no existe un cuerpo negro perfecto, pero se consigue una buena aproximación pintando el interior de una esfera de negro y dejando sólo un pequeño orificio.

(ley de Rayleigh-Jeans). No demostraremos esta fórmula, pero hacemos notar que el  $4\pi$  está relacionado con el área de la esfera y el factor 2 se debe a la existencia de dos grados de polarización de la luz. La energía media es

$$E(\nu) = N(\nu)k_{\text{B}}T,$$

con  $k_{\text{B}}$  la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura absoluta. Experimentalmente, esto funciona si  $T/\nu \gg 10^{-10}$  K seg.; pero falla cuando  $T/\nu \leq 10^{-10}$  K seg.

Independientemente de la discrepancia al comparar con el experimento, está claro que la fórmula de Rayleigh-Jeans tiene que fallar para  $\nu$  grande; en efecto, con esa fórmula, la energía total

$$\int_0^{\infty} d\nu E(\nu)$$

diverge para gran  $\nu$ . Planck (1900, 1901) hizo la hipótesis de que no todas las energías son admisibles, sino sólo los múltiplos enteros de una energía elemental,  $\nu h$  (*cuanto de energía*). Asignando la probabilidad  $\exp(-E/k_{\text{B}}T)$  para cada energía, obtenemos la energía media

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

Sumando la serie, Planck encontró

$$E(\nu) = N(\nu) \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_{\text{B}}T} - 1}.$$

Para  $\nu$  pequeño esto coincide con la ley de Rayleigh-Jeans, pero para  $\nu$  grande es muy distinto. El resultado de Planck no sólo hace finita la integral  $\int_0^{\infty} d\nu E(\nu)$ , sino que está de acuerdo con la experiencia si  $h$  es la *constante de Planck*.

Usualmente no se trabaja con  $h$ , sino con lo que se llama la *constante racionalizada*,

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}.$$

(B) *Calor específico.*

La energía interna  $U$  de un mol de una sustancia puede calcularse considerando que se debe a las vibraciones de sus átomos. Tratando a éstos como osciladores obtenemos la ley de Dulong y Petit:

$$U = 3n_a N_A k_{\text{B}}T.$$

El factor 3 se debe a que las vibraciones pueden realizarse en cualquier dirección del espacio;  $n_a$  es el número de átomos por molécula y  $N_A$  el número

de Avogadro. De nuevo esto sólo puede funcionar para  $T/\nu$  grande. Einstein (1907) propuso utilizar el resultado de Planck y reemplazar  $k_B T$  por

$$k_B T \frac{h\nu/k_B T}{e^{h\nu/k_B T} - 1},$$

con lo que se obtiene la ley de Einstein,

$$U = 3n_a N_A \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}.$$

Esto es sólo una primera aproximación cuántica; hay más correcciones, como las debidas a Debye (1912). La justificación de que la energía de un oscilador es  $nh\nu$  (o  $n\hbar\omega$ , con  $\omega$  la frecuencia angular) la veremos más adelante.

### (C) La estructura del átomo.

Las experiencias de dispersión de partículas de Rutherford habían dado una imagen del átomo consistiendo (por ejemplo, para el caso más sencillo del átomo de hidrógeno) en un pequeño núcleo de tamaño  $\sim 10^{-13}$  cm alrededor del cual gira un electrón, a una distancia de aproximadamente  $10^{-8}$  centímetros.

Este modelo presenta contradicciones, consigo mismo y con la experiencia. En primer lugar, una carga eléctrica sujeta a aceleración (como ocurre en un movimiento circular) debe producir radiación electromagnética. Esta radiación, según la física clásica, se debería emitir de forma continua y llevar a una caída del electrón al núcleo. Sin embargo no hay tal colapso; los átomos tienen un estado fundamental estable y, además, cuando pasan de un estado “excitado” al fundamental, no radian energía de forma continua sino por medio de *cuantos* en forma discreta. Asimismo, el momento angular del electrón alrededor del núcleo no puede tomar valores arbitrarios sino sólo múltiplos enteros de  $\hbar$ :  $l = n\hbar$ .

Estos dos últimos hechos están ligados. En efecto, la energía en un movimiento de tipo Kepler está relacionada con el momento angular por  $E = -m_e e^4 / 2l^2$ , donde  $m_e$  es la masa del electrón y  $e$  su carga. Utilizando la fórmula  $l = n\hbar$  resulta que las energías posibles son sólo las  $E_n = -\frac{1}{2}m_e c^2 \alpha^2 / n^2$ , con  $\alpha \equiv e^2 / \hbar c \simeq 1/137$  la llamada *constante de estructura fina*. Por tanto, sólo se puede radiar energía en *cuantos*, o paquetes,

$$E_{n+1} - E_n = \frac{1}{2}m_e c^2 \alpha^2 \frac{2n+1}{n^2(n+1)^2}.$$

Estas expresiones son sólo indicativas; en el texto veremos un tratamiento detallado y correcto.

### (D) Efectos fotoeléctrico y Compton.

Si hacemos incidir radiación electromagnética con suficiente energía (frecuencia) sobre ciertos materiales (por ejemplo, silicio) observamos que estos materiales emiten electrones (*efecto fotoeléctrico*). Sean  $I_\gamma$  y  $\nu_\gamma$  la intensidad y frecuencia de la radiación incidente; y sean  $E_e$  y  $N_e$  la energía y el número de los electrones arrancados. Experimentalmente se observa que  $E_e$  depende

sólo de  $\nu_c$ , pero no de  $I_\gamma$ ; únicamente  $N_c$  depende de  $I_\gamma$ . Esto sería lógico si la radiación electromagnética no fuesen ondas, sino partículas (los *fotones*, que representamos por el símbolo  $\gamma$ ). Ésta es la explicación que sugirió Einstein (1905), adjudicando a los fotones la energía  $E_\gamma = h\nu_\gamma$ , donde  $h$  sigue siendo la constante de Planck. Esta hipótesis era revolucionaria; desde que Young, alrededor de 1800, hubiera realizado sus famosos experimentos de interferencia, nadie tenía dudas de que la luz fuese un fenómeno ondulatorio.

Si aumentamos más la frecuencia de los fotones encontramos que, además de electrones, se emiten fotones con longitud de onda  $\lambda'_\gamma$  tal que

$$\lambda'_\gamma - \lambda_\gamma = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta),$$

donde  $\lambda_\gamma$  es la longitud de onda de los fotones incidentes,  $c$  la velocidad de la luz y  $\theta$  el ángulo que forman las direcciones de los fotones incidentes y emitidos. Éste es el *efecto Compton*, que éste explicó como un choque elástico fotón-electrón, asignando a los fotones un momento  $p_\gamma = h\nu/c$ .

(E) *Ondas de materia.*

Puesto que el campo electromagnético, que aparece en muchas experiencias como un fenómeno ondulatorio, puede a veces actuar como un conjunto de partículas, de Broglie (1923) postuló que partículas de materia (por ejemplo, electrones) pueden tener un comportamiento ondulatorio. Si una partícula tiene momento  $p$ , de Broglie supuso que la longitud de la onda asociada (*longitud de onda de de Broglie*) es  $\lambda = h/p$ ; nótese la analogía con la fórmula de Compton. Por tanto, bajo determinadas circunstancias los electrones (p. ej.) se deberán comportar como ondas y, en particular, producir fenómenos de interferencia.

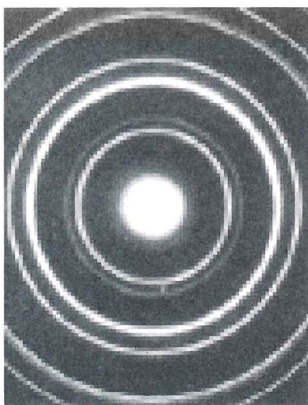


FIGURA 1.1.1. Imagen de difracción producida por electrones al atravesar una red de átomos (una lámina de oro).



Éste es un buen punto para hacerse una idea de las dimensiones a las que son aparentes los efectos cuánticos. Supongamos que queremos hacer interferir ondas de materia, digamos electrones, que pasan por dos rendijas al estilo del efecto Young. Para que haya interferencia es necesario que las rendijas estén separadas por una distancia  $d$  que sea del orden de la longitud de onda,  $d \sim \lambda_c$ . Supongamos que aceleramos a los electrones por un potencial de 1 voltio, esto es, les damos una energía de  $1 \text{ eV} \simeq 1.6 \times 10^{-19}$  joulios. Entonces,

$$\frac{\lambda_c}{2\pi} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m_e E_c}} \simeq 6 \times 10^{-10} \text{ metros,}$$

que es del orden de las distancias interatómicas. De hecho, poco después de la propuesta de de Broglie, los fenómenos de interferencia predichos por él se observaron en la difracción de electrones por redes cristalinas (fig. 1.1.1).

(F) *La ecuación de Schrödinger y la mecánica matricial. El libro de Dirac.*

Schrödinger (1926) escribió las ecuaciones básicas que obedecen las ondas de materia. Paralelamente (de hecho algo antes) Heisenberg, primero solo y, posteriormente, en colaboración con Jordan, construyó una mecánica de matrices que permitía explicar muchos de los efectos cuánticos. Muy poco después, el propio Schrödinger y Dirac mostraron que ambas formulaciones eran matemáticamente equivalentes. En 1930, Dirac publicó un texto con un tratamiento sistemático de la nueva mecánica. Puede tomarse este libro de Dirac (1930) como marcando el establecimiento de la mecánica cuántica; de hecho y aunque, obviamente, ha habido desarrollos posteriores, puede aún hoy utilizarse como texto para iniciar el estudio de nuestra disciplina.

## 1.2. Rendijas de Young cuánticas. El microscopio de Bohr–Heisenberg

La discusión que sigue la hemos adaptado del libro de Feynman (1965). Consideramos (ver fig. 1.2.1, a y b) unas rendijas de tipo Young,  $R$ , que etiquetamos 1 y 2. Delante de ellas hay un foco,  $F$ , que lanza partículas (caso a) o, en el caso (b), emite ondas.  $D$  es un detector que dice cuántas partículas llegan a cada punto  $x$  ( $x$  es la coordenada vertical; consideramos el caso unidimensional, por sencillez) o que mide la intensidad de las ondas, respectivamente en los casos (a) y (b).

Comencemos por el caso de partículas. Una partícula emitida por  $F$  puede pasar por la rendija 1 ó 2, ser dispersada y llegar a un punto  $x$  del detector; sus posibles trayectorias vienen descritas por las líneas de puntos en la figura 1.2.1a. Hacemos primero la experiencia cerrando la rendija 2; si  $P_1(x)$  es el número de partículas que llegan al punto  $x$ , pasando (puesto que la rendija 2 está cerrada) por la rendija 1, obtendremos una curva como la de la figura 1.2.2a. Si cerramos la rendija 1, obtendremos la curva  $P_2(x)$ . Finalmente, si dejamos abiertas ambas rendijas, obtendremos una curva  $P_{12}(x)$  y se tendrá  $P_{12}(x) = P_1(x) + P_2(x)$  pues, claramente, una partícula pasa por la rendija 1 o pasa por la rendija 2.

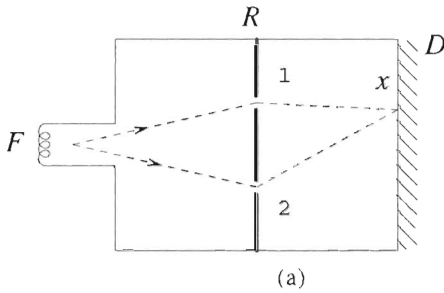


FIGURA 1.2.1a.  
Experimento con rendijas  
de Young, lanzando partí-  
culas.

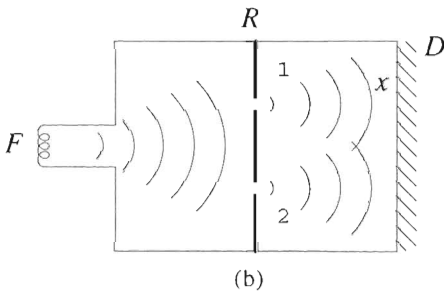


FIGURA 1.2.1b.  
Experimento de rendijas  
de Young con ondas.

Repetamos el experimento con ondas (fig. 1.2.1b). Si cerramos la rendija 2 y dibujamos la *intensidad* de la onda, encontramos  $I_1(x)$ . Si cerramos la rendija 1, obtenemos  $I_2(x)$ . Si dejamos abiertas ambas rendijas la intensidad será  $I_{12}(x)$ ; pero ahora  $I_{12}(x) \neq I_1(x) + I_2(x)$  (fig. 1.2.2b). En efecto, para ondas tenemos efectos de interferencia. Si la onda que pasa a través de la rendija  $j$  es descrita por la amplitud  $\Psi_j$  ( $j = 1, 2$ ) entonces podemos escribir

$$\Psi_j = a_j e^{i\omega(t + \alpha_j)}$$

con  $\omega$ ,  $\alpha_j$  reales y  $a_j$  positivos. Las intensidades son, como sabemos por mecánica ondulatoria,

$$I_1 = |\Psi_1|^2, \quad I_2 = |\Psi_2|^2.$$

La amplitud con ambas rendijas abiertas es  $\Psi_{12} = \Psi_1 + \Psi_2$ ; entonces

$$I_{12} = |\Psi_1 + \Psi_2|^2 = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos(\alpha_1 - \alpha_2);$$

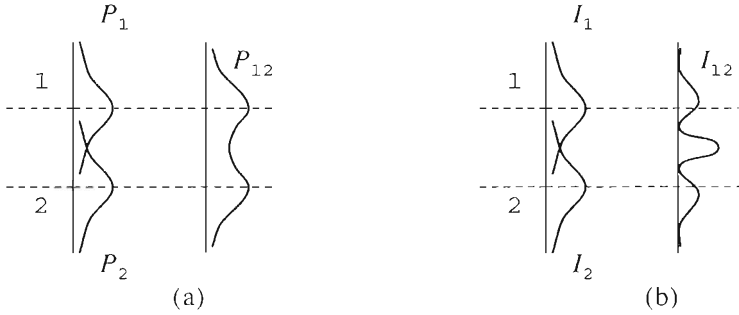


FIGURA 1.2.2. Dos situaciones, aparentemente muy diferentes.  
 (a) Probabilidades de que las partículas lleguen al detector;  
 (b) Intensidades de las ondas que llegan al detector

para ondas lo que se suman son las *amplitudes*,  $\Psi_j$ , no las intensidades  $I_j$ .

Aparentemente este experimento nos permite distinguir ondas de partículas y resolver, por tanto, las paradojas de la sección anterior en la que vimos que objetos tales como fotones o electrones se comportan a veces como ondas y a veces como partículas. Intentamos, por tanto, hacer el experimento de Young con electrones.<sup>2</sup> Supongamos que la distancia entre las rendijas 1 y 2 (fig. 1.2.3) es del orden de la longitud de onda de de Broglie de los electrones producidos por el foco  $F$ . Llamemos  $W_j(x)$  a la probabilidad de que los electrones lleguen al punto  $x$ , dejando sólo abierta la rendija  $j$ .

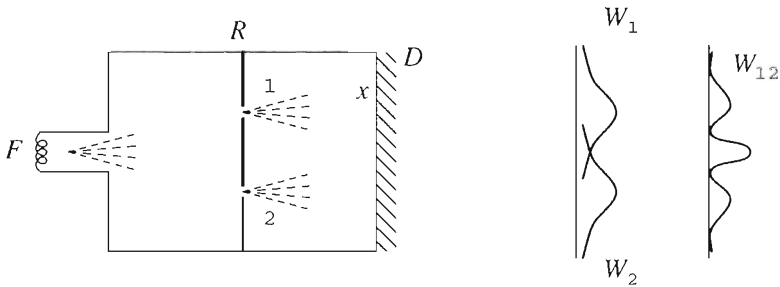


FIGURA 1.2.3. Experimento de difracción con electrones.

<sup>2</sup> Hablamos de rendijas para hacer la discusión más transparente; en la práctica se utilizan redes cristalinas.

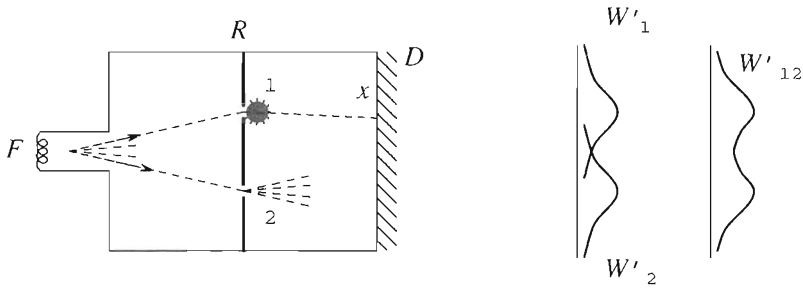


FIGURA 1.2.4. Experimento de difracción con electrones, pero detectando los que pasan por cada rendija.

Si los electrones tienen características ondulatorias esperamos fenómenos de interferencia. Por tanto, si  $W_{12}(x)$  es la probabilidad de que los electrones lleguen a  $x$  con las dos rendijas abiertas, esperamos que  $W_{12}(x)$  no sea igual a  $W_1(x) + W_2(x)$ , sino más bien

$$W_{12} = W_1 + W_2 + 2\sqrt{W_1 W_2} \cos(\alpha_1 - \alpha_2).$$

Sin embargo, los electrones llegan de uno en uno al detector: nuestra intuición, basada en la física clásica, nos dice que esto implica que el electrón es una partícula y, por tanto, parece que *siguiendo* la trayectoria del electrón podemos determinar si pasó por la rendija 1 o por la rendija 2: en cuyo caso se debería tener  $W_{12} = W_1 + W_2$ . Para estudiar esto, colocamos un foco de luz en la rendija 1 (fig. 1.2.4); de manera que si el electrón pasa por esta rendija podemos verlo. Si no lo vemos, sabemos que ha pasado por la rendija 2.

La situación, sin embargo, no es tan sencilla como parece. Al colocar el foco hemos, realmente, modificado el dispositivo experimental. Si denotamos por  $W'_j$ ,  $j = 1, 2$  y  $W'_{12}$  a las probabilidades con el foco en funcionamiento, encontramos que, ahora sí,  $W'_{12} = W'_1 + W'_2$  (!). Por tanto, parece que si sabemos por dónde pasa el electrón, éste se comporta como una partícula.

Aparentemente aquí hay una falacia: podríamos haber quitado la luz; puesto que podemos predecir la trayectoria de las partículas sabemos, sin necesidad de mirar, por qué rendija pasa cada electrón. Pero esto es en realidad la falacia. Puesto que, *experimentalmente*, hay interferencias, resulta que es necesario abandonar la idea de que una partícula cuántica tenga una trayectoria bien definida.

En efecto, examinemos más de cerca lo que ocurre cuando intentamos determinar dónde está una partícula. Para ello la miramos a través de un microscopio (*microscopio de Bohr-Heisenberg*), fig. 1.2.5. Pero para verla hace falta iluminarla. Al intentar ganar en resolución hay que incrementar la frecuencia de los fotones del haz luminoso, los cuales (recordemos los efectos fotoeléctrico

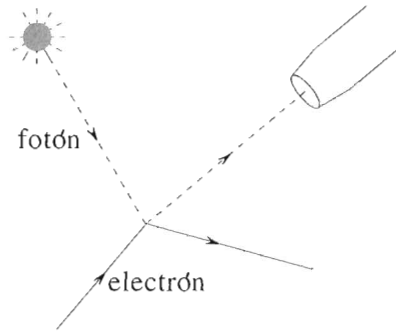


FIGURA 1.2.5. El microscopio de Bohr-Heisenberg.

y Compton) golpearán cada vez con más fuerza al electrón, desviándolo de su trayectoria con un momento desconocido: cuanto mayor precisión queramos obtener en conocer la posición del electrón, con menor precisión conoceremos la dirección y velocidad con que se mueve. De hecho, puede demostrarse la relación de Heisenberg que dice que si  $\Delta x$  es la incertidumbre con la que se conoce la posición de una partícula, y  $\Delta p$  la incertidumbre en su momento, entonces  $(\Delta x)(\Delta p) \geq \hbar$ . (Esto lo veremos con más detalle en las secciones 3.3 y 3.4).

Un último comentario con respecto al microscopio de Bohr-Heisenberg. Parece que, en principio, se podría *predecir* en qué dirección se va a mover el electrón después del choque con el fotón aplicando las leyes del choque elástico. Pero para ello haría falta que supiésemos exactamente el momento del fotón, y cuándo choca con el electrón: lo que es imposible porque también el fotón es una partícula cuántica.

### 1.3. Función de onda. Interpretación probabilística

Según hemos visto, una partícula cuántica tiene comportamiento de onda; podemos pues caracterizar su estado por una función (*función de onda*)  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , equivalente a la correspondiente amplitud en el lugar  $\mathbf{r}$  en el instante de tiempo  $t$ . Pero sabemos que la partícula se comporta en algunos aspectos como tal partícula. Por ejemplo, en el experimento de las rendijas de Young de la sección anterior, y a pesar de los fenómenos de interferencia, los electrones llegan de uno en uno al detector  $D$ . Esto lo tenemos en cuenta interpretando la cantidad

$$\rho_{\psi}(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2,$$

que si el objeto fuese una onda representaría su intensidad, como la *probabilidad* de encontrar la partícula en el punto  $\mathbf{r}$  en el instante de tiempo  $t$  (Born, 1926). La función de onda caracteriza completamente el estado de una partícula cuántica.

El concepto de probabilidad es la novedad máxima de la mecánica cuántica: ésta implica que de una partícula no se pueda decir que está aquí o allá; sino sólo que tiene una cierta *probabilidad* de estar aquí o allá.

La probabilidad de encontrar la partícula en algún lugar del espacio debe ser la unidad; por tanto podemos exigir que

$$\int_{R^3} d^3r |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = 1. \quad (1.3.1a)$$

Sin embargo, muchas veces es conveniente trabajar con probabilidades relativas, requiriendo tan sólo que

$$\int_{R^3} d^3r |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \text{finito}. \quad (1.3.1b)$$

En este caso la probabilidad,  $\rho_\Psi$ , se debe definir como

$$\rho_\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2}{\int_{R^3} d^3r |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2}; \quad (1.3.2)$$

$|\Psi|^2$  es entonces la probabilidad relativa.

Las funciones  $\Psi$  y  $\lambda\Psi$  para cualquier número complejo  $\lambda \neq 0$  representan el mismo estado. Esto puede tomarse como postulado, aunque puede deducirse de los demás en el sentido de que no hay diferencia física entre  $\Psi$  y  $\lambda\Psi$ . Nótese, sin embargo, que la fase *relativa* entre dos funciones de onda puede medirse con experimentos de interferencia.

Quizá el postulado más fundamental de la mecánica cuántica sea el llamado *principio de superposición*. Este principio es válido para ondas ordinarias y, según toda la evidencia experimental, también para las funciones de onda de la mecánica cuántica. Según este principio, si  $\Psi_1, \dots, \Psi_n$  son posibles funciones de onda de una partícula cuántica, la función  $\alpha_1\Psi_1 + \dots + \alpha_n\Psi_n$  también es una función de onda posible, para cualesquiera números complejos  $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ .

La estructura matemática del conjunto de funciones de onda es pues la de lo que se conoce como un *espacio de Hilbert*, concretamente  $L^2(R^3)$ . Debido a esto utilizaremos, cuando sea conveniente, notación de espacios de Hilbert definiendo

$$\begin{aligned} \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle &\equiv \int d^3r \Psi_1^*(\mathbf{r}, t) \Psi_2(\mathbf{r}, t) \\ \|\Psi\|^2 &\equiv \int d^3r |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \langle \Psi | \Psi \rangle, \text{ etc.} \end{aligned}$$

A  $\|\Psi\|$  se le llama *norma* o módulo del estado  $\Psi$ .

En el Apéndice I pueden verse un cierto número de propiedades de espacios de Hilbert útiles para nosotros. Aquí, y por facilidad de referencia, señalamos únicamente que el producto escalar es lineal,

$$\langle \Phi | \alpha_1 \Psi_1 + \alpha_2 \Psi_2 \rangle = \alpha_1 \langle \Phi | \Psi_1 \rangle + \alpha_2 \langle \Phi | \Psi_2 \rangle$$

y que se tiene  $\langle \Phi | \Psi \rangle = \langle \Psi | \Phi \rangle^*$

La condición de *normalizabilidad* (1.3.1a,b) es un requisito físico insoslayable. Sin embargo es muchas veces cómodo utilizar, como idealizaciones matemáticas, funciones de onda no-normalizables, para las que la integral  $\int d^3r |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$  diverge. Por ejemplo: consideremos una partícula acerca de la que sabemos que está en el interior de una esfera de radio  $L$ , y que tiene igual probabilidad de encontrarse en cualquier punto de la misma. Una función de onda posible sería

$$\Psi_L(\mathbf{r}, t) = \begin{cases} 1, & \text{si } |\mathbf{r}| < L \\ 0, & \text{si } |\mathbf{r}| \geq L. \end{cases}$$

Claramente,

$$\|\Psi_L\|^2 = \frac{4}{3}\pi L^3,$$

que es finito. Sin embargo, si  $L$  es grande en comparación con las dimensiones en las que estamos interesados, puede ser cómodo utilizar la idealización  $L \rightarrow \infty$ , y la función de onda  $\Psi \equiv 1$ , con lo que la integral  $\int d^3r |\Psi|^2$  diverge.

Presentamos, para terminar esta sección, el último postulado. Supongamos que hemos preparado una partícula en un estado caracterizado por la función de onda  $\Psi$ . En mecánica clásica, la probabilidad de encontrarla en un estado distinto (caracterizado por otra función de onda,  $\Phi \neq \Psi$ ) sería cero. Sin embargo, en mecánica cuántica, y debido a la incertidumbre fundamental de la misma, esta probabilidad puede no anularse. Si llamamos  $W(\Phi, \Psi)$  a dicha probabilidad postulamos que

$$W(\Phi, \Psi) = \frac{|\langle \Phi | \Psi \rangle|^2}{\|\Phi\|^2 \|\Psi\|^2}. \quad (1.3.3)$$

A la cantidad  $\langle \Phi | \Psi \rangle$  se le llama *amplitud de probabilidad* (o, simplemente, *amplitud*) de encontrar el estado caracterizado por  $\Psi$  en el estado caracterizado por la función  $\Phi$ .

EJERCICIO: Demostrar que  $0 \leq W(\Phi, \Psi) \leq 1$  y que  $W(\Psi, \Psi) = 1$  •

En lo que antecede hemos presentado los postulados para sistemas con una sola partícula. La extensión a sistemas con un número arbitrario  $n$  de partículas es inmediata. En vez de  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  tendremos funciones de  $n$  coordenadas y del tiempo,  $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t)$ . La *probabilidad* de encontrar la partícula 1 en  $\mathbf{r}_1, \dots$ , la  $n$  en  $\mathbf{r}_n$ , en el instante de tiempo  $t$  es

$$\rho_\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t) = \frac{|\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t)|^2}{\int_{R^3} d^3r_1 \dots \int_{R^3} d^3r_n |\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t)|^2}. \quad (1.3.4)$$

Definimos ahora

$$\langle \Phi | \Psi \rangle \equiv \int_{R^3} d^3r_1 \dots \int_{R^3} d^3r_n \Phi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t) \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t),$$

etcétera.

#### 1.4. De nuevo las rendijas de Young. Límite clásico

Vamos a reinterpretar ahora el experimento de rendijas de Young con electrones (o cualquier otra partícula cuántica) a la luz de los postulados que acabamos de introducir. El estado de un electrón vendrá caracterizado, a su llegada al detector, y cuando sólo se abre la rendija 1, por la función de onda  $\Psi_1(x)$ ; suprimimos las variables  $y, z, t$  que aquí no juegan ningún papel. Si sólo dejamos abierta la rendija 2, la función de onda será  $\Psi_2(x)$ . Nótese que cada electrón individual llega a un lugar bien determinado; pero este lugar cambia cada vez que lanzamos un nuevo electrón, de manera que lo único que podemos decir es que cada electrón tiene una cierta probabilidad  $W_1(x) = |\Psi_1(x)|^2$  de llegar al punto  $x$  con sólo la rendija 1 abierta, y  $W_2(x) = |\Psi_2(x)|^2$  con sólo la rendija 2 abierta; suponemos las  $\Psi_j$ ,  $j = 1, 2$  normalizadas a la unidad.

Si ahora repetimos el experimento con ambas rendijas abiertas, tendremos la función de onda

$$\Psi_{12}(x) = \Psi_1(x) + \Psi_2(x),$$

y la probabilidad de que un electrón llegue a  $x$  será (ver figs. 1.2.3 y 1.4.1)

$$W_{12}(x) = \frac{|\Psi_{12}(x)|^2}{\int dx |\Psi_{12}(x)|^2} = \frac{W_1 + W_2 + 2\sqrt{W_1 W_2} \cos(\alpha_1 - \alpha_2)}{|\Psi_{12}|^2}, \quad (1.4.1)$$

donde  $\alpha_j$  es la fase de  $\Psi_j$ .

¿Qué ocurre si iluminamos una de las rendijas, como en el experimento de la figura 1.2.4? En este caso tenemos *dos* sistemas distintos: cuando hemos visto el electrón, sabemos que pasó por la rendija 1 y su función de onda es  $\Psi'_1$ ; cuando no lo hemos visto, sabemos que tuvo que pasar por la rendija 2, y su función de onda es  $\Psi'_2$ . En el primer caso su probabilidad de llegar a  $x$  es  $W'_1 = |\Psi'_1|^2$  y en el segundo es  $W'_2 = |\Psi'_2|^2$ . Los electrones que vimos/no vimos son *distintos*; no puede haber interferencias, y la probabilidad total de que un electrón llegue a  $x$  será, en este caso, simplemente  $W'_{12} = W'_1 + W'_2$ . Es



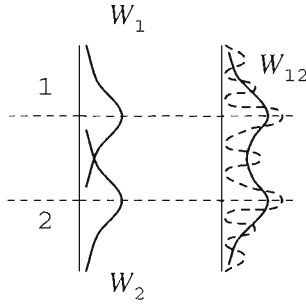


FIGURA 1.4.1.  
La probabilidad  $W_{12}$  (línea de puntos) se aproxima, en promedio, a la suma  $W_1 + W_2$  (línea continua).

importante darse cuenta de que  $\Psi'_1 \neq \Psi_1$  y  $\Psi'_2 \neq \Psi_2$ : en mecánica cuántica no puede despreciarse la interacción con los aparatos de medida ya que, en nuestro caso, la iluminación *afecta* al electrón; recuérdese el microscopio de Bohr–Heisenberg.

Volvamos al caso en que no hay iluminación. Según (1.4.1) *siempre* hay interferencia. Pero sabemos, por teoría general ondulatoria, que la distancia entre dos máximos consecutivos, que denotamos por  $\delta$ , es del orden de la longitud de onda:  $\delta \sim \lambda$ . Si  $\lambda \ll d$ , donde  $d$  es la resolución de nuestros aparatos de medida, los máximos estarán tan juntos que se verá la figura de interferencia  $W_{12}$  (representada por la línea de puntos en la fig. 1.4.1) como una línea continua  $W_1 + W_2$ . En efecto, las fluctuaciones debidas al término  $2\sqrt{W_1 W_2} \cos(\alpha_1 - \alpha_2)$  en la ec.(1.4.1) se anulan en promedio, y resultan inobservables.

Como vemos en este ejemplo, los valores de una cantidad observable en mecánica cuántica (aquí, el número de partículas que llegan a un punto) oscilan alrededor del valor que se obtendría clásicamente; y estas *fluctuaciones cuánticas* se anulan, en promedio, en el límite en el que los sistemas son grandes y la mecánica clásica es una buena aproximación. Esta situación es bastante general; más detalles sobre el límite clásico de la mecánica cuántica, que es similar a la aproximación iconal en óptica, pero es menos trivial que ésta, los veremos en la sección 4.1 y en los capítulos 8 y 10.

### PROBLEMAS

P.1.1. Una partícula vibra; su energía de vibración es  $E = 0.7$  eV. Estimar el valor de la frecuencia de vibración,  $\omega$ , para que los efectos cuánticos sean importantes, digamos del orden del 1%. ¿Cuál es el tamaño mínimo de la región en la que puede estar confinada la partícula?

*Solución.* La única cantidad con dimensiones de acción que podemos formar es  $E/\omega$ , luego debemos pedir que  $E/\omega \sim 100\hbar$ : hace falta que  $\omega \sim 10^{14}$  vibraciones por segundo.

Si la partícula está confinada en una región caracterizada por la longitud  $l$ , su velocidad media será  $v \sim l\omega$ . Esto tiene que ser menos que la velocidad de la luz,  $c \sim 3 \times 10^{10}$  cm/seg., luego  $l \sim 3 \times 10^{-6}$  metros.

P 1.2. Un virus tiene una masa de  $10^{-7}$  gramos y un tamaño de  $l \sim 10^{-4}$  centímetros. Supongamos que se mueve a una velocidad de  $10^{-3}$  cm/seg. ¿Tienen importancia los efectos cuánticos a este nivel?

*Solución.* La longitud de de Broglie es  $\lambda = h/p \sim 10^{-17}$  cm,  $10^{11}$  veces menor que el tamaño del virus. La acción característica es  $pl \sim 10^{-14}$  en unidades de centímetros, gramos y segundos, unas  $10^{13}$  veces mayor que  $\hbar$ .

## CAPÍTULO 2.

# Observables, operadores

### 2.1. Cantidades observables. Valores propios y funciones de onda propias

Consideremos una magnitud física medible de un sistema,  $F$  (a  $F$  se le llama *observable*).  $F$  puede ser, por ejemplo, la energía, momento angular, posición, etc., del sistema. Hay casos en que  $F$  puede tomar sólo un conjunto de valores discretos,  $f_n$ ,  $n = 1, 2, \dots$ ; otros observables pueden tomar un continuo de valores  $f_\lambda$ , donde el parámetro  $\lambda$  varía continuamente. Comenzaremos por el primer caso.

Supongamos que hemos hecho una medida de la cantidad  $F$  en un sistema físico, y hemos encontrado el valor  $f_n$ . Según los postulados de la mecánica cuántica, el sistema viene caracterizado por una función de onda, que denotaremos por  $\Psi_n$ ; a ella corresponde el valor  $f_n$ . En general, hay varios posibles estados (y, por tanto, varias funciones de onda linealmente independientes) que corresponden al mismo valor  $f_n$ ; esto es, el valor de  $F$  *no* determina completamente el estado del sistema. Consideramos, de momento, el caso sencillo en que el estado está determinado unívocamente (se dice en este caso que el valor  $f_n$  es *no-degenerado*) y, por tanto, sólo hay una  $\Psi_n$  (salvo una constante multiplicativa) para cada  $f_n$ . Si los valores posibles de  $F$  son  $f_1, \dots, f_n, \dots, f_N$  ( $N$  en general infinito) y las funciones de onda correspondientes son  $\Psi_1, \dots, \Psi_n, \dots, \Psi_N$ ; podemos definir un operador  $\hat{F}$  por

$$\hat{F}\Psi_n \equiv f_n\Psi_n. \quad (2.1.1)$$

A las  $f_n$  se les llama *valores propios* y a las  $\Psi_n$  *funciones, estados o vectores propios*<sup>1</sup> del operador  $\hat{F}$ . Al conjunto de valores propios de un operador se le conoce como su *espectro*.

Antes de seguir adelante con  $\hat{F}$  vamos a probar una propiedad sencilla, pero básica, de los  $\Psi_n$ . Suponemos que los  $f_1, \dots, f_n, \dots$  son todos distintos. Si preparamos el sistema de forma que su función de onda sea  $\Psi_n$ , sabemos que el valor de  $F$  es  $f_n$ . Si  $k \neq n$ , está claro que, en el estado  $\Psi_n$ , el valor de  $F$  *no* puede ser  $f_k$ : luego la probabilidad de encontrar el sistema con la función de onda  $\Psi_k$  correspondiente a  $f_k$  debe anularse. Según la ecuación (1.3.3), esta probabilidad es

$$W(\Psi_n, \Psi_k) = \frac{|\langle \Psi_n | \Psi_k \rangle|}{\|\Psi_n\| \|\Psi_k\|}.$$

<sup>1</sup> Los nombres *autovalores* y *autofunciones* también se utilizan.



Por tanto,  $\Psi_n$  y  $\Psi_k$  son ortogonales:

$$\langle \Psi_n | \Psi_k \rangle = 0, \quad n \neq k. \quad (2.1.2a)$$

Si normalizamos las probabilidades a la unidad,  $\|\Psi_j\|^2 = 1$ : las  $\Psi_j$  forman un sistema ortonormal,

$$\langle \Psi_n | \Psi_k \rangle = \delta_{nk}. \quad (2.1.2b)$$

En particular, se sigue que las  $\Psi_j$  son linealmente independientes.

Volvamos a  $\hat{F}$ . Según (2.1.1),  $\hat{F}$  sólo está definido sobre las  $\Psi_n$ ; pero podemos extenderlo a cualquier  $\Psi$  de la forma

$$\Psi = \sum_n \alpha_n \Psi_n \quad (2.1.3a)$$

por linealidad:

$$\hat{F}\Psi = \hat{F} \sum_n \alpha_n \Psi_n \equiv \sum_n \alpha_n \hat{F}\Psi_n = \sum_n f_n \alpha_n \Psi_n. \quad (2.1.3b)$$

Esto sólo nos define  $\hat{F}$  sobre los  $\Psi$  de la forma (2.1.3a). Supondremos que tales  $\Psi$  generan todo el espacio de funciones de onda (de hecho, esto puede demostrarse aunque nosotros no lo haremos), con lo que  $\hat{F}$  resulta ser un operador lineal sobre dicho espacio.

Dado un operador arbitrario,  $\hat{A}$ , se define su *adjunto*,  $\hat{A}^\dagger$ , de manera que, para cada par  $\Psi, \Phi$  se tenga que

$$\langle \Phi | \hat{A}\Psi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \Phi | \Psi \rangle.$$

Si  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ , decimos que  $\hat{A}$  es *autoadjunto*, o *hermítico*. Vamos ahora a ver una interesante conexión entre operadores autoadjuntos y observables. En general una cantidad observable puede tener valores complejos. Siempre es posible, sin embargo, descomponerla en parte real y parte imaginaria; por tanto, y sin pérdida de generalidad, nosotros consideraremos que los valores  $f_n$  son números *reales*. Demostraremos ahora que esto implica que  $\hat{F}$  es un operador autoadjunto (y reciprocamente). En efecto,

$$\begin{aligned} \langle \Psi_n | \hat{F}\Psi_k \rangle &= \langle \Psi_n | f_k \Psi_k \rangle = f_k \langle \Psi_n | \Psi_k \rangle = f_k \delta_{kn} = f_n \delta_{kn}, \\ \langle \Psi_n | \hat{F}^\dagger \Psi_k \rangle &= \langle \hat{F}\Psi_n | \Psi_k \rangle = \langle f_n \Psi_n | \Psi_k \rangle = f_n^* \delta_{kn} = f_n \delta_{kn}, \end{aligned}$$

y hemos tenido en cuenta que  $f_n$  es real. Por tanto, para cualquier  $n, k$ ,

$$\langle \Psi_n | \hat{F}\Psi_k \rangle = \langle \Psi_n | \hat{F}^\dagger \Psi_k \rangle.$$

Para cualquier par  $\Phi, \Psi$  basta desarrollarlos,

$$\Phi = \sum \alpha_n \Psi_n, \quad \Psi = \sum \beta_n \Psi_n$$

y sustituir en  $\langle \Phi | \hat{F} \Psi \rangle$ ,  $\langle \Phi | \hat{F}^\dagger \Psi \rangle$ , con lo que obtenemos

$$\langle \Phi | \hat{F} \Psi \rangle = \langle \Phi | \hat{F}^\dagger \Psi \rangle.$$

Puesto que  $\Phi$ ,  $\Psi$  son arbitrarias, esto implica que

$$\hat{F} = \hat{F}^\dagger, \quad (2.1.4)$$

como queríamos demostrar.

EJERCICIO: Demostrar el teorema recíproco, es decir: si  $\hat{F} = \hat{F}^\dagger$ , entonces las  $f_n$  son reales •

## 2.2. Valores esperados de cantidades observables

Supongamos que  $\Psi$  representa un estado arbitrario. Desarrollándolo en términos de las  $\Psi_n$  de la sección anterior tenemos

$$\Psi = \sum_n \alpha_n \Psi_n; \quad \alpha_n = \langle \Psi_n | \Psi \rangle. \quad (2.2.1)$$

En general, no existe ningún valor  $f$  del observable  $F$  que verifique  $\hat{F}\Psi = f\Psi$ . Pero, si medimos  $F$  en el estado representado por  $\Psi$ , tenemos por fuerza que encontrar alguno de los  $f_n$  ya que, por hipótesis, son los valores posibles de  $F$ .

¿Cuál es la solución de esta paradoja? Pues, simplemente, que tenemos que admitir que existen estados en los que un observable *no* tiene un valor bien definido. Si medimos  $F$  en el estado  $\Psi$  unas veces obtendremos  $f_1$ , otras  $f_2$ , otras  $f_n$ . Debido a este comportamiento aleatorio (comprobado experimentalmente infinidad de veces) lo más que podemos calcular es el *valor medio* o *valor esperado* de  $F$  en el estado  $\Psi$ , que escribiremos  $\langle \hat{F} \rangle_\Psi$ .

Para encontrar el valor de esta cantidad utilizamos que la probabilidad de encontrar el sistema, que hemos preparado en el estado con función de onda  $\Psi$ , en uno de los  $\Psi_n$  es

$$W(\Psi_n, \Psi) = \frac{|\langle \Psi_n | \Psi \rangle|^2}{\|\Psi_n\|^2 \|\Psi\|^2}.$$

Si suponemos las  $\Psi_n$  normalizadas a la unidad, (2.2.1) y (2.1.2b) nos dicen que

$$W(\Psi_n, \Psi) = \frac{|\alpha_n|^2}{\|\Psi\|^2}. \quad (2.2.2)$$

Pero, en el estado  $\Psi_n$ ,  $F$  tiene el valor bien definido  $f_n$ . Por tanto, en el estado  $\Psi$  encontramos el valor  $f_n$  precisamente con la misma probabilidad de encontrar el sistema en el estado  $\Psi_n$ , a saber,  $W(\Psi_n, \Psi) = |\alpha_n|^2 / \|\Psi\|^2$ . El valor medio de  $F$  en el estado  $\Psi_n$  es pues

$$\langle \hat{F} \rangle_\Psi = \sum_n \frac{|\alpha_n|^2}{\|\Psi\|^2} f_n. \quad (2.2.3)$$

Hay otra expresión para este valor esperado que es muy útil. Vamos a demostrar que

$$\langle \hat{F} \rangle_{\Psi} = \frac{\langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle}{\|\Psi\|^2}. \quad (2.2.4)$$

En efecto: desarrollando  $\Psi$  como en (2.2.1) y utilizando la ortonormalidad de los  $\Psi_n$  y la linealidad de  $\hat{F}$  tenemos que

$$\begin{aligned} \langle \hat{F} \rangle_{\Psi} &= \sum_{nk} \alpha_k^* \alpha_n \langle \Psi_k | \hat{F} \Psi_n \rangle \\ &= \sum_{nk} \alpha_k^* \alpha_n f_n \langle \Psi_k | \Psi_n \rangle \\ &= \sum |\alpha_n|^2 f_n, \end{aligned}$$

y hemos utilizado que  $\langle \Psi_k | \Psi_n \rangle = \delta_{kn}$ . Sustituyendo en el miembro de la derecha de (2.2.4) vemos que se obtiene el miembro de la derecha de (2.2.3), como queríamos demostrar.

Una última cuestión. Cualquier operador puede considerarse un operador integral (para la definición de éstos, ver el Apéndice I). El núcleo de  $\hat{F}$  es  $k_F$  con

$$k_F(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_n f_n \Psi_n(\mathbf{r}, t) \Psi_n^*(\mathbf{r}', t) \quad (2.2.5)$$

(para el caso de una partícula).

EJERCICIO: Demostrar (2.2.5).

*Indicación.* Aplicar el operador integral de núcleo  $k_F$  a un  $\Psi_n$  arbitrario, ver que produce el mismo resultado que  $\hat{F}$ , y extenderlo a un  $\Psi$  arbitrario por linealidad. En general,  $k_F$  es una distribución •

### 2.3. Espectro continuo

Si un observable tiene un conjunto de valores posibles (“espectro” de valores) continuo  $f_\lambda$ , donde el parámetro  $\lambda$  varía de forma continua, el formalismo de la sección anterior debe modificarse. No es posible encontrar estados físicos  $\Psi_\lambda$  tales que

$$\hat{F} \Psi_\lambda = f_\lambda \Psi_\lambda, \quad (2.3.10)$$

pero vamos a trabajar con ellos como una idealización matemática muy útil. Para ello sustituimos el conjunto continuo  $\{\lambda\}$  por uno discreto<sup>2</sup>  $\{\lambda_n\}$  que va haciéndose más y más denso hasta llenar tanto como se quiera el conjunto  $\{\lambda\}$ . En estas circunstancias el observable cuyos valores son las  $f_{\lambda_n}$  se parecerá más

<sup>2</sup> Una manera concreta de realizar esta “discretización” la veremos en la sec. 3.6.

y más al observable  $F$ . Las funciones correspondientes,  $\bar{\Psi}_{\lambda_n}$ , tenderán hacia las  $\bar{\Psi}_\lambda$ .

Las condiciones básicas que queremos retener (aparte de linealidad de  $\hat{F}$ ) son las

$$\langle \bar{\Psi}_{\lambda_k} | \bar{\Psi}_{\lambda_n} \rangle = \delta_{\lambda_k \lambda_n} \quad \text{y} \quad \bar{\Psi} = \sum_n \alpha_{\lambda_n} \bar{\Psi}_{\lambda_n}. \quad (2.3.2)$$

En el límite del continuo, las sumas se convertirán en integrales:

$$\sum_n \rightarrow \int d\lambda.$$

Para ver en qué se convierte en el caso continuo la  $\delta$  de Kronecker, la definimos por

$$\sum_k \delta_{\lambda_k \lambda_n} a(\lambda_k) = a(\lambda_n)$$

para una función arbitraria  $a$ . En el límite continuo la suma se convierte en integral y vemos que la  $\delta$  de Kronecker se debe sustituir por la de Dirac, que es la que verifica

$$\int d\mu \delta(\mu - \lambda) a(\mu) = a(\lambda).$$

Por tanto, las condiciones (2.3.2) se convertirán en

$$\langle \bar{\Psi}_\mu | \bar{\Psi}_\lambda \rangle = \delta(\mu - \lambda) \quad \text{y} \quad \bar{\Psi} = \int d\lambda a(\lambda) \bar{\Psi}_\lambda. \quad (2.3.3)$$

Está claro por qué las  $\bar{\Psi}_\lambda$  no pueden ser físicas: de (2.3.3) resulta que  $\|\bar{\Psi}\|^2 = \delta(0) = \infty$ .

En el caso más general posible tendremos mezcla de espectro discreto y continuo,  $f_n$ ,  $\bar{\Psi}_n$  y  $f_\lambda$ ,  $\bar{\Psi}_\lambda$ . Entonces,

$$\langle \bar{\Psi}_k | \bar{\Psi}_n \rangle = \delta_{kn}, \quad \langle \bar{\Psi}_\mu | \bar{\Psi}_\lambda \rangle = \delta(\mu - \lambda), \quad \langle \bar{\Psi}_n | \bar{\Psi}_\lambda \rangle = 0$$

y un estado general  $\bar{\Psi}$  se escribirá como

$$\bar{\Psi} = \sum_n \alpha_n \bar{\Psi}_n + \int d\lambda \alpha(\lambda) \bar{\Psi}_\lambda.$$

A partir de ahora no haremos diferencia entre un observable  $F$  y el operador que lo representa,  $\hat{F}$ .

## 2.4. Observables compatibles

Sean  $F$  y  $G$  dos cantidades observables. En mecánica clásica podemos medir simultáneamente, y con tanta precisión como queramos, los valores de las dos. En mecánica cuántica esto no es cierto en general. Así, si  $F$  representa al momento  $p$  y  $G$  a la posición,  $x$ , de una partícula, la relación de incertidumbre de Heisenberg que ya hemos mencionado dice que  $\Delta p \Delta x \geq \frac{1}{2} \hbar$ . Por ello, cuanto mejor intentemos medir la posición de una partícula, más incertidumbre tendremos en el conocimiento de su momento.

Hay casos particulares, sin embargo, en los que  $F$  y  $G$  sí se pueden medir simultáneamente con tanta precisión como queramos; por ejemplo, la energía y el momento angular de un sistema aislado. En este caso se dice que los observables  $F$  y  $G$  son *compatibles*.

Veamos cómo se traduce esto matemáticamente. Puesto que  $F$  y  $G$  son compatibles, podemos escoger estados  $\Psi_n$  en los que  $F$  y  $G$  tienen, a la vez, valores bien definidos<sup>3</sup>  $f_n$  y  $g_n$ , respectivamente:

$$\hat{F}\Psi_n = f_n\Psi_n; \quad \hat{G}\Psi_n = g_n\Psi_n. \quad (2.4.1)$$

Para un estado arbitrario,  $\Psi = \sum \alpha_n \Psi_n$ , calculemos  $\hat{F}\hat{G}\Psi$ . Se tiene,

$$\begin{aligned} \hat{F}\hat{G}\Psi &= \sum_n \alpha_n \hat{F}\hat{G}\Psi_n = \sum_n \alpha_n g_n \hat{F}\Psi_n \\ &= \sum_n \alpha_n f_n g_n \Psi_n \end{aligned}$$

y hemos utilizado linealidad de los  $F$ ,  $G$ . Análogamente comprobaríamos que se tiene, también,

$$\hat{G}\hat{F}\Psi = \sum_n \alpha_n f_n g_n \Psi_n.$$

Puesto que los miembros de la derecha son iguales, esto implica que  $\hat{F}\hat{G}\Psi = \hat{G}\hat{F}\Psi$ ; y, ya que  $\Psi$  es arbitrario, debemos tener

$$\hat{F}\hat{G} = \hat{G}\hat{F}. \quad (2.4.2a)$$

Si, para dos operadores cualesquiera  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$  definimos su *conmutador*  $[\hat{A}, \hat{B}]$  por

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A},$$

resulta que hemos demostrado que, si dos observables  $F$  y  $G$  son compatibles, su conmutador se anula:

$$[\hat{F}, \hat{G}] = 0. \quad (2.4.2b)$$

El recíproco también es cierto: si  $\hat{F}$  y  $\hat{G}$  conmutan, se pueden encontrar estados  $\Psi_n$  que verifiquen (2.4.1). Si  $\hat{F}$  y  $\hat{G}$  fuesen matrices finitas, esto sería una consecuencia inmediata del conocido teorema que dice que dos matrices

<sup>3</sup> Suponemos que los espectros de  $F$  y  $G$  son ambos discretos; la extensión al caso de espectros continuos o mixtos no presenta problemas y se deja como ejercicio.



autoadjuntas que conmutan se pueden diagonalizar simultáneamente. En el caso general la demostración es muy complicada y nosotros no la haremos; ver p. ej., von Neumann (1932).

Ahora vemos por qué en mecánica cuántica hay cantidades que no son medibles simultáneamente: sus operadores correspondientes no conmutan. Por ejemplo, si  $\hat{Q}$  es el operador posición y  $\hat{P}$  el momento, demostraremos en la sección 3.4 que verifican

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar \neq 0.$$

En el límite clásico esperamos que los conmutadores tiendan a cero con  $\hbar$ , de manera que podamos despreciarlos si las dimensiones características del sistema son mucho mayores que  $\hbar$ ; con lo cual, la incompatibilidad entre sus medidas será despreciable.

## 2.5. Valores propios degenerados. Conjuntos completos de observables

Ahora podemos ya tratar el caso de valores propios degenerados, esto es, cuando a los valores propios  $f_n$  de un observable  $\hat{F}$  corresponden varias funciones de onda linealmente independientes, que distinguiremos con el índice  $j$ :  $\Psi_{n;j}$ ,  $j = 1, 2, \dots$ . Tenemos pues,

$$\hat{F}\Psi_{n;j} = f_n\Psi_{n;j}. \quad (2.5.1)$$

Puesto que dos de ellas, digamos  $\Psi_{n;j}$  y  $\Psi_{n;j'}$ ,  $j \neq j'$ , corresponden por hipótesis a estados distintos, tiene que diferir en el valor de algún observable. Sea  $\hat{G}$  este observable; entonces,

$$\hat{G}\Psi_{n;j} = g_{n;j}\Psi_{n;j}. \quad (2.5.2)$$

EJERCICIO: Utilizando (2.5.1) y (2.5.2) demostrar que  $[\hat{F}, \hat{G}] = 0$  •

Es posible que todos los  $g_{n;j}$  sean distintos para distintos  $j$ . Si no lo fuesen, y hubiera varios vectores  $\Psi_{n;j;l}$ ,  $l = 1, 2, \dots$  linealmente independientes, éstos también representarían estados distintos; luego tendría que haber un nuevo observable,  $\hat{H}$ , que distinguiera entre ellos. Prosiguiendo el proceso, llegamos finalmente a un conjunto de observables

$$\hat{F}, \hat{G}, \hat{H}, \dots, \hat{Y}, \hat{Z}$$

tales que todos conmutan entre sí,

$$[\hat{F}, \hat{G}] = 0, [\hat{F}, \hat{Z}] = 0, \dots, [\hat{Y}, \hat{Z}] = 0$$

y un conjunto de vectores  $\Psi_{n;j;l;\dots;s}$  tales que

$$\begin{aligned} \hat{F}\Psi_{n;j;l;\dots;s} &= f_n\Psi_{n;j;l;\dots;s}; & \hat{G}\Psi_{n;j;l;\dots;s} &= g_{n;l}\Psi_{n;j;l;\dots;s}; \\ & \dots & \hat{Z}\Psi_{n;j;l;\dots;s} &= z_{n;l;\dots;s}\Psi_{n;j;l;\dots;s} \end{aligned}$$

y los  $\Psi_{n;j;l,\dots;s}$  son *únicos* salvo, como siempre, una constante multiplicativa.

A un conjunto como el  $\hat{F}, \hat{G}, \hat{H} \dots, \hat{Y}, \hat{Z}$  de observables que definen *completamente* el estado de un sistema se le llama *conjunto completo de observables compatibles*. Aunque nosotros hemos dado argumentos *intuitivos* que indican su existencia, la demostración rigurosa, que se puede encontrar en el texto de von Neumann (1932), es muy complicada. De hecho, en teoría relativista (teoría cuántica de campos) el conjunto  $\hat{F}, \hat{G}, \dots$  necesariamente requiere *infinitos* operadores.

El conjunto  $\hat{F}, \hat{G}, \hat{H} \dots, \hat{Y}, \hat{Z}$  no es único. Si hubiéramos empezado con un operador  $\hat{F}'$  que no conmutase con  $\hat{F}$  habríamos encontrado otro conjunto distinto. Ejemplos de conjuntos completos los veremos a lo largo del texto.

## 2.6. Principio de correspondencia

Sea  $\hat{F}$  un observable y consideremos un sistema cuántico con función de onda  $\Psi$ . Sabemos que el valor medio de  $\hat{F}$  en este estado viene dado por

$$\langle \hat{F} \rangle_{\Psi} = \langle \Psi | \hat{F} \Psi \rangle. \quad (2.6.1)$$

La mecánica clásica representa una buena aproximación a la naturaleza para objetos macroscópicos; esto quiere decir que, si  $\Psi$  representa un sistema cuyas dimensiones típicas son grandes comparadas con  $\hbar$ , los valores medios calculados con la fórmula (2.6.1) tienen que coincidir, despreciando términos de orden  $\hbar$ , con las correspondientes cantidades clásicas, que denotamos por  $F_{cl}$ . En fórmulas,<sup>4</sup>

$$\langle \hat{F} \rangle_{\Psi} \sim F_{cl}, \text{ es decir } \langle \hat{F} \rangle_{\Psi} = F_{cl} + O(\hbar). \quad (2.6.2)$$

Esto es parte del llamado *principio de correspondencia*. Su formulación completa incluye la siguiente hipótesis: si el observable clásico  $F_{cl}$  es una función de los  $G_{cl}, \dots, Z_{cl}$ ,  $F_{cl} = \varphi(G_{cl}, \dots, Z_{cl})$ , entonces, y salvo quizá términos de orden  $\hbar$ , el correspondiente operador cuántico  $\hat{F}$  viene dado por la misma función de los  $\hat{G} \dots \hat{Z}$ :

$$\hat{F} = \varphi(\hat{G}, \dots, \hat{Z}) + O(\hbar). \quad (2.6.3)$$

Aunque útil heurísticamente para sugerir la forma de operadores en mecánica cuántica, el principio de correspondencia (debido a Bohr) ni es riguroso ni completo; en efecto, no nos indica los términos  $O(\hbar)$  en (2.6.3) y, además, hay observables y situaciones cuánticas que no tienen análogo clásico.

EJERCICIO: Demostrar que si  $\hat{F} = \varphi(\hat{G})$ ,  $\hat{F}$  y  $\hat{G}$  conmutan •

<sup>4</sup> A veces la diferencia es de orden fraccionario; por ejemplo, a veces se tiene  $\langle \hat{F} \rangle = F_{cl} + O(\hbar^{1/2})$ . Seguiremos escribiendo (2.6.2) por simplicidad.

EJERCICIO: Demostrar que, si  $\hat{F} = \varphi(\hat{G})$ , los valores propios  $f_n, g_n$  satisfacen  $f_n = \varphi(g_n)$ .

*Indicación.* Desarrollar  $\varphi$  en serie,

$$\hat{F} = \varphi(\hat{G}) = \sum_n \frac{\varphi^{(n)}(0)}{n!} \hat{G}^n,$$

y aplicar los dos miembros de la igualdad a las funciones de onda  $\Psi_n$  que satisfacen  $\hat{G}\Psi_n = g_n\Psi_n$  •

### PROBLEMAS

P.2.1. Supongamos que el espacio de los estados de un sistema fuese de dimensión finita,  $n$ .

A) Dado el observable

$$\hat{F} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & \lambda_j & \\ & & & \ddots \\ 0 & & & & \lambda_n \end{pmatrix},$$

con  $\lambda_i \neq \lambda_j$  para  $i \neq j$ , demostrar que todo observable que conmuta con  $\hat{F}$  es función de  $\hat{F}$ .

B) Supóngase que  $\lambda_1 = \lambda_2$ , pero todos los demás  $\lambda_j$  son distintos entre sí, y de los dos primeros. Complétese un conjunto completo de observables.

*Solución.* Cualquier  $\hat{G} = (g_{ij})$  con  $g_{ij} = \mu_i \delta_{ij}$  con  $\mu_1 \neq \mu_2$ .

P.2.2. Imaginar aparatos que midan los siguientes observables de una partícula: momento, energía y momento angular. Supóngase que la partícula tiene carga eléctrica.

P.2.3. Demostrar que, si  $[\hat{A}, \hat{B}]$  conmuta con ambos  $\hat{A}$  y  $\hat{B}$ , entonces

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = \exp\left(\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]\right).$$

## CAPÍTULO 3.

### Paquetes de onda. Operadores posición y momento. Relación de incertidumbre. Formulación en un retículo

#### 3.1. Ondas planas. Paquetes de onda. Gaussianas

La función de onda más sencilla es una onda plana,

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = C e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}. \quad (3.1.1)$$

Aquí,  $\omega$  es la *frecuencia* (angular) y  $\mathbf{k}$  el *vector número de ondas*, relacionado con la longitud de onda racionalizada,  $\lambda = \lambda/2\pi$  por  $\lambda = 1/|\mathbf{k}|$ .  $C$  es una constante.

Está claro que (3.1.1) es una idealización matemática. En efecto, la probabilidad de encontrar la partícula en cualquier punto del espacio es la misma, puesto que  $|\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|^2 = |C|^2$ . La integral  $\int d^3r |\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|^2$  es divergente.

Para formar funciones de onda físicamente aceptables tenemos que considerar *paquetes de onda*, superposiciones de ondas planas con un cierto peso:

$$\Psi_f(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k f(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (3.1.2)$$

El factor  $1/(2\pi)^{3/2}$  se introduce por comodidad posterior.

Un caso sencillo es el de una distribución de pesos tipo Poisson (o *gausiana*) en la que  $f$  es independiente del tiempo e igual a  $f_a$  con  $a$  positivo y tal que

$$f_a(\mathbf{k}) = C e^{-\frac{1}{2}a^2(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)^2}. \quad (3.1.3)$$

Si consideramos el caso de una dimensión, omitimos la dependencia en el tiempo, por simplificar, y definimos entonces

$$\Psi_f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk f(k) e^{ikx},$$

entonces la integral (3.1.2) es elemental y encontramos

$$\begin{aligned} \Psi_a &\equiv \Psi_{f_a} = \frac{C}{a} e^{-x^2/2a^2} e^{ik_0x}; \\ |C| &= a^{1/2} \pi^{-1/4} \quad \text{para } \|\Psi_a\| = 1. \end{aligned} \quad (3.1.4)$$

Esta función de onda representa una partícula localizada en una región del espacio  $|x| \lesssim a$ . En efecto,

$$|\Psi_a(x)|^2 = \frac{|C|^2}{a^2} e^{-x^2/a^2}.$$

Si  $|x| \gg a$ , la exponencial es muy pequeña, mientras que, para  $|x| \ll a$ ,  $e^{-x^2/a^2} \simeq 1$ . La onda plana puede considerarse como un caso límite del paquete (3.1.4) cuando  $a$  es muy grande.

Volvamos a dimensión 3. La condición de normalización

$$\int_{R^3} d^3r |\Psi_f(\mathbf{r}, t)|^2 = \text{finito}$$

se cumple si, y sólo si,

$$\int_{R^3} d^3k |f(\mathbf{k})|^2 = \text{finito}.$$

En efecto, aplicando conocidas fórmulas de transformación de Fourier (ver Apéndices I, II) resulta que

$$\int_{R^3} d^3r |\Psi_f(\mathbf{r}, t)|^2 = \int_{R^3} d^3k |f(\mathbf{k})|^2 \quad (3.1.5)$$

(esta es, por supuesto, la razón del coeficiente  $1/(2\pi)^{3/2}$  en (3.1.2)). En particular, para la  $f_a$  de (3.1.3),

$$\int_{R^3} d^3k |f_a(\mathbf{k})|^2 = |C|^2 \int_{R^3} d^3k e^{-a^2(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)^2} = \frac{|C|^2}{a^3} \pi^{3/2}.$$

Continuando con este ejemplo gaussiano, es interesante notar que la región en la que está concentrada la partícula,  $\Delta|\mathbf{r}| \sim a$  es el inverso de la dispersión en  $k$ :  $|f_a(\mathbf{k})|^2$  sólo difiere apreciablemente de cero cuando  $|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0| \ll 1/a$ ; si  $|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0| \gg 1/a$ , entonces  $\exp\{-a^2(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2\}$  es mucho menor que la unidad.

Un resultado que nos va a ser muy útil es que *cualquier* función de onda puede escribirse como un paquete de ondas. En efecto, sea  $\Psi(\mathbf{r})$  una función de onda cualquiera; omitimos a veces la variable temporal, que no juega aquí ningún papel. Utilizando fórmulas de transformación de Fourier, y denotando por  $\tilde{\Psi}$  a la transformada de Fourier (inversa) de  $\Psi$  tenemos

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3r e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}). \quad (3.1.6)$$

Invirtiéndolo, y escribiendo el tiempo explícitamente,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \tilde{\Psi}(\mathbf{k}, t) \quad (3.1.7)$$

que es de la forma (3.1.2) con  $f = \tilde{\Psi}$ .

Si dividimos el espacio de las  $\mathbf{k}$  en celdas de volumen  $V$ , y escogemos  $\mathbf{k}_j$  en el interior de la celda  $j$ -ésima, la definición de integral de Riemann nos permite reescribir (3.1.7) como

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \lim_{V \rightarrow 0} \sum_j \alpha_j(V, t) e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}}, \quad (3.1.8a)$$

donde hemos definido los números  $\alpha_j(V, t)$  por

$$\alpha_j(V, t) = \frac{V}{(2\pi)^{3/2}} \tilde{\Psi}(\mathbf{k}_j, t). \quad (3.1.8b)$$

Esta expresión (3.1.8) nos dice que *cualquier función de onda es el límite de una superposición de ondas planas*. Por tanto, dado un operador lineal nos basta saberlo aplicar a ondas planas para poderlo extender a cualquier función de onda por linealidad. Este resultado nos va a ser útil muy pronto.

### 3.2. Operador posición

Ya hemos dicho que la probabilidad de encontrar una partícula con función de onda  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  en el punto  $\mathbf{r}$  (en el instante de tiempo  $t$ ) es  $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ , normalizando probabilidades a la unidad de manera que  $\|\Psi\| = 1$ . Si denotamos por  $\hat{Q}$  al operador que representa la posición en mecánica cuántica, el valor medio de la componente  $j$  ( $j = 1, 2, 3$ ) de la posición será pues

$$\langle \hat{Q}_j \rangle_\Psi = \int d^3r r_j |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \int d^3r \Psi^*(\mathbf{r}, t) r_j \Psi(\mathbf{r}, t).$$

Según la regla general, dada por la ecuación (2.6.1), esto tiene que coincidir con

$$\langle \Psi | \hat{Q}_j | \Psi \rangle = \int d^3r \Psi^*(\mathbf{r}, t) \left( \hat{Q}_j \Psi(\mathbf{r}, t) \right).$$

Puesto que esto ha de ser cierto para cualquier  $\Psi$  se sigue que

$$\hat{Q}_j \Psi(\mathbf{r}, t) = r_j \Psi(\mathbf{r}, t) : \quad (3.2.1)$$

el *operador posición*  $\hat{Q}_j$  es, simplemente, el producto por la variable  $r_j$ .

Como ejercicio, calculemos el valor esperado de  $\hat{Q}$  (en una dimensión) en el estado (3.1.4):

$$\langle Q \rangle_{\Psi_0} = \frac{|C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx x e^{-x^2/a^2}}{|C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2/a^2}} = 0.$$

La partícula se encuentra, en promedio, en el origen de coordenadas. Un estado de una partícula localizada en un  $x_0$  dado se obtiene desplazando:

$$\Psi_{x_0}(x, t) = \frac{C}{a} e^{-(x-x_0)^2/2a^2} e^{ik_0 x}. \quad (3.2.2)$$

EJERCICIO: Demostrar la fórmula siguiente:

$$\langle Q \rangle_{\Psi_{x_0}} = x_0 \quad \bullet$$

En estadística, la *dispersión (cuadrática)* de una cantidad  $F$  aleatoria se define como la diferencia entre el valor esperado del cuadrado de dicha cantidad, y el cuadrado del valor esperado. Si denotamos por  $\Delta F$  a la dispersión entonces, en mecánica cuántica, y para un observable  $F$ , tenemos

$$(\Delta F)_{\Psi}^2 \equiv \langle \hat{F}^2 \rangle_{\Psi} - \langle \hat{F} \rangle_{\Psi}^2, \quad \text{si } \|\Psi\| = 1. \quad (3.2.3a)$$

$(\Delta F)_{\Psi}$  puede tomarse como una medida de la *incertidumbre* con la que se conoce la cantidad  $F$ , en el estado  $\Psi$ .

EJERCICIO: Demostrar que, si  $\hat{F}$  es autoadjunto,  $\Delta F$  es siempre mayor o igual que cero

*Indicación.* Cuando  $\Psi$  no está normalizado, (3.2.3a) se sustituye por

$$(\Delta F)_{\Psi}^2 = \frac{\langle \Psi | \hat{F}^2 \Psi \rangle}{\|\Psi\|^2} - \frac{\langle \Psi | \hat{F} \Psi \rangle^2}{\|\Psi\|^4}. \quad (3.2.3b)$$

Tenemos que demostrar, pues, que

$$\|\Psi\|^2 \langle \Psi | \hat{F}^2 \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{F} \Psi \rangle^2$$

es positivo. Desarrollemos  $\Psi$  en los  $\Psi_n$  con  $\hat{F}\Psi_n = f_n\Psi_n$ .  $\Psi = \sum_n \alpha_n \Psi_n$ . Sustituyendo, podemos escribir la expresión de más arriba como

$$\frac{1}{2} \sum_{nk} |\alpha_n|^2 |\alpha_k|^2 (f_n^2 + f_k^2 - 2f_n f_k),$$

lo que evidentemente es positivo  $\bullet$

Para el operador  $\hat{Q}$  y el estado  $\Psi_a$  de (3.1.4),

$$(\Delta Q)_{\Psi_a}^2 = \frac{\frac{|C|^2}{a^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 e^{-x^2/a^2}}{\frac{|C|^2}{a^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2/a^2}} = \frac{a^2}{2}.$$

Nótese que la constante  $C$  se cancela, como debe ser; la cantidad medible  $(\Delta Q)_{\Psi_a}^2$  no puede depender de una constante arbitraria. El resultado

$$\Delta Q = a/\sqrt{2}, \quad (3.2.4)$$

lo habíamos visto cualitativamente antes.

EJERCICIO: Demostrar que también se tiene  $(\Delta Q)_{\Psi_{x_0}} = a/\sqrt{2}$  donde  $\Psi_{x_0}$  es la función de onda desplazada de (3.2.2)  $\bullet$

### 3.3. Operador momento

Para obtener el operador momento comenzamos con una onda plana,

$$C e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)}.$$

La relación de de Broglie nos dice que  $p_j = \hbar k_j$  es el valor de la componente  $j$  del momento correspondiente. Si denotamos por  $\hat{P}_j$  a la componente  $j$  del operador momento, *definimos*, de acuerdo con esto,

$$\hat{P}_j e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)} = \hbar k_j e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)}. \quad (3.3.1)$$

Par encontrar la acción de  $\hat{P}_j$  sobre una función de onda arbitraria comenzamos por reescribir (3.3.1) idénticamente como

$$\hat{P}_j e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)} \equiv \hbar k_j e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_j} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)}.$$

Utilizando (3.1.8) y que  $\hat{P}_j$  es lineal,

$$\begin{aligned} \hat{P}_j \Psi(\mathbf{r}, t) &= \lim_{V \rightarrow 0} \sum_n \alpha_n(V, t) \hat{P}_j e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \\ &= \lim_{V \rightarrow 0} \sum_n \alpha_n(V, t) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_j} \right) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_j} \lim_{V \rightarrow 0} \sum_n \alpha_n(V, t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_j} \Psi(\mathbf{r}, t); \end{aligned}$$

en el penúltimo paso hemos utilizado que los  $\alpha_n(V, t)$  no dependen de  $\mathbf{r}$  para sacar la derivada a la izquierda. Por tanto, hemos encontrado que, para una función de onda arbitraria,

$$\hat{P}_j \Psi(\mathbf{r}, t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_j} \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (3.3.2a)$$

es decir,

$$\hat{P}_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_j}. \quad (3.3.2b)$$

En notación vectorial,

$$\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar \nabla = -i\hbar \text{grad} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}. \quad (3.3.2c)$$



EJERCICIO: Demostrar que los  $\hat{Q}$ ,  $\hat{P}$  son autoadjuntos •

Calculemos (en una dimensión) el valor medio de  $\hat{P}$  en el estado (3.1.4):

$$\langle P \rangle_{\psi_a} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2a^2}} e^{ik_0x} \left\{ -i\hbar \left( \frac{x}{a^2} + ik_0 \right) e^{-\frac{x^2}{2a^2}} e^{ik_0x} \right\}}{\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{x^2}{a^2}}} = \hbar k_0,$$

como era de esperar. La dispersión es, tomando para facilitar el cálculo  $k_0 = 0$ ,

$$(\Delta P)_{\psi_a}^2 = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{x^2}{a^2}} (-i^2 \hbar^2 / a^2 + i^2 \hbar^2 x^2 / a^4)}{\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{x^2}{a^2}}} = \frac{\hbar^2}{2a^2}.$$

Por tanto,

$$(\Delta P)_{\psi_a} = \frac{\hbar}{a\sqrt{2}}, \quad (3.3.3)$$

lo que habíamos visto cualitativamente en la sección 3.1. De (3.2.4) y (3.3.3) se sigue que

$$(\Delta Q)_{\psi_a}^2 (\Delta P)_{\psi_a}^2 = \hbar/2. \quad (3.3.4)$$

Ésta es la *relación de incertidumbre* de Heisenberg. La igualdad (3.3.4) vale para paquetes de onda de tipo gaussiano; en general, y como demostraremos en la próxima sección, se tiene

$$(\Delta Q_j)_{\psi}^2 (\Delta P_j)_{\psi}^2 \geq \hbar/2, \quad j = 1, 2, 3. \quad (3.3.5)$$

### 3.4. Relaciones de conmutación

Aplicemos el conmutador  $[\hat{Q}_j, \hat{P}_l]$  a una función de onda arbitraria,  $\Psi$ :

$$\begin{aligned} \hat{Q}_j \hat{P}_l \Psi &= -i\hbar \hat{Q}_j \frac{\partial \Psi}{\partial r_l} = -i\hbar r_j \frac{\partial \Psi}{\partial r_l}; \\ \hat{P}_l \hat{Q}_j \Psi &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_l} (r_l \Psi) = -i\hbar \delta_{jl} \Psi - i\hbar r_j \frac{\partial \Psi}{\partial r_l}. \end{aligned}$$

Restando,

$$[\hat{Q}_j, \hat{P}_l] \Psi = i\hbar \delta_{jl} \Psi,$$

y, puesto que  $\Psi$  es arbitraria hemos demostrado las *relaciones de conmutación de Heisenberg*,

$$[\hat{Q}_j, \hat{P}_l] = i\hbar \delta_{jl}. \quad (3.4.1)$$

Ahora ya podemos demostrar la relación (3.3.5) con toda generalidad. Para ello escojamos un sistema de referencia en el que  $\langle \mathbf{P} \rangle_{\psi} = 0$ , y un origen de coordenadas tal que  $\langle \mathbf{Q} \rangle_{\psi} = 0$ . Evidentemente, sea cual sea  $\lambda$ ,

$$\|(\hat{Q}_j + i\lambda \hat{P}_j)\Psi\| \geq 0.$$

Por tanto, para todo  $\lambda$  real y escogiendo la normalización de forma que  $\|\Psi\| = 1$ ,

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle (\hat{Q}_j + i\lambda\hat{P}_j)\Psi | (\hat{Q}_j + i\lambda\hat{P}_j)\Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | (\hat{Q}_j - i\lambda\hat{P}_j)(\hat{Q}_j + i\lambda\hat{P}_j)\Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \left( \hat{Q}_j^2 + \lambda^2\hat{P}_j^2 + i\lambda[\hat{Q}_j, \hat{P}_j] \right) \Psi \rangle = (\Delta Q_j)_{\Psi}^2 + \lambda^2(\Delta P_j)_{\Psi}^2 - \lambda\hbar. \end{aligned}$$

La condición de positividad para todo  $\lambda$  es que el discriminante sea negativo, esto es,

$$\hbar^2 - 4(\Delta Q_j)_{\Psi}^2(\Delta P_j)_{\Psi}^2 \leq 0,$$

lo que implica (3.3.5).

**EJERCICIO:** Demostrar que, en general,  $(\Delta P_j)_{\Psi}^2$  no depende del sistema de referencia, ni  $(\Delta Q_j)_{\Psi}^2$  del origen de coordenadas.

*Solución.* Para, por ejemplo, el primero, al pasar a un sistema de referencia que se mueve con una velocidad  $v$  con respecto al original debemos cambiar el operador  $\hat{P} \rightarrow \hat{P}' = \hat{P} + mv$  donde  $m$  es la masa de la partícula y trabajamos en una dimensión para simplificar. Nótese que  $v$  representa una velocidad clásica; los sistemas de referencia los consideramos macroscópicos. Se tiene,

$$\begin{aligned} (\Delta P')_{\Psi}^2 &= \langle \hat{P}'^2 \rangle_{\Psi} - \langle \hat{P}' \rangle_{\Psi}^2 = \langle \Psi | (\hat{P}^2 + m^2v^2 - 2mv\hat{P})\Psi \rangle \\ &\quad - \{ \langle \Psi | \hat{P}\Psi \rangle^2 + m^2v^2\langle \Psi | \Psi \rangle^2 - 2mv\langle \Psi | \hat{P}\Psi \rangle \} \\ &= (\Delta P)_{\Psi}^2 \end{aligned}$$

ya que los demás términos se cancelan unos con otros •

Un último comentario para acabar la sección. Nosotros estamos desarrollando la mecánica cuántica a partir de la función de onda; y, de ella, hemos deducido la forma de  $\hat{Q}_j$ ,  $\hat{P}_j$  y la relación de conmutación de Heisenberg, (3.4.1). Es posible, sin embargo, seguir el camino opuesto: *postular* (3.4.1) y, de aquí, deducir la función de onda y de hecho toda la mecánica cuántica. Esto lo veremos en la sección 4.4.

### 3.5. Funciones y valores propios de $\hat{Q}$ y $\hat{P}$ . Representación de momentos

La ecuación de valores propios para el operador posición es

$$\hat{Q}_j\Psi_{\lambda}(\mathbf{r}, t) = \lambda_j\Psi_{\lambda}(\mathbf{r}, t), \quad (3.5.1)$$

esto es,  $(r_j - \lambda_j)\Psi_{\lambda}(\mathbf{r}, t) = 0$ . La única solución de esta ecuación es proporcional a la delta de Dirac:<sup>1</sup>

$$\Psi_{\lambda}(\mathbf{r}, t) = C(t)\delta(\mathbf{r} - \lambda). \quad (3.5.2)$$

<sup>1</sup> La definición y propiedades de la delta de Dirac pueden verse en el Apéndice II.

El espectro de  $\hat{\mathbf{Q}}$  es continuo, y las funciones de onda correspondientes son, en consecuencia, impropias:

$$\langle \Psi_{\boldsymbol{\lambda}} | \Psi_{\boldsymbol{\mu}} \rangle = |C|^2 \int d^3r \delta(\mathbf{r} - \boldsymbol{\lambda}) \delta(\mathbf{r} - \boldsymbol{\mu}) = |C|^2 \delta(\boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\mu}).$$

Para el operador momento la ecuación de valores propios

$$\hat{P}_j \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = p_j \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \quad (3.5.3)$$

se convierte en las ecuaciones diferenciales

$$\frac{\partial}{\partial r_j} \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{i}{\hbar} p_j \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t),$$

con solución

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = C(\mathbf{p}, t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar. \quad (3.5.4)$$

También aquí el espectro es continuo y las funciones de onda impropias:

$$\langle \Psi_{\mathbf{p}} | \Psi_{\mathbf{p}'} \rangle = |C|^2 \int d^3r e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{r}/\hbar} = |C|^2 (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}').$$

El que las funciones de onda propias de  $\hat{Q}_j$ ,  $\hat{P}_j$  sean no-normalizables era de esperar: debido a la relación de incertidumbre es imposible tener un estado con posición o momento totalmente definidos.

Los conjuntos  $\{\hat{Q}_j\}$ ,  $\{\hat{P}_j\}$ ,  $j = 1, 2, 3$  nos proporcionan dos primeros ejemplos de conjuntos completos de observables compatibles, para una partícula. En efecto, dados los tres valores propios ( $\boldsymbol{\lambda}$ , o  $\mathbf{p}$ ) los estados están perfectamente determinados; las funciones de onda propias son únicas, salvo la inevitable constante multiplicativa.

Consideremos una función arbitraria,  $\Psi$ . Desarrollándola en funciones propios de  $\hat{\mathbf{Q}}$ , (3.5.2) con  $C = 1$ , tenemos

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \int d^3\lambda \alpha_{\Psi}(\boldsymbol{\lambda}, t) \delta(\boldsymbol{\lambda} - \mathbf{r}) = \alpha_{\Psi}(\mathbf{r}, t).$$

Los coeficientes del desarrollo coinciden con la propia función de onda.

Si hubiésemos desarrollado en funciones propias de  $\hat{\mathbf{P}}$ , (3.5.4) con  $C = 1$ , obtendríamos

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3p \alpha_{\Psi}(\mathbf{p}, t) e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}. \quad (3.5.5a)$$

Podemos pues identificar los coeficientes del desarrollo con la transformada de Fourier inversa de la función de onda, salvo una constante. Denotando a esta transformada por  $\tilde{\Psi}$  tenemos, en efecto,

$$\begin{aligned} \alpha_{\Psi}(\mathbf{p}, t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t); \\ \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} \Psi(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (3.5.5b)$$

Como es lógico, podemos identificar un estado o por la propia función de onda  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , a la que (si hace falta precisar) se llama *función de onda en espacio*, o *representación de posición*, o por sus coeficientes en cualquier base. Por tanto, podemos describir un estado por la función  $\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)$  a la que se conoce como *función de onda en espacio (o representación) de momentos*. Esta denominación viene justificada por la siguiente propiedad:  $|\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)|^2$  es la probabilidad de encontrar la partícula con momento  $\mathbf{p}$ .

EJERCICIO: A) Demostrar esta última afirmación. B) Demostrar que

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \int_{R^3} d^3r \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Phi(\mathbf{r}, t) = \int_{R^3} d^3p \tilde{\Psi}^*(\mathbf{p}, t) \tilde{\Phi}(\mathbf{p}, t) \quad (3.5.6)$$

lo que da la forma del producto escalar en espacio de momentos •

En las secciones 3.2, 3.3 hemos encontrado la forma de  $\hat{\mathbf{Q}}$ ,  $\hat{\mathbf{P}}$  en espacio de posición. Vamos a ver ahora su expresión en espacio de momentos. Comencemos por  $\hat{\mathbf{P}}$ . Puesto que  $|\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)|^2$  es la probabilidad de encontrar la partícula con momento  $\mathbf{p}$ , está claro que

$$\hat{P}_j \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) = p_j \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t). \quad (3.5.7)$$

La forma de  $\hat{\mathbf{Q}}$  es algo más complicada de encontrar. Utilizando (3.5.5) y la forma conocida de actuación de  $\hat{\mathbf{Q}}$  sobre  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ ,

$$\begin{aligned} \hat{Q}_j \Psi(\mathbf{r}, t) = r_j \Psi(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} r_j \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \left( \frac{\partial}{\partial p_j} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} \right) \frac{\hbar}{i} \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} i\hbar \frac{\partial}{\partial p_j} \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t), \end{aligned}$$

y en el último paso hemos integrado por partes. Pero, por otra parte, y dado que  $\hat{\mathbf{Q}}$  es lineal y una integral es (el límite de) una suma,

$$\hat{Q}_j \Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} \hat{Q}_j \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t).$$

Igualando, hemos encontrado que

$$\hat{Q}_j \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_j} \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t). \quad (3.5.8)$$

$\hat{\mathbf{Q}}$  es sencillo en espacio de posición, y  $\hat{\mathbf{P}}$  en espacio de momentos.

EJERCICIO: Demostrar (3.5.7) utilizando el mismo método que hemos seguido para probar (3.5.8) •

### 3.6. Discretización de espectros continuos: mecánica cuántica en un retículo

En la sección 2.3 se dijo que si un operador tiene espectro continuo, siempre se puede aproximar por uno con espectro discreto. En la presente sección veremos un importante ejemplo de cómo se puede implementar esto.

Comencemos por el operador posición, y trabajemos de momento en una dimensión. El espectro de  $\hat{Q}$ ,  $\hat{Q}\Psi(x, t) = x\Psi(x, t)$ , es continuo porque la variable  $x$  recorre toda la recta real. Para discretizarlo, vamos a sustituir esta recta (que denotamos por  $R$ ) por el conjunto de puntos  $R^a$  de la forma  $x_n = na$  con  $n$  entero, positivo, negativo o nulo.  $a$  es una longitud elemental que podemos interpretar como la precisión máxima de nuestros aparatos de medida de longitudes. El espacio  $L^2(R)$  de funciones de onda sobre  $R$  lo reemplazamos por el espacio  $\ell^2$  cuyos elementos son sucesiones

$$\Psi \leftrightarrow \{\Psi_n\}, \quad \text{con } \Psi_n \equiv \Psi(x_n = na).$$

El operador posición se reemplaza por el  $\hat{Q}^a$  con

$$\hat{Q}^a \Psi_n = na\Psi_n. \quad (3.6.1)$$

El producto escalar lo definimos ahora como

$$\langle \Psi | \Phi \rangle \equiv a \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \Psi_n^* \Phi_n. \quad (3.6.2)$$

El factor  $a$  se introduce aquí por conveniencia para el paso al límite continuo. Este límite se alcanza cuando  $a \rightarrow 0$ ; entonces, utilizando la definición de integral de Riemann, vemos que (3.6.2) se convierte en

$$a \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \Psi_n^* \Phi_n \xrightarrow{a \rightarrow 0} \int dx \Psi^*(x) \Phi(x),$$

es decir, el producto escalar ordinario en  $L^2(R)$ .

Las funciones propias de  $\hat{Q}^a$  son las  $\Psi^{(\lambda)}$  con  $\lambda = al$ , siendo  $l$  entero y

$$\Psi_n^{(\lambda)} = \frac{C}{a} \delta_{ln}; \quad \hat{Q}^a \Psi^{(\lambda)} = \lambda \Psi^{(\lambda)}, \quad (3.6.3)$$

$C$  una constante arbitraria. El factor  $1/a$  se introduce en (3.6.3) de forma que en el límite continuo  $a \rightarrow 0$  se tenga

$$\Psi_n^{(\lambda)} \xrightarrow{a \rightarrow 0} C \delta(\lambda - x).$$

Para definir un operador  $\hat{P}^a$  tal que  $\hat{P}^a \rightarrow \hat{P}$ , pero de forma que  $\hat{P}^a$  tenga espectro discreto, hay que hacer una aproximación extra: tenemos que suponer que  $n$  varía en un recorrido finito,  $-N \leq n \leq N$  (ver figura 3.6.1).  $Na$  puede

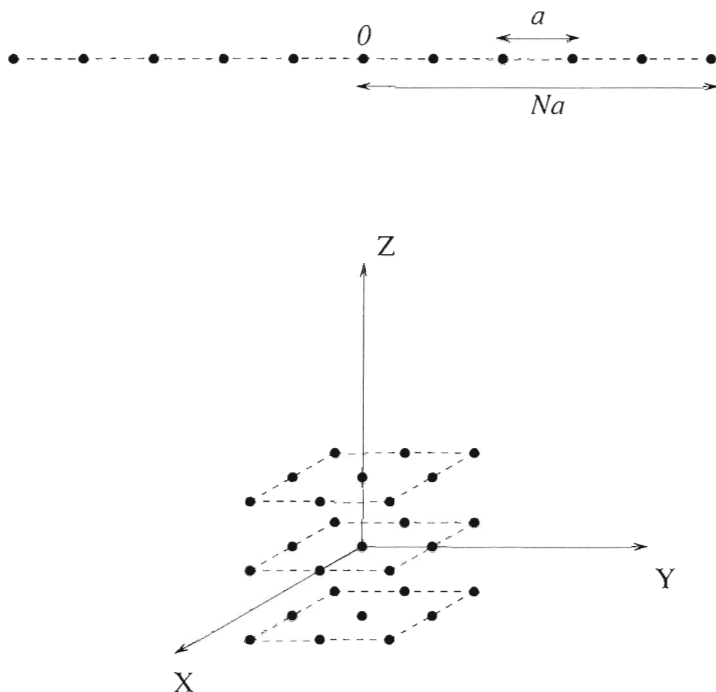


FIGURA 3.6.1. Retículos en una y tres dimensiones con, respectivamente,  $N = 5$  y  $N = 1$ .

representar físicamente, por ejemplo, el tamaño del laboratorio. Para definir  $\Psi_n$  cuando  $|n| > N$  lo hacemos por periodicidad,<sup>2</sup> requiriendo que

$$\Psi_{n \pm (2N+1)} = \Psi_n. \quad (3.6.4)$$

Con estas condiciones el producto escalar hay que modificarlo, definiendo

$$\langle \Psi | \Phi \rangle \equiv a \sum_{n=-N}^{+N} \Psi_n^* \Phi_n. \quad (3.6.5)$$

Está claro que ahora el espacio de “funciones de onda”,  $\{\Psi_N\}$ , tiene dimensión finita, igual a  $2N + 1$ : sólo hay ese número de componentes independientes, correspondiendo a  $n = -N, -N + 1, \dots, 0, 1, \dots, +N$ . Por tanto, en este espacio, todos los operadores tendrán espectro discreto.

<sup>2</sup> Podríamos también haber definido  $\Psi_{\pm(N+1)} = 0$ . La influencia de estas “condiciones de contorno” desaparecerá en el límite  $aN \rightarrow \infty$ .

Ya podemos ver ahora la forma en este espacio de  $\hat{P}^a$ , y su espectro. Recordamos que, en el caso continuo, se puede escribir

$$\hat{P}\Psi(x) = -i\hbar \lim_{a \rightarrow 0} \frac{\Psi(x+a) - \Psi(x-a)}{2a};$$

en consecuencia, definimos

$$\left(\hat{P}^a\Psi\right)_n = -\frac{i\hbar}{2a} (\Psi_{n+1} - \Psi_{n-1}), \quad (3.6.6)$$

con lo que es evidente que se recobra el valor del continuo para  $a \rightarrow 0$ .

La solución de la ecuación de valores propios,

$$\left(\hat{P}^a\Psi^{(p)}\right)_n = \bar{p}\Psi_n^{(p)}, \quad (3.6.7a)$$

incluida la condición de contorno (3.6.4), es

$$\Psi_n^{(p)} = C e^{iapn/\hbar}, \quad \bar{p}_k = \frac{\hbar}{a} \sin \frac{ap}{\hbar}; \quad (3.6.7b)$$

para  $a \rightarrow 0$ ,  $\bar{p}_k \xrightarrow{a \rightarrow 0} p$ .  $p = \frac{2\pi\hbar k}{a(2N+1)}$ ,  $k =$  entero.

EJERCICIO: Demostrar (3.6.7) •

El límite del continuo ordinario se obtiene haciendo  $a \rightarrow 0$ ,  $N \rightarrow \infty$ , pero no de forma arbitraria, sino primero  $N \rightarrow \infty$  y, luego,  $a \rightarrow 0$ . Alternativamente, podemos tomar a la vez  $a \rightarrow 0$  y  $N \rightarrow \infty$  si requerimos simultáneamente que se tenga  $aN \rightarrow \infty$ . Hay que tomar además, en (3.6.7b),  $n$  y  $k$  creciendo de forma que  $an \rightarrow x$  y  $2\pi\hbar k/a(2N+1) \rightarrow p$  y  $x$ ,  $p$  sean finitos.

En tres dimensiones definimos  $\Psi_{\mathbf{n}} = \Psi(r_1 = n_1a, r_2 = n_2a, r_3 = n_3a)$  con los  $n_j$  enteros y  $|n_j| \leq N$  y requerimos periodicidad en las tres dimensiones. Además

$$\hat{Q}_j^a \Psi_{\mathbf{n}} = an_j \hat{Q}_j^a \Psi_{\mathbf{n}}. \quad (3.6.8a)$$

Si  $\mathbf{j}$  es un vector con componente  $j$ -ésima igual a 1 y las otras dos cero,

$$\left(\hat{P}_{\mathbf{j}}^a \Psi\right)_n = -\frac{i\hbar}{2a} (\Psi_{n+\mathbf{j}} - \Psi_{n-\mathbf{j}}). \quad (3.6.8b)$$

Esta aproximación reticular a la mecánica cuántica es útil no sólo porque permite reducir espectros continuos a discretos, sino porque nos proporciona una aproximación al espacio de Hilbert de las funciones de onda por un espacio de dimensión finita, y a los operadores por matrices finitas. Esto facilita la resolución numérica, con tanta precisión como queramos, de muchos problemas que no tienen solución analítica exacta. Pero hay que tener cuidado, porque esta aproximación tiene propiedades peculiares. Para ver un ejemplo, consideremos el conmutador de Heisenberg. Al discretizar el espacio se convierte en

$$\left([\hat{Q}^a, \hat{P}^a]\Psi\right)_n = \frac{i\hbar}{2} (\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1}), \quad (3.6.9)$$

es decir, ya no tenemos  $[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar$ .

De hecho, es fácil demostrar que la relación de conmutación  $[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar$  implica que el espacio de estados es de dimensión infinita. En efecto: tomando trazas, si el espacio fuese de dimensión finita tendríamos  $\text{Tr } \hat{Q}\hat{P} = \text{Tr } \hat{P}\hat{Q}$  y por lo tanto el absurdo

$$0 = \text{Tr } i\hbar = i\hbar D$$

donde  $D$  es la dimensión del espacio.

EJERCICIO: A) Demostrar que  $\hat{Q}^a, \hat{P}^a$  son autoadjuntos.

B) Demostrar que el operador que aparece en el miembro de la derecha de (3.6.9),  $i\hbar I^a$  definido por

$$(i\hbar I^a \Psi)_n = \frac{i\hbar}{2} (\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1})$$

tiene traza cero, aunque es evidente que, en el límite,  $I^a \xrightarrow{a \rightarrow 0} 1$  •

Esta situación es peculiar:  $\text{Tr } I^a = 0$  pero, para  $a = 0$ ,  $\text{Tr } 1 = \infty$ . Como hemos dicho, esto es una advertencia contra un tratamiento excesivamente alegre de límites, discretizaciones y similares.

## PROBLEMAS

P.3.1. Calcular  $[\hat{Q}^{-1}, \hat{P}]$ .

*Solución.* El método de desarrollo en serie que utilizamos en el capítulo anterior no sirve. Consideramos la cantidad  $\hat{Q}[\hat{Q}^{-1}, \hat{P}]$ . Utilizando la regla de conmutación de Heisenberg nos resulta

$$\hat{Q}[\hat{Q}^{-1}, \hat{P}] = -i\hbar\hat{Q}^{-1}, \text{ luego } [\hat{Q}^{-1}, \hat{P}] = -i\hbar\hat{Q}^{-2}.$$

P.3.2. ¿Cuál es el tamaño mínimo de un aparato que pretende medir la velocidad de un electrón con una precisión de 1mm/seg?

*Solución.* El tamaño mínimo se sigue de la incertidumbre en la posición del electrón, y es de unos 10 cm.

P.3.3. Estimar la energía mínima de un fotón con el que se pretende explorar el interior de un núcleo (tamaño de un núcleo, del orden de  $10^{-13}$  cm.)

*Solución.* La longitud de onda ha de ser  $\lambda_\gamma < 10^{-13}$  cm. Por la relación de Compton-Einstein,  $E_\gamma = h\nu_\gamma$  luego  $E_\gamma > 10^2$  MeV.

P.3.4. Para dos observables arbitrarios  $\hat{A}, \hat{B}$ , y un estado cualquiera  $\Psi$ , demuéstrese que, si  $\Psi$  no es estado propio de ninguno de ellos, se tiene

$$\begin{aligned} (\Delta A)_\Psi^2 (\Delta B)_\Psi^2 &\geq \frac{1}{2} \left( \frac{1}{i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\Psi \right)^2 \\ &+ \frac{1}{2} \left( \langle \{\hat{A}, \hat{B}\} \rangle_\Psi - \langle A \rangle_\Psi \langle A \rangle_\Psi \right)^2. \end{aligned}$$

Aquí,  $\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$  se conoce como el *anticommutador*.



*Solución.* Considérense los operadores  $\hat{A}' = \hat{A} - \langle A \rangle_\Psi$ ,  $\hat{B}' = \hat{B} - \langle B \rangle_\Psi$ . Dado el operador  $\hat{C} = \hat{A}' + \alpha\hat{B}' + i\beta\hat{B}'$ , se tiene que, para cualesquiera  $\alpha, \beta$ ,  $\langle \hat{C}\Psi | \hat{C}\Psi \rangle \geq 0$ . Escójanse  $\alpha, \beta$  de forma que

$$\alpha \langle \hat{B}'^2 \rangle_\Psi + \frac{1}{2} \langle \{ \hat{A}', \hat{B}' \} \rangle_\Psi = 0,$$

$$\beta \langle \hat{B}'^2 \rangle_\Psi + \frac{1}{2i} \langle [ \hat{A}', \hat{B}' ] \rangle_\Psi = 0,$$

y desarróllese  $\langle \hat{C}\Psi | \hat{C}\Psi \rangle$ .

Esta generalización de la relación de Heisenberg se debe a A. Gamba, *Nuovo Cimento*, **7**, 378 (1950).

P.3.5. Aparentemente podríamos haber considerado, en vez de una onda exponencial, una senoide  $\sin kr$  y utilizado la relación de de Broglie para definir un operador momento,  $\hat{P}_s$  por

$$\hat{P}_s \sin(kr + \delta) = \hbar k \sin(kr + \delta).$$

¿Por qué no es esto posible?

*Solución.* Definido así,  $\hat{P}_s$  no es autoadjunto (ni lineal) luego no puede representar un observable.

P.3.6. En la formulación de la mecánica cuántica en un retículo, con las condiciones de contorno  $\Psi_{N+1} = \Psi_{-N-1} = 0$ , comprobar que

$$\hat{Q}_a = a \begin{pmatrix} N & 0 & & 0 \\ 0 & N-1 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & -N \end{pmatrix}, \quad \hat{P}^a = \frac{i\hbar}{2a} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ -1 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & -1 & 0 & 1 & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

y

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_N \\ \vdots \\ \Psi_{-N} \end{pmatrix}$$

etc.

P.3.7. Demostrar (3.3.3) para  $k_0 \neq 0$ .

## CAPÍTULO 4.

# Evolución temporal. Ecuación de Schrödinger

### 4.1. El límite clásico de la función de onda

Consideramos una partícula con dos posibles funciones de onda  $\Psi_n$ ,  $n = 1, 2$ . Podemos escribirlas como

$$\Psi_n = a_n e^{i\alpha_n}, \quad a_n > 0, \quad \alpha_n \text{ real.}$$

Formando la superposición de ambas,  $\Psi_{12} = \Psi_1 + \Psi_2$ , los efectos cuánticos son típicamente las interferencias; recuérdese la discusión a propósito del límite clásico de las rendijas de Young. La probabilidad de encontrar en un punto la partícula con la función de onda superpuesta es

$$\begin{aligned} |\Psi_{12}(\mathbf{r})|^2 &= |\Psi_1 + \Psi_2|^2 = |\Psi_1(\mathbf{r})|^2 + |\Psi_2(\mathbf{r})|^2 + 2|\Psi_1(\mathbf{r})||\Psi_2(\mathbf{r})|\cos(\alpha_1 - \alpha_2) \\ &= a_1^2 + a_2^2 + 2a_1 a_2 \cos(\alpha_1 - \alpha_2). \end{aligned}$$

La diferencia entre esto y la expresión clásica se debe al término de interferencia,  $2|\Psi_1(\mathbf{r})||\Psi_2(\mathbf{r})|\cos(\alpha_1 - \alpha_2)$ . Consideremos una región pequeña del espacio,  $U$ . La probabilidad de encontrar el sistema en la región  $U$  es

$$\int_U d^3r |\Psi_1 + \Psi_2|^2 = \int_U d^3r |\Psi_1|^2 + \int_U d^3r |\Psi_2|^2 + 2 \int_U d^3r a_1 a_2 \cos(\alpha_1 - \alpha_2).$$

Podemos considerar que la aproximación clásica es una buena aproximación, en la región  $U$ , si el término de interferencia es despreciable, esto es,

$$\left| \int_U d^3r a_1 a_2 \cos(\alpha_1 - \alpha_2) \right| \ll 1$$

ya que entonces

$$\int_U d^3r |\Psi_1 + \Psi_2|^2 \simeq \int_U d^3r |\Psi_1|^2 + \int_U d^3r |\Psi_2|^2.$$

Para que la integral con el coseno sea despreciable hace falta que este coseno oscile mucho en la región de integración, de forma que las diferentes contribuciones se cancelen en promedio al hallar la integral. Por tanto, esperamos que el límite clásico corresponda a *grandes fases*. Una función de onda de un objeto casi-clásico será pues de la forma

$$\Psi = a e^{i\alpha}, \quad |\alpha| \gg 1. \quad (4.1.1)$$

De hecho, es así como se obtiene el límite de la óptica geométrica a partir de la ondulatoria (Goldstein, 1956).

La escala típica de la mecánica cuántica es  $\hbar$ . Podemos definir la cantidad  $\mathcal{A}$  como  $\mathcal{A} = \hbar\alpha$  y entonces la condición matemática  $|\alpha| \gg 1$  se nos convierte en la condición física  $|\mathcal{A}| \gg \hbar$ . Para identificar  $\mathcal{A}$ , la desarrollamos en serie de potencias de  $\hbar$  y escribimos pues

$$\alpha = \hbar^{-1} (\mathcal{A}_0 + \hbar\mathcal{A}_1 + \hbar^2\mathcal{A}_2 + \dots).$$

El límite clásico se alcanzará al despreciar todos los términos excepto el primero en el desarrollo de  $\mathcal{A}$ , y al considerar que éste es mucho mayor que  $\hbar$ :

$$\alpha \simeq \frac{1}{\hbar} \mathcal{A}_0, \quad |\mathcal{A}_0| \gg \hbar.$$

Pero  $\alpha$  no tiene dimensiones y  $\hbar$  las tiene de acción; por tanto,  $\mathcal{A}_0$  tiene dimensiones de acción, y es puramente clásica (no depende de  $\hbar$ ). La supondremos proporcional a la acción clásica,  $\mathcal{A}_0 = \lambda\mathcal{A}_{\text{cl}}$ , donde  $\lambda$  es una constante.

Para encontrar la constante  $\lambda$ , consideremos una partícula clásica, en una dimensión, con momento  $p_{\text{cl}}$ , y en un potencial  $V(x)$ . Su *lagrangiano* es

$$L_{\text{cl}} = \frac{1}{2m} p_{\text{cl}}^2 - V(x).$$

La *energía*  $E_{\text{cl}}$  es igual a la función de Hamilton (*hamiltoniano*),  $H_{\text{cl}}$ :

$$E_{\text{cl}} = H_{\text{cl}} = \frac{1}{2m} p_{\text{cl}}^2 + V(x).$$

Por tanto, en términos de  $H_{\text{cl}}$  y de la velocidad clásica  $v_{\text{cl}} = p_{\text{cl}}/m$ ,

$$L_{\text{cl}} = \frac{1}{2m} p_{\text{cl}}^2 - V(x) = p_{\text{cl}}v_{\text{cl}} - H_{\text{cl}}.$$

La acción clásica, calculada a lo largo de la trayectoria clásica, es

$$\mathcal{A}_{\text{cl}} = \int^t dt L_{\text{cl}} = \int dx p_{\text{cl}} v_{\text{cl}} - \int dt H_{\text{cl}}.$$

Si el potencial no depende del tiempo,  $E_{\text{cl}} = H_{\text{cl}}$  es constante, con lo que el segundo término de la ecuación se puede integrar; cambiando también de variable en el otro término de la ecuación de arriba,  $dt = dx(dt/dx) = dx/v_{\text{cl}}$ , obtenemos finalmente

$$\mathcal{A}_{\text{cl}} = \int^x dx p_{\text{cl}} - E_{\text{cl}}t. \quad (4.1.2)$$

Consideremos una partícula libre. Entonces  $p_{\text{cl}}$  es constante y

$$\mathcal{A}_{\text{cl}} = xp_{\text{cl}} - E_{\text{cl}}t,$$

que para  $t = 0$  se convierte en  $\mathcal{A}_{\text{cl}} = xp_{\text{cl}}$ .

Comparando con una onda plana, que corresponde a un valor del momento bien definido, a  $t = 0$ ,

$$C e^{ikx} = C e^{ipx/\hbar}$$

vemos que la constante  $\lambda$  es de hecho la unidad y, por tanto, hemos obtenido que, en el límite clásico, la función de onda tiene la forma

$$\bar{\Psi} \underset{\hbar \rightarrow 0}{\sim} a e^{i\mathcal{A}_{cl}/\hbar} \quad (4.1.3)$$

donde  $\mathcal{A}_{cl}$  es la acción clásica. En tres dimensiones se puede escribir esto como<sup>1</sup>

$$\mathcal{A}_{cl} = \int^{\mathbf{r}} d\mathbf{l} \mathbf{p}_{cl} - \int^t dt H_{cl}. \quad (4.1.4)$$

Un resultado que vamos a utilizar inmediatamente es que, de (4.1.4),

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{A}_{cl} = -H_{cl}. \quad (4.1.5)$$

## 4.2. La ecuación de Schrödinger (dependiente del tiempo)

En mecánica clásica la dinámica consiste en encontrar la dependencia en el tiempo de las variables canónicas,  $\mathbf{r}_{cl}$ ,  $\mathbf{p}_{cl}$ , esto es, determinar la trayectoria de la partícula. Como en mecánica cuántica el concepto de trayectoria pierde su sentido, y lo que caracteriza a un sistema es su función de onda, la dinámica vendrá dada por la evolución de la función de onda con el tiempo.

Consideremos una partícula en el tiempo  $t_1$ , con función de onda  $\Psi(\mathbf{r}, t_1)$ . Al pasar el tiempo a  $t_2 > t_1$  este sistema habrá evolucionado a un estado con función de onda  $\Psi(\mathbf{r}, t_2)$ . Claramente,  $\Psi(\mathbf{r}, t_2)$  tiene que ser función de  $\Psi(\mathbf{r}, t_1)$ ; debido al principio de superposición, pedimos que esta función sea lineal, luego vendrá dada por un operador lineal (*operador evolución temporal*) que denotamos por  $\hat{U}(t_2, t_1)$ :

$$\Psi(\mathbf{r}, t_2) = \hat{U}(t_2, t_1) \Psi(\mathbf{r}, t_1). \quad (4.2.1)$$

Más adelante, en la sec. 5.3, veremos la expresión explícita de  $\hat{U}$  cuando la diferencia  $t_2 - t_1$  es finita; de momento, vamos a considerar el caso infinitesimal, y calcular la cantidad  $\partial \Psi(\mathbf{r}, t) / \partial t$ .

Es conveniente introducir la notación  $\partial_t$  por  $\partial / \partial t$ ; en nuestro caso escribimos, por tanto,  $\partial_t \Psi(\mathbf{r}, t) = \partial \Psi(\mathbf{r}, t) / \partial t$ . Para encontrar, pues,  $\partial_t \Psi(\mathbf{r}, t)$ ,

<sup>1</sup> En (4.1.4)  $d\mathbf{l}$  representa una diferencial de línea, a lo largo de la trayectoria:

$$d\mathbf{l} \mathbf{p} = \sum_{j=1,2,3} dr_j p_j.$$

comenzamos por el caso casi-clásico; de (4.1.3) y despreciando términos de orden relativo  $\hbar$ ,

$$\partial_t \Psi(\mathbf{r}, t) \simeq (\partial_t a) e^{i\mathcal{A}_{cl}/\hbar} + \frac{i}{\hbar} (\partial_t \mathcal{A}_{cl}) a e^{i\mathcal{A}_{cl}/\hbar} \simeq \frac{i}{\hbar} (\partial_t \mathcal{A}_{cl}) \Psi.$$

Utilizando ahora (4.1.5) obtenemos

$$\partial_t \Psi(\mathbf{r}, t) \simeq \frac{-i}{\hbar} H_{cl} \Psi. \quad (4.2.2a)$$

Volvamos ahora a (4.2.1), y consideremos el caso plenamente cuántico. Tomando  $t_1 \equiv t$ ,  $t_2 - t_1 = \epsilon$ ,

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \epsilon) = \hat{U}(t + \epsilon, t) \Psi(\mathbf{r}, t).$$

Desarrollando ambos miembros en potencias de  $\epsilon$ , y quedándonos a primer orden,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) + \epsilon \dot{\Psi}(\mathbf{r}, t) = (1 + \epsilon \hat{A}) \Psi(\mathbf{r}, t) + O(\epsilon^2)$$

y hemos utilizado que, obviamente,  $\hat{U}(t, t) = 1$  para escribir

$$\hat{U}(t + \epsilon, t) = 1 + \epsilon \hat{A} + O(\epsilon^2), \quad \hat{A} \equiv \frac{\partial}{\partial \epsilon} \hat{U}(t + \epsilon, t) \Big|_{\epsilon=0}.$$

Por tanto,

$$\partial_t \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{A} \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (4.2.2b)$$

Sólo nos falta identificar el operador  $\hat{A}$ . Comparando (4.4.2a) y (4.2.2b) resulta que, en el caso casi-clásico,

$$\hat{A} \Psi \simeq -\frac{i}{\hbar} H_{cl} \Psi :$$

el operador corresponde a  $-i/\hbar$  veces el hamiltoniano (la *energía*) del sistema. Si denotamos, ya en el caso plenamente cuántico, a este operador por  $\hat{H}$ , resulta que hemos encontrado la ecuación de evolución deseada:

$$i\hbar \partial_t \Psi = \hat{H} \Psi. \quad (4.2.3)$$

Ésta es la *ecuación de Schrödinger* (dependiente del tiempo). Todavía no conocemos la forma explícita de  $\hat{H}$ , excepto en el caso casi-clásico, donde (4.2.2a) nos dice que

$$\hat{H} \Psi \underset{\hbar \rightarrow 0}{\simeq} E_{cl} \Psi. \quad (4.2.4)$$

Más adelante veremos la forma de  $\hat{H}$  en casos plenamente cuánticos.

**EJERCICIO:** Demostrar que  $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ .

*Indicación.* Evidentemente,  $\|\Psi(\mathbf{r}, t)\|^2$  no puede depender de  $t$ . Utilizar esto y la definición de  $\hat{H}$  en función de  $\hat{A}$ , y de éste a partir de  $\hat{U}$ .

### 4.3. Estados estacionarios. Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

Puesto que  $\hat{H}$  es un observable, busquemos funciones de onda propias de este operador, esto es, correspondientes a estados de energía bien definida:

$$\hat{H}\Psi_E(\mathbf{r}, t) = E\Psi_E(\mathbf{r}, t). \quad (4.3.1)$$

Los estados  $\Psi_E$  se llaman *estados estacionarios*; como veremos, el paso del tiempo sólo los afecta multiplicándolos por una fase global (es decir, independiente del espacio).

La ecuación de Schrödinger nos dice que, para los  $\Psi_E$  que cumplen (4.3.1),

$$\partial_t \Psi_E(\mathbf{r}, t) = \frac{E}{i\hbar} \Psi_E(\mathbf{r}, t)$$

con solución

$$\Psi_E(\mathbf{r}, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi_E(\mathbf{r}). \quad (4.3.2)$$

La dependencia en el tiempo se encuentra totalmente en la fase  $e^{-iEt/\hbar}$ . Sustituyendo esta  $\Psi_E$  en (4.3.1) y, puesto que  $\hat{H}$  es lineal, obtenemos que  $\psi_E(\mathbf{r})$  satisface la ecuación

$$\hat{H}\psi_E(\mathbf{r}) = E\psi_E(\mathbf{r}), \quad (4.3.3)$$

conocida como *ecuación de Schrödinger independiente del tiempo*. La resolución de (4.3.3) es uno de los problemas centrales de la mecánica cuántica.

En general utilizaremos mayúsculas ( $\Psi, \Phi, \dots$ ) para las funciones de onda dependientes del tiempo y minúsculas ( $\psi, \varphi, \dots$ ) para las independientes del tiempo.

### 4.4. Evolución de operadores con el tiempo. Corchetes de Poisson y variables conjugadas. Formulación canónica

#### 4.4.1. Evolución en el tiempo

Hay operadores que dependen explícitamente del tiempo (el  $\hat{U}(t_2, t_1)$  de la sección 4.2 es un ejemplo) y otros que no, como  $\hat{Q}$  o  $\hat{P}$ . De todas maneras, como los operadores (autoadjuntos) corresponden a observables, nos interesa no sólo la dependencia en el tiempo de las funciones de onda sino la variación en el tiempo de los operadores. Sea  $\hat{F}$  un operador que puede depender explícitamente del tiempo o no. Definimos el *operador variación de  $\hat{F}$  con el tiempo*, y lo denotamos por  $\hat{\dot{F}}$ , al operador que verifica

$$\langle \hat{\dot{F}} \rangle_\Psi = \frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle_\Psi \quad (4.3.4)$$

para toda  $\Psi$  solución de la ecuación de Schrödinger (dependiente del tiempo).

Calculemos esto. Se tiene,

$$\langle \Psi | \hat{\dot{F}} \Psi \rangle = \frac{d}{dt} \langle \Psi | \hat{F} \Psi \rangle = \langle \partial_t \Psi | \hat{F} \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{F} \partial_t \Psi \rangle + \langle \Psi | (\partial_t \hat{F}) \Psi \rangle.$$

Para evaluar  $\partial_t \Psi$  utilizamos la ecuación de Schrödinger, (4.2.3). Teniendo también en cuenta que  $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ ,

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \dot{\hat{F}} \Psi \rangle &= \left\langle \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi \middle| \hat{F} \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| \hat{F} \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi \right\rangle + \langle \Psi | (\partial_t \hat{F}) \Psi \rangle \\ &= \left\langle \Psi \middle| \left\{ \partial_t \hat{F} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}] \right\} \Psi \right\rangle. \end{aligned}$$

Puesto que esto es válido para cualquier  $\Psi$  hemos obtenido que

$$\hat{F} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}]. \quad (4.4.2)$$

En particular, si  $\hat{F}$  no depende explícitamente de  $t$ ,

$$\hat{F} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}], \quad \text{si } \partial_t \hat{F} = 0. \quad (4.4.3)$$

Esto nos permite definir la componente  $j$  del operador velocidad como

$$\hat{v}_j = \hat{Q}_j = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{Q}_j]. \quad (4.4.4)$$

#### 4.4.2. Formulación canónica de la mecánica cuántica

La ecuación (4.4.3) y la relación de Heisenberg, (3.4.1), nos sugieren una conexión entre *conmutadores*,  $[ , ]$  en mecánica cuántica y *corchetes de Poisson*,<sup>2</sup>  $\{ , \}_P$  en mecánica clásica, a saber,

$$F_{cl} \rightarrow \hat{F}, \quad G_{cl} \rightarrow \hat{G}; \quad \{F_{cl}, G_{cl}\}_P \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}, \hat{G}],$$

lo que completa el principio de correspondencia.

Gracias a esto podemos definir en mecánica cuántica *variables (operadores) canónicas conjugadas*. Si  $q_{cl}$  es una variable canónica clásica, y  $\hat{q}$  el operador cuántico correspondiente, la variable clásica conjugada de  $q_{cl}$ , que denotamos  $p_{cl}$ , se define por  $\{q_{cl}, p_{cl}\}_P = 1$ . Definimos el operador canónico conjugado al  $\hat{q}$ , que denotamos por  $\hat{p}$ , como el que satisface la relación de conmutación

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar.$$

Esto nos permite una nueva formulación, conocida como *formulación canónica*, de la mecánica cuántica. En esta formulación canónica se postula la relación de conmutación canónica de Heisenberg; trabajando en una dimensión por simplificar,

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar. \quad (4.4.5)$$

<sup>2</sup> Definimos los corchetes de Poisson con el subíndice "P" para que no se confundan con el *anticommutador*

Para probar la equivalencia con la formulación que hemos considerado hasta ahora, en términos de funciones de onda, tenemos que demostrar que el estado de un sistema se puede representar por funciones  $\Psi(q)$  de una cierta variable  $q$  tales que

$$\hat{Q}\Psi(q) = q\Psi(q), \quad \hat{P}\Psi(q) = -i\hbar\partial\Psi(q)/\partial q.$$

Comenzamos por denotar por  $q$  a los valores propios y  $\Psi_q$  a los estados propios de  $\hat{Q}$ :  $\hat{Q}\Psi_q = q\Psi_q$ . Consideramos ahora el estado  $(\exp ia\hat{P}/\hbar)\Psi_q$ ; de (4.4.5), desarrollando la exponencial, se deduce fácilmente que

$$[\hat{Q}, e^{ia\hat{P}/\hbar}] = -ae^{ia\hat{P}/\hbar}.$$

Por tanto,

$$\hat{Q}e^{ia\hat{P}/\hbar}\Psi_q = e^{ia\hat{P}/\hbar}\hat{Q}\Psi_q + [\hat{Q}, e^{ia\hat{P}/\hbar}]\Psi_q = (q - a)e^{ia\hat{P}/\hbar}\Psi_q :$$

el estado  $e^{ia\hat{P}/\hbar}\Psi_q$  es un estado propio de  $\hat{Q}$  correspondiente al valor propio  $q - a$  luego, si consideramos que el espectro es no-degenerado<sup>3</sup> deberá ser proporcional a  $\Psi_{q-a}$ :

$$e^{ia\hat{P}/\hbar}\Psi_q = e^{i\phi}\Psi_{q-a}.$$

La constante de proporcionalidad ha de ser una fase ya que el operador  $e^{ia\hat{P}/\hbar}$  es unitario. Podemos escoger la fase arbitraria de  $\Psi_{q-a}$  de forma que  $\phi = 0$ , luego hemos encontrado que

$$e^{ia\hat{P}/\hbar}\Psi_q = \Psi_{q-a}. \quad (4.4.6a)$$

Derivando con respecto a  $a$  y tomando  $a = 0$ ,

$$\hat{P}\Psi_q = i\hbar\partial\Psi_q/\partial q. \quad (4.4.6b)$$

Sea  $\Psi$  arbitrario. Desarrollémoslo en los  $\Psi_q$  y llamemos  $\Psi(q)$  a los coeficientes de este desarrollo,  $\Psi = \int dq \Psi(q)\Psi_q$ . Entonces,

$$\hat{Q}\Psi = \hat{Q} \int dq \Psi(q)\Psi_q = \int dq \Psi(q)\hat{Q}\Psi_q = \int dq q\Psi(q)\Psi_q :$$

la acción de  $\hat{Q}$  en los coeficientes es

$$\hat{Q}\Psi(q) = q\Psi(q).$$

Análogamente, usando (4.4.6b) e integrando por partes,

$$\hat{P}\Psi = \int dq \Psi(q)\hat{P}\Psi_q = \int dq \Psi(q)i\hbar\partial\Psi_q/\partial q = \int dq \left( -i\hbar\frac{\Psi(q)}{\partial q} \right) \Psi_q,$$

<sup>3</sup> El caso del espectro (finitamente) degenerado y una demostración rigurosa puede verse en el texto de von Neumann (1932).



luego la acción de  $\hat{P}$  en los  $\Psi(q)$  es

$$\hat{P}\Psi(q) = -i\hbar \frac{\Psi(q)}{\partial q} \Psi(q)$$

lo que completa la demostración. A partir de aquí, podemos identificar  $\Psi(q)$  con la función de onda en espacio de posición y continuar con el desarrollo del formalismo cuántico.

La formulación canónica de la mecánica cuántica se debe a Heisenberg (que, de hecho, la obtuvo algo antes que la formulación de Schrödinger) y a Heisenberg y Jordan. La primera demostración de la equivalencia de ambas formulaciones se debe al propio Schrödinger.

#### 4.5. Forma general del hamiltoniano

Antes de determinar la forma del hamiltoniano es conveniente demostrar un teorema auxiliar muy útil:

**TEOREMA DE VON NEUMANN** Si un operador,  $\hat{F}$ , conmuta con los tres  $\hat{Q}_j$ , entonces es una función de los  $\hat{Q}_j$ . Si un operador  $\hat{G}$ , conmuta con los tres  $\hat{P}_j$ , entonces es una función de los  $\hat{P}_j$ .

*Demostración* Trabajamos en una dimensión para simplificar,<sup>4</sup> y vamos a demostrar, como ejemplo, la segunda parte. Consideramos una onda plana,  $\Psi_p(x) = e^{ipx/\hbar}$ . Para ella,  $\hat{P}e^{ipx/\hbar} = pe^{ipx/\hbar}$ .

Supongamos ahora que  $\hat{G}$  y  $\hat{P}$  conmutan. Entonces,

$$\hat{P}(\hat{G}\Psi_p(x)) = \hat{G}\hat{P}\Psi_p(x) = p\hat{G}\Psi_p(x),$$

luego  $\hat{G}\Psi_p$  es también una función de onda propia de  $\hat{P}$ , con valor propio  $p$ . Por tanto, ha de ser de la forma (3.5.4),

$$\hat{G}\Psi_p = C_G(p, t)\Psi_p,$$

donde  $C_G$  es una constante. Esta ecuación podemos también escribirla como

$$\hat{G}\Psi_p = C_G(\hat{P}, t)\Psi_p,$$

(recuérdese el primer ejercicio de la sec. 2.6) y, como las  $\Psi_p$  forman una base, tenemos que tener la igualdad

$$\hat{G} = C_G(\hat{P}, t)$$

como queríamos demostrar.

<sup>4</sup> La demostración que presentamos no es rigurosa; una prueba completa puede verse en el tratado de von Neumann (1932).

#### 4.5.1. Representación de posición

Pasemos a determinar la forma del hamiltoniano, comenzando por una partícula libre. Clásicamente, sabemos que en este caso  $H_{0cl} = \mathbf{p}_{cl}^2/2m$ ; utilizando el principio de correspondencia postulamos

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{P}}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta, \quad (4.5.1)$$

la segunda fórmula en representación de posición, y donde  $\Delta = \sum_{j=1}^3 \partial^2/\partial r_j^2$  es el operador *laplaciano*.

Es posible dar una demostración de (4.5.1) independiente del principio de correspondencia. Para ello, caracterizamos una partícula libre como aquella cuyo momento es constante. Por tanto, su hamiltoniano tendrá que satisfacer

$$0 = \hat{P} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{P}].$$

(trabajamos en una dimensión). Según el teorema de von Neumann, esto implica que  $\hat{H}_0$  es una función de  $\hat{P}$ , que denotamos por  $\hat{H}_0 = f(\hat{P})$ . Por otra parte, identificamos el momento como el producto de la velocidad por la masa, de forma que  $\hat{P} = m\hat{v}$ . Tenemos pues

$$\hat{P} = m\hat{v} = m \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{Q}]. \quad (4.5.2)$$

Desarrollando  $f(\hat{P})$  en serie,

$$f(\hat{P}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \hat{P}^n$$

y aplicando la relación de Heisenberg, (3.4.1), obtenemos que (4.5.2) implica que todos los coeficientes  $a_n$  se anulan excepto  $a_2$  y  $a_0$ . Identificamos  $a_2$  con  $1/2m$ ;  $a_0$  es la constante arbitraria que define el origen de energías. Con esto (4.5.1) queda demostrada.

EJERCICIO: A) Extender esto a 3 dimensiones. B) Comprobar las relaciones de conmutación

$$\begin{aligned} [f(\hat{Q}), P_l] &= i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{Q}_l} f(\hat{Q}), \\ [Q_l, f(\hat{P})] &= i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{P}_l} f(\hat{P}). \end{aligned} \quad (4.5.3)$$

*Indicación.* (B) Desarrollar  $f$  en serie •

En el caso de una partícula en un potencial,  $V_{cl}(\mathbf{r})$ , tenemos

$$H_{cl} = \frac{1}{2m} \mathbf{p}_{cl}^2 + V_{cl}(\mathbf{r});$$

podemos utilizar el principio de correspondencia y escribir

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{P}}^2 + \hat{V}, \quad (4.5.4a)$$

donde el operador  $\hat{V}$  se define por

$$\hat{V}\Psi(\mathbf{r}, t) = V_{cl}(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}, t). \quad (4.5.4b)$$

De ahora en adelante suprimimos el circunflejo en  $\hat{V}$  y el índice “cl” en  $V_{cl}$ , salvo que haya peligro de confusión. Utilizando la forma explícita de  $\hat{\mathbf{P}}$ , ec. (4.5.3), podemos reescribir (4.5.4b) como

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}). \quad (4.5.4c)$$

De nuevo podemos dar una demostración general de (4.5.4). Definamos la interacción,  $\hat{H}_{int}$  por

$$\hat{H} \equiv \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}, \quad \text{con} \quad \hat{H}_0 = \hat{\mathbf{P}}^2/2m;$$

trabajamos en una dimensión para simplificar. Salvo correcciones relativistas, la relación  $\hat{P} = m\hat{v}$  sigue siendo válida para una partícula en interacción.<sup>5</sup> Por tanto, tenemos que tener todavía

$$\hat{P} = m \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{Q}].$$

Pero, como ya hemos visto, ya se tiene

$$\hat{P} = m \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{Q}] :$$

se sigue que  $\hat{H}_{int}$  debe de verificar  $[\hat{H}_{int}, \hat{Q}] = 0$  lo que, según el teorema de von Neumann, implica que  $\hat{H}_{int}$  es una función de  $\hat{Q}$ , que podemos llamar  $V$ :

$$\hat{H}_{int} = V(\hat{Q}),$$

como queríamos demostrar.

<sup>5</sup> Una prueba formal de esto requiere estudiar las representaciones del grupo de Galileo, y puede verse en el texto de Galindo y Pascual (1989).

### 4.5.2. Representación de momentos

En representación de momentos la forma del hamiltoniano no es difícil de encontrar. Escribimos las funciones de onda simplemente como  $\Psi(\mathbf{p}, t)$  en lugar de  $\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)$ ; el argumento ya indica que estamos en espacio de momentos. Sin embargo, distinguiremos a los operadores en representación de momentos por el subíndice  $p$ . La parte libre de  $\hat{H}_p$ ,  $\hat{H}_{0p}$  es trivial:

$$\hat{H}_{0p}\Psi(\mathbf{p}, t) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\Psi(\mathbf{p}, t).$$

la acción del potencial se puede hallar utilizando las ecuaciones (3.5.5). Denotando por  $\Psi_V$  a  $\hat{V}\Psi$ ,

$$\begin{aligned} \hat{V}_p\Psi(\mathbf{p}, t) &= \Psi_V(\mathbf{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} \Psi_V(\mathbf{r}, t) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} V(\mathbf{r}) \int dp' e^{i\mathbf{p}'\mathbf{r}/\hbar} \Psi(\mathbf{p}', t) \\ &= \int dp' \tilde{V}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')\Psi(\mathbf{p}', t), \end{aligned}$$

donde hemos definido

$$\tilde{V}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \equiv \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')/\hbar} V(\mathbf{r}). \quad (4.5.5a)$$

hemos encontrado que  $\hat{V}_p$  es un operador integral de núcleo  $\tilde{V}$  y tenemos

$$\hat{H}_p\Psi(\mathbf{p}, t) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\Psi(\mathbf{p}, t) + \int d^3p' \tilde{V}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')\Psi(\mathbf{p}', t). \quad (4.5.5b)$$

Esta forma  $\hat{H}_p$  es útil en muchos casos para encontrar soluciones aproximadas a la ecuación de Schrödinger.

#### 4.6. La ecuación de continuidad

Sabemos que la cantidad  $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$  representa la probabilidad de encontrar la partícula con función de onda  $\Psi$  en el punto  $\mathbf{r}$  en el instante de tiempo  $t$ . Esto nos permite visualizar una partícula cuántica como un fluido con densidad  $\rho$ , variable de un punto a otro, densidad dada, precisamente, por

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2.$$

Para que la analogía sea válida hace falta que el movimiento de este “fluido” satisfaga una ecuación de continuidad, con una definición apropiada del vector “corriente.” En efecto, esto es así, como vamos a ver a continuación.

Consideremos la cantidad

$$\rho_U(t) = \int_U d^3r \rho(\mathbf{r}, t) = \int_U d^3r \Psi^*(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t),$$

que representa la probabilidad de encontrar la partícula en el interior del volumen  $U$  en el tiempo  $t$ . En la analogía del fluido,  $\rho_U(t)$  sería la cantidad de fluido en dicho volumen. Calculamos ahora la variación de  $\rho_U(t)$  con el tiempo. Utilizando la ecuación de Schrödinger (4.2.3),

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_U(t)}{dt} &= \int_U d^3r \{ (\partial_t \Psi(\mathbf{r}, t))^* \Psi(\mathbf{r}, t) + \Psi^*(\mathbf{r}, t) \partial_t \Psi(\mathbf{r}, t) \} \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_U d^3r \{ \Psi^* \hat{H} \Psi - \Psi (\hat{H} \Psi)^* \}; \\ \hat{H} &= \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V. \end{aligned} \quad (4.6.1)$$

Ahora bien: está claro que el término en  $V$  de  $\hat{H}$  no da contribución al miembro de la derecha de (4.6.1), ya que  $V$  es real. Por tanto, sustituyendo  $\hat{H}$ ,

$$\frac{d\rho_U(t)}{dt} = \frac{i\hbar}{2m} \int_U d^3r \{ \Psi^* (\Delta \Psi) - \Psi (\Delta \Psi^*) \}.$$

Evidentemente, para cualquier función  $f$ ,

$$f(\Delta f^*) - f^*(\Delta f) = \text{div} \{ f(\nabla f^*) - f^*(\nabla f) \},$$

luego si definimos la *corriente de probabilidad*  $\mathbf{j}_\Psi$  por

$$\mathbf{j}_\Psi \equiv \frac{i\hbar}{2m} \{ \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi^*(\mathbf{r}, t) - \Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) \}, \quad (4.6.2)$$

obtendremos la ecuación

$$\frac{d\rho_U(t)}{dt} = - \int_U d^3r \text{div} \mathbf{j}_\Psi(\mathbf{r}, t). \quad (4.6.3)$$

Sea  $\partial U$  la superficie que rodea al volumen  $U$ , y sea  $ds$  el elemento infinitesimal de superficie. Podemos utilizar el teorema de Gauss para reescribir (4.6.3) como la buscada *ecuación de continuidad*,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_U d^3r \rho(\mathbf{r}, t) + \int_{\partial U} ds \mathbf{j}_\Psi(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (4.6.4)$$

Esta ecuación nos permite interpretar la cantidad  $ds \mathbf{j}_\Psi$  como la *probabilidad, por unidad de tiempo*, de que la partícula atraviese el área  $ds$ .

Como una primera aplicación vamos a calcular la corriente de probabilidad asociada a una onda plana. Sea

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, \quad \mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar, \quad \omega = E/\hbar; \quad (4.6.5)$$

entonces,

$$\nabla \Psi = i\mathbf{k}\Psi, \quad \nabla \Psi^* = -i\mathbf{k}\Psi^*; \quad \mathbf{j}_\Psi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p}/m = \mathbf{v}, \quad (4.6.6)$$

como era de esperar: la densidad es  $\rho_\Psi = 1$  luego la corriente resulta ser  $\mathbf{j}_\Psi = \rho_\Psi \mathbf{v} = \mathbf{v}$ , análogamente a lo que ocurre para un fluido de densidad constante, y que se mueve con velocidad constante.

EJERCICIO: Compruébese (4.6.4) en el caso de una onda plana •

EJERCICIO: Demostrar la forma infinitesimal de la ecuación de continuidad,

$$\partial_t (\Psi^* \Psi) + \operatorname{div} \mathbf{j}_\Psi = 0 \quad \bullet \quad (4.6.7)$$

## 4.7. Sistemas con $n$ partículas

Hasta ahora sólo hemos tratado sistemas de una partícula. La extensión a  $n$  partículas no presenta problemas. La función de onda es ahora

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t);$$

su módulo al cuadrado representa la probabilidad de encontrar la partícula 1 en  $\mathbf{r}_1, \dots$ , la  $a$ -ésima en  $\mathbf{r}_a, \dots$ , y la  $n$ -ésima en  $\mathbf{r}_n$ , en el instante de tiempo  $t$ . El operador posición de la partícula  $a$ -ésima,  $\hat{Q}_a$ , viene dado por

$$\hat{Q}_{aj} \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t) = r_{aj} \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t), \quad j = 1, 2, 3.$$

El operador momento es, similarmente,

$$\hat{P}_{aj} \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_{aj}} \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t), \quad j = 1, 2, 3.$$

Las relaciones de conmutación son

$$[\hat{Q}_{aj}, \hat{P}_{bl}] = i\hbar \delta_{ab} \delta_{jl}.$$

La ecuación de Schrödinger es ahora

$$i\hbar\partial_t\Psi(\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_n;t) = \hat{H}\Psi(\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_n;t).$$

Si tenemos un estado estacionario,  $\hat{H}\Psi_E = E\Psi_E$ , entonces

$$\Psi_E(\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_n;t) = e^{-iEt/\hbar}\psi_E(\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_n;t)$$

y

$$\hat{H}\psi_E(\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_n) = E\psi_E(\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_n).$$

Si no hay interacción entre las partículas, el hamiltoniano es la suma de los hamiltonianos de cada una de ellas:

$$\hat{H}_0 = \sum_{a=1}^n \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{P}}_a^2,$$

con  $m_a$  la masa de la partícula  $a$ -ésima. En general,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_n).$$

#### PROBLEMAS

P.4.1. Calcular la corriente asociada a una onda esférica saliente,

$$\Psi(\mathbf{r}) = f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad k = p/\hbar,$$

con  $f$  independiente de  $r$ , a grandes distancias ( $r \rightarrow \infty$ ). Utilícese coordenadas polares.

*Solución.* En polares (Apéndice III)

$$j_r = \frac{\hbar k}{mr^2} |f|^2, \quad j_\theta = \frac{i\hbar}{2mr^3} \left( f \frac{\partial f^*}{\partial \theta} - f^* \frac{\partial f}{\partial \theta} \right),$$

$$j_\phi = \frac{i\hbar}{2mr^3 \sin \theta} \left( f \frac{\partial f^*}{\partial \phi} - f^* \frac{\partial f}{\partial \phi} \right).$$

Al orden dominante sólo hay componente radial.

## CAPÍTULO 5.

# Simetrías y leyes de conservación

### 5.1. Simetrías de un sistema cuántico

En un sistema clásico, la existencia de una simetría implica que, si una trayectoria de este sistema es posible, la transformada por la simetría también lo es. A cada simetría le corresponde una ley de conservación: a la invariancia por traslaciones temporales (esto es, a que  $H_{cl}$  sea independiente del tiempo) corresponde la ley de conservación de la energía; a la de traslaciones espaciales, la del momento, y, a la invariancia bajo rotaciones, la de conservación del momento angular. Con los cambios apropiados todo esto puede trasladarse a la mecánica cuántica.

Consideremos una transformación  $T$  de un sistema físico; por ejemplo, una traslación. Si antes de efectuar la transformación la función de onda era  $\Psi$ , después de efectuarla el sistema estará en un nuevo estado cuya función de onda denotamos por  $\Psi_T$ . Debido al principio de superposición, pedimos que  $\Psi_T$  dependa linealmente<sup>1</sup> de  $\Psi$ , luego podemos implementar la transformación por medio de un operador lineal que denotamos por  $\hat{U}(T)$ :

$$\Psi_T = \hat{U}(T)\Psi. \quad (5.1.1)$$

Si  $T$  es una simetría, las probabilidades deberán ser preservadas por la transformación y, por tanto, pedimos que

$$\langle \hat{U}(T)\Psi | \hat{U}(T)\Psi \rangle = \langle \Psi | \Psi \rangle : \quad (5.1.2)$$

resulta que el operador  $\hat{U}(T)$  es *unitario*,

$$\hat{U}(T)^\dagger = \hat{U}(T)^{-1}. \quad (5.1.3)$$

---

<sup>1</sup> Hay una importante excepción a esta regla, que es la simetría bajo el cambio  $t \rightarrow -t$  (*inversión temporal*), que estudiaremos en la sección 15.2. En este caso,  $\Psi_T$  depende *antilinealmente* de  $\Psi$ , esto es,  $(\alpha\Psi + \beta\Phi)_T = \alpha^*\Phi_T + \beta^*\Psi_T$ .

Existe un teorema debido a Wigner que dice que, escogiendo apropiadamente las fases arbitrarias de una simetría, de la igualdad

$$|\langle \hat{T}\Psi | \hat{T}\Phi \rangle|^2 = |\langle \Psi | \Phi \rangle|^2$$

se sigue que se puede representar siempre la transformación  $\hat{T}$  por un operador unitario o antiunitario.



Si  $S$ ,  $T$  son transformaciones de simetría, también  $ST$ ,  $T^{-1}$  lo son: las transformaciones de simetría forman grupo. Podemos pedir que también lo sean los operadores que las representan y, por tanto, exigiremos que

$$\hat{U}(T^{-1}) = \hat{U}(T)^{-1}; \quad \hat{U}(ST) = \hat{U}(S)\hat{U}(T). \quad (5.1.4)$$

Cualquier operador unitario,  $\hat{U}$ , puede escribirse como  $\hat{U} = e^{i\lambda\hat{A}}$ , con  $\hat{A}$  autoadjunto y hemos introducido el parámetro real  $\lambda$  por futura conveniencia. Por tanto, a cada transformación de simetría  $T$  le corresponde un operador observable,  $\hat{A}$ , con

$$\hat{U}(T) = e^{i\lambda\hat{A}}.$$

Supongamos que  $T$  no dependiera explícitamente del tiempo. Si  $T$  es una simetría del sistema y  $\Psi$  satisface la ecuación de Schrödinger,  $i\hbar\dot{\Psi} = \hat{H}\Psi$ , también su transformada  $\Psi_T$  deberá satisfacerla:

$$i\hbar\dot{\Psi}_T = \hat{H}\Psi_T.$$

Como  $T$  no depende explícitamente del tiempo,  $\partial_t\hat{U}(T) = 0$  y entonces

$$\begin{aligned} \hat{H}\hat{U}(T)\Psi &= \hat{H}\Psi_T = i\hbar\partial_t\Psi_T = i\hbar\partial_t\hat{U}(T)\Psi \\ &= i\hbar\hat{U}(T)\partial_t\Psi = \hat{U}(T)\hat{H}\Psi. \end{aligned}$$

Puesto que esto vale para cualquier  $\Psi$ , hemos demostrado que *las transformaciones de simetría conmutan con el hamiltoniano*:

$$[\hat{H}, \hat{U}(T)] = 0 \quad (5.1.5)$$

lo que, en vista de (4.4.3), implica que

$$\hat{U}(T) = 0. \quad (5.1.6)$$

Sustituyendo  $\hat{U}$  en función de  $\hat{A}$ , diferenciando con respecto a  $\lambda$  y poniendo después  $\lambda = 0$  obtenemos que, también,

$$[\hat{H}, \hat{A}] = 0; \quad \hat{A} = 0. \quad (5.1.7)$$

Por tanto, *el observable  $\hat{A}$  conmuta con el hamiltoniano y representa una cantidad física conservada en el tiempo*; esto es, los valores esperados  $\langle A \rangle$  no cambian con el tiempo.

En lo que sigue veremos ejemplos concretos de simetrías.

## 5.2. Las traslaciones espaciales y el operador momento

Consideremos una traslación del origen de coordenadas por el vector  $\mathbf{u}$ ; los radios vectores cambian por

$$\mathbf{u} : \quad \mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} - \mathbf{u}.$$

Definimos la acción de esta transformación en una función de onda por

$$\hat{U}(\mathbf{u})\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t) \equiv \Psi_{\mathbf{u}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t) = \Psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{u}, \dots, \mathbf{r}_n - \mathbf{u}; t). \quad (5.2.1)$$

Escribamos  $\hat{U}$  como  $\hat{U} = \exp i\mathbf{u}\hat{\mathbf{A}}$ ; diferenciando (5.2.1) con respecto a  $u_j$  y poniendo  $\mathbf{u} = 0$  tenemos

$$i\hat{A}_j\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t) = -\left(\frac{\partial}{\partial r_{1j}} + \dots + \frac{\partial}{\partial r_{nj}}\right)\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t).$$

Por tanto, hemos obtenido que

$$\hat{A}_j = -\frac{1}{\hbar}\hat{P}_j,$$

donde  $\hat{\mathbf{P}}$  es el operador *momento total* del sistema,

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_{a=1}^n \hat{\mathbf{P}}_a, \quad \hat{P}_{aj} = -i\frac{\partial}{\partial r_{aj}}, \quad (5.2.2)$$

y podemos escribir  $\hat{U}(\mathbf{u})$  como

$$\hat{U}(\mathbf{u}) = e^{-i\mathbf{u}\hat{\mathbf{P}}/\hbar}. \quad (5.2.3)$$

Debido a estas ecuaciones se dice que el operador momento,  $\hat{\mathbf{P}}$ , genera las traslaciones.

Es instructivo proceder a la inversa. Conociendo la expresión de  $\hat{\mathbf{P}}$ , (5.2.2), consideramos  $e^{-i\mathbf{u}\hat{\mathbf{P}}/\hbar}$ ; vamos a verificar que este operador genera traslaciones por el vector  $\mathbf{u}$ . En efecto; desarrollando en serie.

$$\begin{aligned} \hat{U}(\mathbf{u})\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t) &= e^{-\mathbf{u}(\nabla_1 + \dots + \nabla_n)}\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t) \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \{-\mathbf{u}(\nabla_1 + \dots + \nabla_n)\}^N \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t) \end{aligned}$$

que no es más que el desarrollo de  $\Psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{u}, \dots, \mathbf{r}_n - \mathbf{u}; t)$  en serie de potencias de  $\mathbf{u}$ , con lo que efectivamente hemos deducido (5.2.1).

Si un sistema está aislado, un cambio en el origen de coordenadas no debe afectarle. Deducimos, pues, que en este caso

$$[\hat{H}, \hat{U}(\mathbf{u})] = [\hat{H}, \hat{\mathbf{P}}] = 0; \quad \hat{U} = \hat{\mathbf{P}} = 0 : \quad (5.2.4)$$

el momento total se conserva en el tiempo; es decir, el valor medio del momento total en cualquier estado,  $\langle \hat{\mathbf{P}} \rangle_\Psi$ , es independiente del tiempo.

Veamos una aplicación al caso de dos partículas. El hamiltoniano es

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad \hat{H}_0 = \frac{1}{2m_1} \hat{P}_1^2 + \frac{1}{2m_2} \hat{P}_2^2.$$

Puesto que  $[\hat{H}, \hat{\mathbf{P}}] = 0$  y como, evidentemente,  $[\hat{H}_0, \hat{\mathbf{P}}] = 0$ , deducimos que  $[V, \hat{\mathbf{P}}] = 0$  o, exponenciando,

$$[V, \hat{U}(\mathbf{u})] = 0.$$

Apliquemos esto a una función de onda arbitraria.  $\Psi$ :

$$\begin{aligned} \hat{U}(\mathbf{u})V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) &= V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{u}, \mathbf{r}_2 - \mathbf{u})\Psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{u}, \mathbf{r}_2 - \mathbf{u}; t) \\ &= V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\hat{U}(\mathbf{u})\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) = V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\Psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{u}, \mathbf{r}_2 - \mathbf{u}; t). \end{aligned}$$

Hemos obtenido que

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{u}, \mathbf{r}_2 - \mathbf{u}) \quad (5.2.5)$$

esto es,  $V$  no depende de  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$  individualmente sino sólo de la diferencia:

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (5.2.5)$$

### 5.3. El hamiltoniano como generador de traslaciones en el tiempo

Vamos a encontrar el operador que representa traslaciones en el tiempo. Tal como lo definimos en la sec. 4.2, tenemos

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t) = \hat{U}(t, t_0)\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t_0). \quad (5.3.1a)$$

Denotando por  $\tau$  a  $t - t_0$  y desarrollando en potencias de  $\tau$ ,

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t = t_0 + \tau) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\tau^N}{N!} \partial_t^N \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t_0).$$

Utilizando reiteradamente la ecuación de Schrödinger tenemos

$$\partial_t^N \Psi = \left( \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \right)^N \Psi,$$

relación válida si  $\hat{H}$  es independiente del tiempo. Según esto,

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t_0)\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t_0) &= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\tau^N}{N!} \partial_t^N \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t_0) \\ &= e^{-i\tau \hat{H}/\hbar} \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t_0), \end{aligned} \quad (5.3.1b)$$

y, en consecuencia,

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)\hat{H}/\hbar}. \quad (5.3.1c)$$

Es evidente que el hamiltoniano conmuta consigo mismo, luego  $\dot{\hat{H}} = \partial_t \hat{H}$ . Según esto, la energía será conservada cuando  $\hat{H}$  no dependa explícitamente del tiempo. La única dependencia explícita posible de  $\hat{H}$  en  $t$  es la del potencial  $V$ . luego la energía será conservada si  $V$  no depende explícitamente del tiempo, exactamente igual que en mecánica clásica.

La expresión (5.3.1c) sólo es válida si  $\hat{H}$  es independiente del tiempo. Si  $\hat{H} = \hat{H}(t)$  depende del tiempo, hay que reemplazar (5.3.1c) por

$$\hat{U}(t, t_0) = \text{Texp} \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t'). \quad (5.3.2)$$

La demostración de esta fórmula y la definición de la función Texp se verán en las secciones 9.5 y 9.6.

#### PROBLEMAS

P.5.1 Se dice que  $\hat{T}$  es antiunitario si es *antilineal*,

$$\hat{T}(\alpha\Phi + \beta\Psi) = \alpha^* \hat{T}\Phi + \beta^* \hat{T}\Psi$$

y, además,

$$\langle \hat{T}\Phi | \hat{T}\Psi \rangle = \langle \Phi | \Psi \rangle^*.$$

Demostrar que, si  $\hat{U}_{1,2}$  son unitarios y  $\hat{T}_{1,2}$  antiunitarios, entonces  $\hat{U}_1 \hat{U}_2$  y  $\hat{T}_1 \hat{T}_2$  son *unitarios* mientras que  $\hat{U}_i \hat{T}_j$  es antiunitario.

P.5.2. Demostrar que las traslaciones, rotaciones o desplazamientos en el tiempo vienen representadas necesariamente por operadores unitarios, nunca antiunitarios.

*Solución.* Consideramos, por ejemplo, la traslación representada por  $\hat{U}(a)$  (en una dimensión). Está claro que

$$\hat{U}(a) = \hat{U}(a/2)\hat{U}(a/2),$$

luego, por el resultado del problema anterior,  $\hat{U}(a)$  es unitario independientemente de la hipótesis que hagamos para  $\hat{U}(a/2)$ .



## CAPÍTULO 6.

# Problemas en una dimensión

### 6.1. Generalidades

Hasta ahora los temas tratados han sido, en su mayor parte, formales. Pero, antes de continuar con el desarrollo del aparato matemático, es conveniente estudiar con un cierto detalle algunos ejemplos sencillos que, aparte de su utilidad intrínseca, sirven para desarrollar el sentido físico de la mecánica cuántica. Específicamente, en este capítulo nos vamos a concentrar en el sencillo sistema que consta de una única partícula moviéndose en una dimensión. Sólo hay, pues, una variable espacial  $x$  y un operador momento,

$$\hat{P} = -i\hbar\partial/\partial x.$$

Consideraremos, en general, estados estacionarios para los que

$$\Psi_E(x, t) = e^{-iEt/\hbar}\psi_E(x),$$

y la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo se puede escribir como una ecuación diferencial ordinaria:

$$\hat{H}\psi_E(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_E''(x) + V(x)\psi_E(x) = E\psi_E(x) \quad (6.1.1)$$

con  $\psi_E''(x) \equiv d^2\psi_E(x)/dx^2$ .

La primera propiedad de las soluciones de (6.1.1) que vamos a demostrar es que los niveles de energía son *no-degenerados*, si las  $\psi_E$  son normalizables. Es decir, si, para la misma  $E$ ,

$$\hat{H}\psi_{E\alpha} = E\psi_{E\alpha}, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi_{E\alpha}(x)|^2 = \text{finito}; \quad \alpha = 1, 2, \quad (6.1.2)$$

entonces  $\psi_{E1}$  y  $\psi_{E2}$  son proporcionales.

En efecto: de (6.1.2) resulta inmediatamente que

$$\psi_{E1}''/\psi_{E1} = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E) = \psi_{E2}''/\psi_{E2},$$

luego  $\psi_{E1}''\psi_{E2} - \psi_{E2}''\psi_{E1} = 0$ . Integrando,

$$\psi_{E1}'\psi_{E2} - \psi_{E2}'\psi_{E1} = \text{constante}. \quad (6.1.3)$$

El valor de la constante lo podemos encontrar con el siguiente argumento. Para que  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi_{E\alpha}(x)|^2$  sea finito hace falta que  $\psi_E(x)$  tienda a cero cuando  $x$

tiende a infinito; por tanto, haciendo tender a cero el miembro de la izquierda en (6.1.3) se nos anula, lo que quiere decir que la constante que hay allí vale cero. Podemos integrar de nuevo (6.1.3) y obtener

$$\psi_{E2}(x) = (\text{constante})\psi_{E1}(x),$$

como queríamos demostrar.

Una segunda propiedad que se sigue muy fácilmente de ésta es que, ajustando la constante arbitraria en  $\psi_E$ , podemos, si  $\psi_E$  es normalizable, hacer que sea real. Para demostrarlo, tomemos complejos conjugados en (6.1.1). Nos resulta que  $\psi_E$  y  $\psi_E^*$  satisfacen exactamente la misma ecuación. Como ésta es lineal, también  $\psi_E + \psi_E^*$  la satisface. Pero, por el teorema anterior, tendrá que ser

$$\psi_E = C \{ \psi_E + \psi_E^* \}.$$

Como  $\psi_E + \psi_E^*$  es real, el teorema queda demostrado.

Estos dos resultados son ciertos incluso si las  $\psi_E$  no son normalizables, con tal de que tengan un cero en común. En efecto, con esto basta para concluir que la constante de (6.1.3) se anula.

## 6.2. Partícula libre

Comenzamos por estudiar la situación más sencilla, la de una partícula libre. La ecuación de Schrödinger la podemos escribir ahora como

$$\psi_E''(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi_E(x).$$

la solución más general dependerá de dos constantes<sup>1</sup> y la podemos escribir de varias formas equivalentes:

$$\begin{aligned} \psi_E(x) &= C_1 \operatorname{sen} kx + C_2 \operatorname{cos} kx \\ &= C_+ e^{ikx} + C_- e^{-ikx} \\ &= C \operatorname{sen}(kx + C'); \end{aligned} \tag{6.2.1a}$$

la relación entre las  $C$  es elemental, y se deja como ejercicio, y  $k$  (número de ondas) está definido por

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \tag{6.2.1b}$$

Puesto que, para una partícula libre,  $\hat{P}$  y  $\hat{H}$  conmutan, podemos diagonalizarlos simultáneamente, esto es, buscar soluciones simultáneas de las ecuaciones

$$\hat{H}\psi_{Ep} = E\psi_{Ep}, \quad \hat{P}\psi_{Ep} = p\psi_{Ep}. \tag{6.2.2}$$

<sup>1</sup> Por tanto, hay dos soluciones linealmente independientes; esto no contradice el teorema de unicidad de la sección anterior ya que ni son normalizables ni tienen ceros comunes.

Encontramos inmediatamente

$$\psi_{E_p}(x) = Ce^{ikx}, \quad p = \hbar k = +\sqrt{2mE} \quad (6.2.3a)$$

si  $p \geq 0$  y, para  $p \leq 0$ ,

$$\psi_{E_p}(x) = Ce^{-ikx}, \quad p = -\hbar k = -\sqrt{2mE}. \quad (6.2.3b)$$

Podemos escribirlas simultáneamente como

$$\psi_{E_p}(x) = Ce^{ipx/\hbar}. \quad (6.2.3c)$$

La solución (6.2.3a) representa ondas planas (partículas) moviéndose en la dirección de las  $x$  crecientes, y la (6.2.3b) lo mismo hacia las  $x$  negativas. Nótese que la relación entre energía y momento clásicos,  $E_{cl} = p_{cl}^2/2m$ , se mantiene para los valores propios cuánticos,  $E = p^2/2m$ .

Calculemos la normalización de los estados (6.2.3):

$$\langle \psi_{E_p} | \psi_{E_{p'}} \rangle = |C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{i(p'-p)x/\hbar} = 2\pi\hbar |C|^2 \delta(p-p'). \quad (6.2.4)$$

Ondas normalizadas a  $\delta(p-p')$  se obtienen escogiendo  $|C| = (2\pi\hbar)^{-1/2}$ .

Los estados  $\psi_E$  o  $\psi_{E_p}$  no son de norma finita. Para acabar esta sección vamos a construir estados normalizables que evolucionen de acuerdo con la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Evidentemente, no serán estados estacionarios y por tanto tampoco serán solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, sino que serán superposiciones de estados con distintos valores del momento y de la energía.

Comenzamos con un paquete de ondas a tiempo  $t = 0$ ,

$$\Psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{ipx/\hbar} \Psi(p, 0). \quad (6.2.5)$$

En representación de momentos el operador evolución temporal para una partícula libre es, según (4.5.4b),

$$\hat{U}(t, 0) = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} = e^{-ip^2 t/2m\hbar}, \quad (6.2.6)$$

con lo que obtenemos

$$\Psi(p, t) = e^{-ip^2 t/2m\hbar} \Psi(p, 0). \quad (6.2.7a)$$

En espacio de posición, por tanto,

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{ipx/\hbar - ip^2 t/2m\hbar} \Psi(p, 0). \quad (6.2.7b)$$



Estas integrales pueden calcularse explícitamente para un paquete gaussiano como los de la sec. 3.1, que por comodidad tomamos centrado en el origen:

$$\Psi(x, 0) = \exp \frac{-a^2 p^2}{2\hbar^2}. \quad (6.2.8)$$

Entonces,

$$\Psi(p, t) = \exp \left\{ -\frac{itp^2}{2m\hbar} - \frac{a^2 p^2}{2\hbar^2} \right\} \quad (6.2.9a)$$

y, después de una integración estándar,

$$\Psi(x, t) = \frac{\hbar^{1/2}}{\sqrt{a^2 + i\hbar t/m}} \exp \frac{-x^2}{2(a^2 + i\hbar t/m)}. \quad (6.2.9b)$$

Nótese que (6.2.9b) se puede reescribir como

$$\Psi(x, t) = \frac{\hbar^{1/2}}{\sqrt{a^2 + i\hbar t/m}} \exp \left\{ -\left( a^2 - i\frac{\hbar t}{m} \right) \frac{x^2}{2(a^4 + \hbar^2 t^2/m^2)} \right\}$$

con lo que vemos inmediatamente que

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{\hbar}{\sqrt{a^4 + t^2 \hbar^2/m^2}} \exp \left\{ -\frac{a^2 x^2}{a^4 + \hbar^2 t^2/m^2} \right\}.$$

Al evolucionar con el tiempo, el paquete se ha *ensanchado* de forma que, a tiempo  $t$ ,

$$(\Delta Q)_{\Psi(x,t)}^2 = \frac{a^2}{2} + \frac{\hbar^2}{2m^2 a^2} t^2. \quad (6.2.10)$$

Ésta es una propiedad general, que estudiaremos con más detalle en la sección 21.1.

### 6.3. Partícula en un pozo infinito. Barrera infinita

#### 6.3.1 Pozo infinito

El siguiente ejemplo que consideramos es el de una partícula confinada en un pozo de potencial infinito de longitud  $L$ , de manera que se tiene  $0 \leq x \leq L$ . Tomamos el origen de energías de manera que, en el interior del pozo, el potencial sea cero (fig. 6.3.1) y por tanto la función de onda, para un estado estacionario con energía  $E$ , satisface la ecuación

$$\psi_E''(x) = \frac{-2mE}{\hbar^2} \psi_E(x), \quad 0 \leq x \leq L, \quad (6.3.1a)$$

que es formalmente idéntica a la de una partícula libre. Sin embargo, para  $x \leq 0$  y para  $x \geq L$  la función de onda tiene que anularse ya que la partícula no puede penetrar en estas regiones. La ecuación (6.3.1a) debe pues complementarse con los requisitos

$$\psi_E(0) = 0, \quad x < 0; \quad x > L. \quad (6.3.1b)$$

La probabilidad de encontrar la partícula en un punto no puede variar bruscamente. Por tanto, los valores de  $\psi_E(x)$  en el interior y en el exterior del pozo deben de empalmarse suavemente. Es decir, de las soluciones de (6.3.1a) sólo podemos aceptar las que satisfacen las condiciones de contorno

$$\psi_E(0) = \psi_E(L) = 0. \quad (6.3.1c)$$

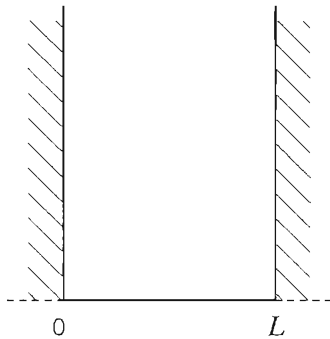


FIGURA 6.3.1.  
Pozo de potencial infinito.

Si escribimos la solución general de (6.3.1a) como

$$\psi_E(x) = C_1 \operatorname{sen} kx + C_2 \operatorname{cos} kx, \quad k = +\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},$$

la única posibilidad de satisfacer (6.3.1c) es tener  $C_2 = 0$  y, además,

$$k = k_n \equiv \frac{n\pi}{L}, \quad n = \text{entero positivo} = 1, 2, 3, \dots \quad (6.3.2a)$$

Por tanto, la energía está cuantizada y tenemos

$$\begin{aligned} \psi_n(x) \equiv \psi_{E_n}(x) &= C \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L}. \quad |C| = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad \text{si } \langle \psi_{E_n} | \psi_{E_{n'}} \rangle = \delta_{nn'}; \\ E_n &= \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (6.3.2b)$$

En el caso del pozo infinito podemos estudiar con detalle el límite clásico,  $\hbar \rightarrow 0$ . Para que la mecánica clásica sea una buena aproximación hace falta que la dimensión característica sea muy grande en comparación con la constante de Planck. La única cantidad con dimensiones de acción que podemos formar es la “acción” entre 0 y  $L$ ,

$$\mathcal{A} = \int_0^L dp_n, \quad p_n = \sqrt{2mE_n}.$$

Utilizando (6.3.2b),  $\mathcal{A} = n\pi\hbar$ : es pues necesario que  $n \gg 1$ . Los niveles energéticos siguen cuantizados, pero el salto relativo entre dos niveles consecutivos tiende a cero:

$$\frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2} \ll 1$$

y, en los aparatos de medida, estos niveles aparecerán como un continuo.

Para hacernos una idea numérica, tomamos una partícula con masa  $m = 10^{-20}$  gr., confinada en una región  $L$  de 1 mm, y con energía  $E = 10^{-3}$  ergios. Entonces,  $n \simeq 1.3 \times 10^{14}$  y el salto entre dos niveles consecutivos es

$$E_{n+1} - E_n \simeq 1.7 \times 10^{-17} \text{ erg.}$$

totalmente indetectable.

Esta propiedad de que el límite clásico se alcanza para grandes valores de los números cuánticos ( $n$ , en nuestro caso) es válida con bastante generalidad.

El segundo límite que vamos a considerar es el de la partícula libre, esto es, cuando las paredes del pozo se van al infinito. Para simplificarlo hacemos primero un cambio del origen de coordenadas de forma que  $x \rightarrow x - L/2$  y el pozo pasa a estar situado entre  $-L/2$  y  $+L/2$ . Las funciones de onda son pues,

$$\psi_n(x) = C \left\{ \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L} \operatorname{cos} \frac{n\pi}{2} - \operatorname{cos} \frac{n\pi x}{L} \operatorname{sen} \frac{n\pi}{2} \right\}.$$

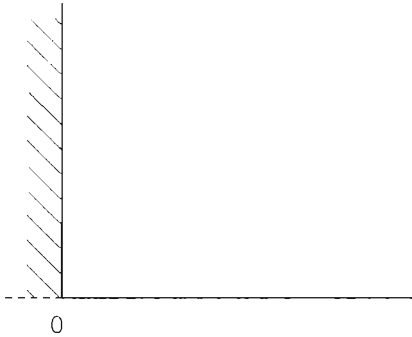


FIGURA 6.3.2.  
“Frontón”

Hay que distinguir entre valores pares e impares de  $n$ . En el primer caso, tenemos una solución de tipo seno; en el segundo, de tipo coseno. Combinándolas, es decir, considerando combinaciones del tipo  $A\psi_{n+1} + B\psi_n$ , encontraríamos la solución general como la (6.2.1a). El que la solución tipo seno y la tipo coseno ocurran para dos valores distintos (pero contiguos) de  $n$  no es un problema; como veremos, en el límite  $L \rightarrow \infty$  hay que tomar también  $n \rightarrow \infty$  y los dos valores  $n, n + 1$  se confunden.

En efecto; consideremos el caso  $n = \text{par}$ , para fijar ideas. Absorbiendo el coseno en la constante arbitraria  $C$  tenemos

$$\psi_n(x) = C \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L}. \tag{6.3.3}$$

Para que  $\psi_n$  no se anule cuando  $L \rightarrow \infty$  es necesario hacer a la vez  $n \rightarrow \infty$  de forma que el cociente  $n/L$  tenga un límite finito. Definamos  $k$  por  $\lim n/L \equiv k/\pi$ . Utilizando también (6.3.2b) encontramos

$$L \rightarrow \infty; \quad n \rightarrow \infty; \quad \frac{n\pi}{L} \rightarrow k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{6.3.4}$$

y

$$\psi_n(x) \rightarrow \psi_E(x) = C \operatorname{sen} kx. \tag{6.3.5}$$

### 6.3.2. Barrera infinita

Consideramos ahora una barrera infinita, que localizamos en  $x = 0$  (ver fig. 6.3.2). La ecuación de Schrödinger y condición de contorno son

$$\psi_E''(x) = \frac{-2mE}{\hbar^2} \psi_E(x), \quad 0 \leq x, \quad \psi_E(x) = 0, \quad x \leq 0.$$

Podemos escribir la solución como

$$\psi_E(x) = \bar{C} \operatorname{sen} kx = C \left\{ e^{-ikx} + e^{i(kx+\pi)} \right\}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (6.3.6)$$

y podemos interpretarla físicamente como la suma de una onda incidente sobre el “frontón”,  $e^{-ikx}$ , y una reflejada  $e^{i(kx+\pi)}$ , desfasada en  $\pi$  con respecto a la incidente.

Nótese que, debido al cero de las funciones de onda aceptables, localizado en  $x = 0$ , la solución cuando hay una barrera infinita es única (salvo la constante multiplicativa), a pesar de que no es normalizable.

#### 6.4. Condiciones de contorno periódicas

En muchos casos de interés práctico nos encontramos con la propagación de partículas en un medio periódico; por ejemplo, electrones en cristales. Supongamos que la periodicidad recorre cada distancia  $L$ . Podemos incorporar esto, al menos en una primera aproximación, suponiendo la partícula libre pero imponiendo condiciones de contorno de periodicidad,

$$\psi_E(x + L) = \psi_E(x).$$

La solución genral de la ecuación de Schrödinger con estas condiciones es

$$\psi_n(x) \equiv \psi_{E_n}(x) = C_+ e^{ik_n x} + C_- e^{-ik_n x} \quad (6.4.1a)$$

y la condición de periodicidad implica que

$$Lk_n = 2n\pi, \quad n = \text{entero} = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots \quad (6.4.1b)$$

La energía está cuantizada:

$$E_n = \frac{2n^2 \pi^2 \hbar^2}{mL^2}. \quad (6.4.1c)$$

En el límite de  $L \rightarrow \infty$  la periodicidad desaparece y el espectro tiende a uno continuo.

Este caso es muy parecido al de la sección anterior, y su discusión se deja como ejercicio. También se deja como ejercicio el comparar esta situación con la discutida en la sección 3.6.

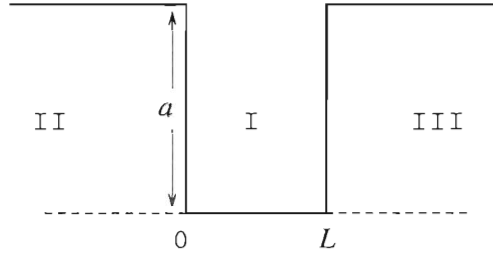


FIGURA 6.5.1. Pozo cuadrado simétrico.

### 6.5. Pozo cuadrado. Empalmes. Pozo asimétrico con barrera infinita

#### 6.5.1. Pozo cuadrado; empalmes

El siguiente caso que consideraremos es ligeramente más complicado, y consiste en un pozo cuadrado (fig. 6.5.1) de longitud  $L$  y altura  $a$ . Tomamos el origen de energías en el fondo del pozo, y es conveniente distinguir tres regiones:

Región I:  $0 \leq x \leq L$ ; Región II:  $x \leq 0$ ; Región III:  $x \geq L$ .

Asimismo hay que considerar por separado los dos casos  $E > a$  y  $E < a$  (pero, por supuesto,  $E > 0$ ; si no, no hay solución).

En la región I la ecuación de Schrödinger es la misma en ambos casos,

$$\psi''_E(x) = \frac{-2mE}{\hbar^2} \psi_E(x), \quad 0 \leq x \leq L,$$

cuya solución escribimos (recordar (6.2.1))

$$\psi_{1E}(x) = C_1 \text{sen}(kx + \delta_1), \quad k = +\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}; \quad 0 \leq x \leq L. \quad (6.5.1)$$

Consideremos para comenzar el caso  $E > a$ . En las regiones II y III,  $V(x) = a$ ; luego la ecuación de Schrödinger es como la de una partícula libre, pero con energía  $E - a$ ,

$$\psi''_{\text{II,III}E}(x) = \frac{-2m(E - a)}{\hbar^2} \psi_{\text{II,III}E}(x),$$

con las soluciones

$$\begin{aligned}\psi_{\text{II,III } E}(x) &= C_{\text{II,III}}^+ e^{ik_a x} + C_{\text{II,III}}^- e^{-ik_a x}; \\ k_a &= + \frac{\sqrt{2m(E-a)}}{\hbar}.\end{aligned}\tag{6.5.2}$$

Físicamente, sin embargo,  $\psi_{\text{II,III } E}$  no son tres funciones independientes, sino trozos de la misma función de onda. Ésta no puede variar bruscamente, luego debemos satisfacer las condiciones de empalme,

$$\psi_{\text{II } E}(0) = \psi_{\text{I } E}(0), \quad \psi_{\text{I } E}(L) = \psi_{\text{III } E}(L).\tag{6.5.3}$$

Todavía debemos imponer una condición más, y es que la derivada  $\psi'$  sea continua en 0 y  $L$ . La razón es que, de lo contrario,  $\psi''$  sería infinita en estos puntos, lo que no es posible ya que el hamiltoniano contiene una segunda derivada (el término  $-(\hbar^2/2m)d^2/dx^2$ ). Por tanto, hemos de tener

$$\psi'_{\text{II } E}(0) = \psi'_{\text{I } E}(0), \quad \psi'_{\text{I } E}(L) = \psi'_{\text{III } E}(L).\tag{6.5.4}$$

Las *cuatro* condiciones (6.5.3) y (6.5.4) nos permiten fijar las *seis* constantes  $C$  en función de una de ellas (y la inevitable constante global). El valor de la constante no-trivial depende de las condiciones de contorno, que varían según el problema físico que queramos describir. Por ejemplo, si queremos estudiar el caso en el que lanzamos partículas desde  $-\infty$ , no puede haber función de onda que represente partículas viniendo de  $+\infty$ , luego debemos poner  $C_{\text{III}}^- = 0$ . De la misma manera, si las partículas viniesen de  $+\infty$  se tendría  $C_{\text{II}}^+ = 0$ .

No vamos a estudiar más este caso  $E > a$ , que se deja como ejercicio, ya que en la sec. 6.6 veremos una situación similar (barrera cuadrada). Sólo mencionaremos que, a diferencia del caso clásico, donde *todas* las partículas atraviesan el pozo, en mecánica cuántica unas lo atraviesan y otras son reflejadas.

Pasemos ahora al caso  $E < a$ . La solución en la región I no cambia; en II y III, sin embargo, al ser  $E - a$  negativo las soluciones son

$$\begin{aligned}\psi_{\text{II,III } E}(x) &= C_{\text{II,III}}^+ e^{\kappa_a x} + C_{\text{II,III}}^- e^{-\kappa_a x}, \\ \kappa_a &= + \frac{\sqrt{|E-a|}}{\hbar}.\end{aligned}\tag{6.5.5}$$

Estas soluciones sólo son físicamente aceptables para ciertos valores de las  $C$ . En efecto: consideremos  $\psi_{\text{III } E}(x)$  para  $x \rightarrow +\infty$ . El trozo  $C_{\text{III}}^- e^{-\kappa_a x}$  decrece muy rápidamente y nos queda

$$\psi_{\text{III } E}(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\simeq} C_{\text{III}}^+ e^{\kappa_a x}$$

lo que es absurdo ya que  $e^{\kappa_a x}$  crece sin límite al crecer  $x$  y, por tanto, representaría una partícula cuya probabilidad de desaparecer hacia  $+\infty$  crece exponencialmente. Por tanto, necesariamente se ha de tener  $C_{III}^+ = 0$ . De forma análoga probaríamos que  $C_{II}^- = 0$ , luego

$$\begin{aligned}\psi_{II E}(x) &= C_{II}^+ e^{\kappa_a x}, \\ \psi_{III E}(x) &= C_{III}^- e^{-\kappa_a x}\end{aligned}\tag{6.5.6}$$

Las condiciones de empalme (6.5.3) y (6.5.4) siguen valiendo y nos dicen que

$$C_{II}^+ = C_I \sin \delta_1, \quad C_{III}^- = C_I \sin(kL + \delta_1) e^{\kappa_a L}.\tag{6.5.7a}$$

y

$$C_{II}^+ = C_I \frac{k}{\kappa_a} \cos \delta_1, \quad C_{III}^- = -C_I \frac{k}{\kappa_a} \cos(kL + \delta_1) e^{\kappa_a L}.\tag{6.5.7b}$$

Por consiguiente ahora  $\delta_1$  está fijo,

$$\tan \delta_1 = k/\kappa_a$$

y el valor de  $E$  no puede ser cualquiera sino que viene forzado por la condición de consistencia

$$\tan(kL + \delta_1) = -k/\kappa_a,$$

que nos permite eliminar  $\delta_1$ . La condición de cuantización se obtiene una vez eliminado  $\delta_1$ . La función arco tangente está determinada salvo un múltiplo entero de  $\pi$ ; llamando  $\text{Arc tan}$  a la determinación principal de este arco tangente, definida entre  $-\pi/2$  y  $\pi/2$ , la ecuación de consistencia es

$$Lk_n + 2 \text{Arc tan} \frac{k}{\kappa_a} = n\pi.\tag{6.5.7c}$$

El número de soluciones (*estados ligados*) es un número finito,  $N$ ,

$$N = \text{parte entera de} \left( 1 + \frac{L\sqrt{2am}}{\pi\hbar} \right)$$

como es fácil comprobar.



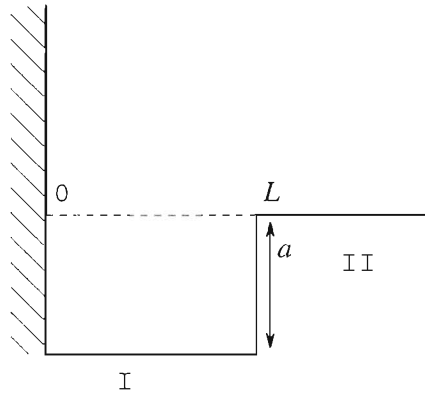


FIGURA 6.5.2. Pozo asimétrico, con barrera infinita.

### 6.5.2. Potencial cuadrado con barrera infinita

Hay una situación que, aunque no aporta nada desde el punto de vista de problemas en una dimensión, es útil para discutir más adelante problemas tridimensionales. Es un pozo cuadrado de longitud  $L$  y profundidad  $a$ , con una barrera infinita en  $x = 0$  (fig. 6.5.2). La ecuación de Schrödinger en la región I es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_I''(x) - a\psi_I(x) = E\psi_I(x), \quad (6.5.8a)$$

y en la región II,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_{II}''(x) = E\psi_{II}(x). \quad (6.5.8b)$$

Comencemos con el caso  $E < 0$ . Las soluciones en I, II son

$$\psi_I(x) = C_0 \operatorname{sen} \kappa_a x, \quad \psi_{II}(x) = C e^{-\kappa x}; \quad (6.5.9a)$$

$$\kappa_a = \frac{\sqrt{2m(a - |E|)}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(|E|)}}{\hbar}$$

Si normalizamos la solución a  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$  y utilizamos las condiciones de empalme, entonces encontramos los valores de las constantes<sup>2</sup>

$$C = C_0 e^{\kappa L} \operatorname{sen} \kappa_a L, \quad C_0 = \left\{ \frac{2\kappa_a}{\kappa_a L + \operatorname{sen}^2 \kappa_a L - \operatorname{sen} 2\kappa_a L} \right\}^{1/2}. \quad (6.5.9b)$$

y la ecuación de consistencia

$$\tan \kappa_a L = -\kappa_a / \kappa. \quad (6.5.9c)$$

<sup>2</sup> Salvo una fase que escogemos para que la función de onda sea real.

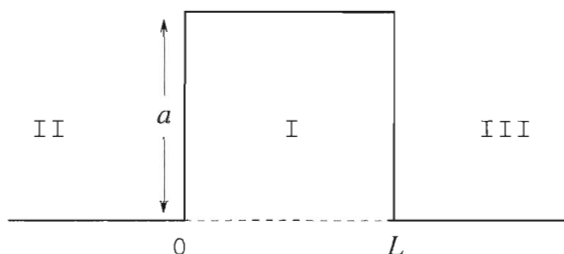


FIGURA 6.6.1. Barrera cuadrada simétrica.

Esta última sólo tiene solución si  $\kappa_a L \geq \pi/2$ , luego sólo en este caso habrá estados ligados. Si se tiene exactamente

$$\frac{L}{\hbar} \sqrt{2ma} = \pi/2 \tag{6.5.10}$$

entonces el estado ligado está justo en el borde,  $E = 0$ .

Para  $E > 0$  escribimos las soluciones como

$$\begin{aligned} \psi_I(x) = C_0 \operatorname{sen} k_0 x, \quad \psi_{II}(x) = C \operatorname{sen}(kx + \delta); \\ k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k_a = \frac{\sqrt{2m(E+a)}}{\hbar}. \end{aligned} \tag{6.5.11a}$$

Las condiciones de empalme nos dan

$$C = C_0 \frac{\operatorname{sen} k_a L}{\operatorname{sen}(kL + \delta)}, \quad \cot \delta = \frac{k_a + k \tan kL \tan k_a L}{k \tan k_a L - k_a \tan kL}. \tag{6.5.11b}$$

### 6.6. Barrera de potencial. Efecto túnel

Hay un caso parecido al pozo cuadrado que es también interesante: es el de una barrera cuadrada (fig. 6.6.1). Si  $E > a$ , la situación es similar a la del pozo, y la solución la dejamos como ejercicio. Pasemos al caso  $E < a$ . Clásicamente, una partícula lanzada, por ejemplo desde la izquierda, siempre rebotará; cuánticamente la situación es muy distinta, y hay una probabilidad de que la partícula atraviese la barrera (*efecto túnel*).

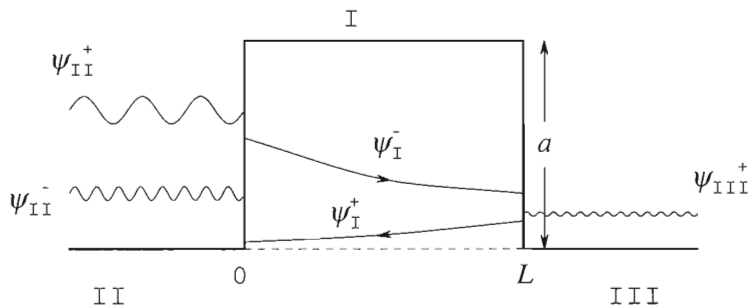


FIGURA 6.6.2. Penetración y reflexión en una barrera cuadrada simétrica.

En las regiones II, III la ecuación de Schrödinger es idéntica a la de una partícula libre. Escribimos las soluciones como

$$\begin{aligned} \psi_{\text{II,III}} E(x) &= C_{\text{II,III}}^+ e^{ikx} + C_{\text{II,III}}^- e^{-ikx} \\ &\equiv \psi_{\text{II,III}}^+(x) + \psi_{\text{II,III}}^-(x) \end{aligned} \quad (6.6.1a)$$

mientras que, en la región I,

$$\psi_{\text{I}} E(x) = C_{\text{I}}^+ e^{\kappa_a x} + C_{\text{I}}^- e^{-\kappa_a x} \equiv \psi_{\text{I}}^+ + \psi_{\text{I}}^-; \quad (6.6.1b)$$

$\kappa_a$  y  $k$  son como antes. Las condiciones de empalme nos dan

$$\begin{aligned} C_{\text{II}}^+ + C_{\text{II}}^- &= C_{\text{I}}^+ + C_{\text{I}}^-, \quad C_{\text{I}}^+ - C_{\text{I}}^- = \frac{ik}{\kappa_a} (C_{\text{II}}^+ - C_{\text{II}}^-); \\ C_{\text{I}}^+ e^{\kappa_a L} + C_{\text{I}}^- e^{-\kappa_a L} &= C_{\text{III}}^+ e^{ikL} + C_{\text{III}}^- e^{-ikL}; \\ C_{\text{I}}^+ e^{\kappa_a L} - C_{\text{I}}^- e^{-\kappa_a L} &= \frac{ik}{\kappa_a} (C_{\text{II}}^+ e^{ikL} - C_{\text{II}}^- e^{-ikL}). \end{aligned} \quad (6.6.1c)$$

Vamos a considerar una situación en la que la física es particularmente transparente. Como sabemos, una función de ondas  $\psi^\pm(x) = Ce^{\pm ikx}$  representa una partícula libre moviéndose en el sentido de las  $x$  positivas ( $\psi^+$ ) o negativas ( $\psi^-$ ). Si queremos considerar el caso de una partícula lanzada hacia la barrera desde las  $x$  negativas (fig. 6.6.2), la función de onda en la región II tendrá ambas componentes, ya que esperamos que haya onda reflejada; pero la función de onda en la región III sólo deberá tener la componente  $\psi_{\text{III}}^+$ , ya que no hay

partículas que vengan de  $x > L$ . Por tanto, en esta situación debemos de tomar  $C_{III}^- = 0$  con lo que (6.6.1c) se simplifica a

$$\begin{aligned}
 C_{III}^+ &= \frac{2e^{-ikL}}{1 - ik/\kappa_a} e^{-\kappa_a L}, & C_I^+ &= -rC_I^-; \\
 C_I^- &= \frac{2}{1 + i\kappa_a/k - (1 - i\kappa_a/k)r} C_{II}^+; \\
 C_{II}^- &= \left(1 - \frac{\kappa_a}{ik} \frac{r+1}{r-1}\right) \left(1 + \frac{\kappa_a}{ik} \frac{r+1}{r-1}\right)^{-1} C_{II}^+; \\
 r &= \frac{1 + \kappa_a/ik}{1 - \kappa_a/ik} e^{-\kappa_a L}.
 \end{aligned}
 \tag{6.6.2}$$

Podemos describir lo que ocurre como sigue (figura 6.6.2). La partícula llega a la barrera desde las  $x$  negativas (onda  $\psi_{II}^+$ ); parte se refleja, y contribuye a  $\psi_{II}^-$ , y parte se transmite al interior de la barrera (onda  $\psi_I^-$ ). Ésta es una onda atenuada con la distancia, ya que decrece exponencialmente. Al llegar  $\psi_I^-$  a  $L$ , parte se refleja (onda  $\psi_I^+$ , que sigue siendo atenuada) y parte se transmite,  $\psi_{III}^+$ . Desde luego esto no acaba aquí; hay reflexiones/transmisiones múltiples en los extremos de la barrera, pero muy atenuadas: al viajar dentro de la barrera, por ejemplo de 0 a  $L$ , la onda sufre una atenuación  $e^{-\kappa_a L}$ , luego la  $n$ -ésima reflexión estará suprimida por un factor  $e^{-n\kappa_a L}$ .

EJERCICIO: Demostrar que, en el límite clásico,

$$|\psi_{II}^-| \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} |\psi_{II}^+|$$

y todas las demás  $\psi_{I,III}^\pm$  tienden a cero comparadas con  $\psi_{II}^+$  •

## 6.7. Ceros. Comportamiento de las funciones de onda de estados ligados a gran distancia.

### Normalización de estados del continuo

#### 6.7.1. Ceros

Volvemos ahora a estudiar propiedades generales de sistemas en una dimensión. En todos los casos que hemos resuelto, si ordenamos el espectro  $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$  de manera que

$$E_0 < E_1 < E_2 < \dots < E_n < \dots$$

hemos encontrado que  $\psi_0$  (la función de onda del estado fundamental) no se anula en la región accesible a la partícula,  $\psi_1$  (primer estado excitado) se anula una vez,  $\psi_2$  dos veces, etc. Además, los ceros de  $\psi_{n+1}$  separan a los de  $\psi_n$  (teorema de Sturm). Esto son propiedades generales para potenciales que sólo tengan un mínimo; nosotros no las demostraremos.

6.7.2. Funciones de onda de estados ligados a gran  $x$ 

Hemos visto en los ejemplos de las secciones anteriores que las funciones de onda decrecen exponencialmente en las regiones en las que la partícula no tiene posibilidad clásica de penetrar. Por ejemplo, cuando  $x \rightarrow +\infty$ , si no existe la posibilidad clásica de alejarse indefinidamente. Esto es de esperar: los efectos de tipo túnel, puramente cuánticos, deben decrecer a grandes distancias y también en el límite  $\hbar \rightarrow 0$ .

Es posible dar una demostración bastante general de esto; para fijar ideas, consideramos el caso  $x \rightarrow +\infty$ . Supongamos entonces que tenemos un potencial cualquiera con tal de que, para  $x \rightarrow +\infty$ ,

$$V(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\simeq} \lambda x^\nu, \quad \lambda > 0, \nu \geq 0, \quad (6.7.1)$$

y supongamos, además, que  $E < \lim_{x \rightarrow +\infty} V(x)$ . Para  $x \rightarrow +\infty$  podemos sustituir  $V(x)$  por su forma asintótica (6.7.1) con lo que la ecuación de Schrödinger nos queda

$$\frac{\hbar^2}{2m} \psi_E''(x) \underset{x \rightarrow +\infty}{\simeq} (\lambda x^\nu - E) \psi_E(x)$$

que se puede resolver asintóticamente con solución

$$\begin{aligned} \psi_E(x) \underset{x \rightarrow +\infty}{\simeq} \exp(-bx^M), \\ b = \frac{\sqrt{2m\lambda_\nu}}{\hbar(1 + \nu/2)}, \quad M = 1 + \nu/2 \end{aligned} \quad (6.7.2)$$

donde  $\lambda_\nu = \lambda$  si  $\nu > 0$  y  $\lambda_\nu = \lambda - E$  para  $\nu = 0$ .

Un punto importante es la presencia de  $\hbar$  en el denominador de  $b$ , en (6.7.2). Esto quiere decir que, como anunciamos, la probabilidad de encontrar una partícula en regiones clásicamente prohibidas decrece exponencialmente en el límite clásico,  $\hbar \rightarrow 0$ .

EJERCICIO: Verificar el resultado (6.7.2) en los casos que hemos estudiado anteriormente •

### 6.7.3. Normalización de estados del continuo

En la sección 2.3, cuando discutimos por primera vez estados propios  $\Psi_\lambda$  de un observable correspondiendo a valores propios continuos, hicimos ver que podían normalizarse no por una delta de Kronecker, sino una de Dirac:

$$\langle \Psi_\lambda | \Psi_{\lambda'} \rangle = \delta(\lambda - \lambda'). \quad (6.7.3)$$

Dado que  $\Psi_\lambda$  y  $C\Psi_\lambda$  corresponden al mismo estado, dada una función de onda específica, se nos plantea el encontrar la constante de normalización tal que se tenga exactamente una delta, como en (6.7.3).

En algunos casos el cálculo es casi trivial; por ejemplo, si tenemos  $\Psi_p = C \exp(ipx/\hbar)$ , podemos integrar explícitamente y comprobar que, si  $|C| = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ , entonces

$$\langle \Psi_p | \Psi_{p'} \rangle = \delta(p - p').$$

Pero en muchos casos la expresión explícita de las  $\Psi$  es muy complicada y un cálculo directo muy difícil; para algunas interacciones no es posible ni encontrar la solución de la ecuación de Schrödinger en términos de funciones estándar.

En esta subsección vamos a describir un método que nos permite obtener la normalización de soluciones de la ecuación de Schrödinger sin más que conocer su forma asintótica (a gran  $x$ ). Vamos a discutir únicamente el caso en que  $\lambda$  es  $k = \hbar^{-1}\sqrt{2mE}$  y, en vista de aplicaciones, suponemos que las funciones de onda se anulan para  $x \leq 0$ . Suponemos, además, que el potencial  $V(x)$  se anula rápidamente<sup>3</sup> para  $x \rightarrow \infty$

Denotemos por  $\psi_k(x)$  a las soluciones de la ecuación de Schrödinger, con  $k$  el número de ondas. Puesto que  $k$  es un observable, tendremos

$$\int_0^{+\infty} dx \psi_k^*(x) \psi_{k'}(x) = C \delta(k - k'); \quad (6.7.4)$$

se trata de encontrar el valor de la constante  $C$ . Para ello, consideramos la ecuación de Schrödinger para gran  $x$ . Puesto que el potencial tiende hacia cero en el infinito, la ecuación será idéntica a la de una partícula libre y, por tanto, tendremos

$$\psi_k(x) \underset{x \rightarrow +\infty}{\simeq} A \text{sen}(kx + \delta). \quad (6.7.5a)$$

Para otro valor  $k'$ ,  $\psi_{k'}(x) \simeq A' \text{sen}(kx + \delta')$ . En el cálculo actual sólo nos interesa el caso  $k \simeq k'$ : ya sabemos que, si  $k \neq k'$ , entonces la integral en (6.7.4) se anula. Podemos, por tanto, tomar  $A = A'$ ,  $\delta = \delta'$ .

Haciendo ahora el cambio de coordenadas  $x = y - x_0$ ,  $x_0 = \delta/k$ , tenemos el comportamiento

$$\psi \simeq A \text{sen } ky,$$

<sup>3</sup> Esto quiere decir que va a cero como  $\sim 1/x^\nu$  con  $\nu > 1$ . El caso  $\nu = 1$  lo discutiremos al final.

con  $A, \delta$  independientes de  $k$ . Supongamos  $\delta > 0$  para fijar ideas; definimos la función  $\varphi$  por

$$\psi_k(y) \equiv \varphi_k(y) + A \operatorname{sen} ky, \quad y \geq 0. \quad (6.7.5b)$$

entonces  $\varphi_k(y) \rightarrow 0$  para  $y \rightarrow \infty$ . De hecho, con la condición que hemos puesto para  $V(x)$ , este límite se alcanza con suficiente rapidez<sup>4</sup> para que las siguientes integrales sean convergentes:

$$\int_0^{+\infty} dy \varphi_k^*(y) \operatorname{sen} k'y \equiv a; \quad \int_0^{+\infty} dy \varphi_k^*(y) \varphi_{k'}(y) \equiv b.$$

Con una sencilla evaluación, encontramos que

$$\int_0^{+\infty} dy \operatorname{sen} ky \operatorname{sen} k'y = \frac{\pi}{2} \delta(k - k'). \quad (6.7.6)$$

Por tanto,

$$\int_0^{+\infty} dx \psi_k^*(x) \psi_{k'}(x) = a + a^* + b + |A|^2 \frac{\pi}{2} \delta(k - k').$$

Comparando con (6.7.4) obtenemos que tiene que ser  $a + a^* + b = 0$  y  $C = |A|^2 \pi/2$ :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_k^*(x) \psi_{k'}(x) = \frac{\pi |A|^2}{2} \delta(k - k'). \quad (6.7.7)$$

Resumiendo, tenemos la receta siguiente: evalúese  $\psi_k(x)$  para grandes valores de  $x$ . Necesariamente ha de ser de la forma

$$\psi_k(x) \underset{x \rightarrow +\infty}{\simeq} A \operatorname{sen}(kr + \delta). \quad (6.7.8)$$

Entonces, las  $\psi_k(x)$  están normalizadas por (6.7.7).

El caso del potencial coulombiano, que estudiaremos en detalle en la sección 17.3, sale fuera de esta demostración ya que no decrece suficientemente rápido en el infinito. Si denotamos por  $\chi_k(r)$  a la función coulombiana, se tiene, a grandes valores de  $r$ ,

$$\chi_k(r) \underset{r \rightarrow +\infty}{\simeq} \operatorname{sen}(kr - (\sigma/a_0 k) \log 2kr - l\pi/2 + \delta_l) \quad (6.7.9)$$

(el significado de las constantes que aparecen aquí lo veremos en la sec. 17.3). Sin embargo, el resultado sigue siendo válido ya que, debido a lo lentamente variable del logaritmo, la integral correspondiente a (6.7.6) con

$$\operatorname{sen}(kr - (\sigma/a_0 k) \log 2kr - l\pi/2 + \delta_l)$$

es idéntica a la integral con  $\operatorname{sen}(kr + \delta)$ .

<sup>4</sup> Dejamos como un ejercicio la demostración de esta propiedad

EXERCICIO: Proporcionar los detalles del caso coulombiano. Extender la discusión al caso de tres dimensiones •

### 6.8. Coeficientes de transmisión y reflexión a través de una barrera de potencial

Consideremos un potencial tal que

$$V(x) \underset{x \rightarrow -\infty}{\rightarrow} 0; \quad V(x) \underset{x \rightarrow +\infty}{\rightarrow} a \geq 0; \quad (6.8.1)$$

la forma detallada de  $V$  no nos importa ahora. Para  $x \rightarrow -\infty$  la función de onda será

$$\psi(x) \underset{x \rightarrow -\infty}{\simeq} \psi_-(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k = \hbar^{-1}\sqrt{2mE}. \quad (6.8.2)$$

Para  $x \rightarrow +\infty$

$$\psi(x) \underset{x \rightarrow +\infty}{\simeq} \psi_-(x) = A_+e^{ik_a x} + B_+e^{-ik_a x}, \quad k_a = \hbar^{-1}\sqrt{2m(E-a)};$$

suponemos  $E > a$ . Si consideramos que hemos lanzado la partícula desde  $x = -\infty$ , en la región  $x \ll 0$  tendremos onda incidente y reflejada; lo que podemos poner de manifiesto reescribiendo (6.8.2) como

$$\begin{aligned} \psi(x) \underset{x \rightarrow -\infty}{\simeq} \psi_-(x) &= \psi_{\text{in}}(x) + \psi_{\text{r}}(x), \\ \psi_{\text{in}}(x) &= Ae^{ikx}, \quad \psi_{\text{r}}(x) = Be^{-ikx}; \end{aligned} \quad (6.8.3a)$$

pero, en la región  $x \gg 0$ , sólo tendremos onda moviéndose hacia la derecha. Por tanto, en esta situación  $B_+ = 0$  y podemos escribir

$$\psi(x) \underset{x \rightarrow +\infty}{\simeq} \psi_-(x) = A_+e^{ik_a x}. \quad (6.8.3b)$$

Calculemos las *corrientes de probabilidad*. En una dimensión hay que reemplazar (4.6.2) por

$$j(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \Psi \frac{d}{dx} \Psi^* - \Psi^* \frac{d}{dx} \Psi \right\}. \quad (6.8.4)$$

La corriente transmitida es el límite para gran  $x$  positivo de (6.8.4), esto es,

$$j_+(x) = \frac{i\hbar}{2m} \{ \psi_+ \psi_+'^* - \psi_+'^* \psi_+ \} = \frac{\hbar k_a}{m} |A_+|^2. \quad (6.8.5)$$

Nótese la clara interpretación física:  $|A_+|^2$  es la densidad de partículas, y  $\hbar k_a/m$  la velocidad.



En la región  $x \rightarrow -\infty$ ,

$$\begin{aligned} j(x) \underset{x \rightarrow -\infty}{\simeq} j_+(x) &= \frac{i\hbar}{2m} \left\{ (\psi_{\text{in}} + \psi_r) (\psi'_{\text{in}} + \psi'_r) - (\psi_{\text{in}}^* + \psi_r^*) (\psi'_{\text{in}} + \psi'_r) \right\} \\ &= |A|^2 \frac{\hbar k}{m} - |B|^2 \frac{\hbar k}{m} \end{aligned} \quad (6.8.6)$$

y el término mixto (con producto de  $A$ s y  $B$ s) se anula. Como vemos, el miembro de la derecha es la diferencia de dos trozos: corriente incidente ( $j_{\text{in}}$ ) y reflejada,  $j_r$ , con

$$\begin{aligned} j_-(x) &= j_{\text{in}}(x) - j_r(x), \\ j_{\text{in}}(x) &= |A|^2 \frac{\hbar k}{m}, \quad j_r = |B|^2 \frac{\hbar k}{m}. \end{aligned} \quad (6.8.7)$$

Los *coeficientes de transmisión* (o *difusión*),  $D$ , y de *reflexión*,  $R$ , se definen como la probabilidad de que la partícula atravesase o se refleje en el potencial:

$$D = j_+/j_{\text{in}}, \quad R = j_r/j_{\text{in}}. \quad (6.8.8)$$

Utilizando (6.8.6) y (6.8.7) tenemos que

$$D = \frac{|A_+|^2 k_a}{|A|^2 k}, \quad R = \frac{|B|^2}{|A|^2}. \quad (6.8.9)$$

Es evidente que una partícula es transmitida o es reflejada, luego debe ser

$$R + D = 1, \quad (6.8.10)$$

esto es,

$$|A_+|^2 k_a + |B|^2 k = |A|^2 k. \quad (6.8.11)$$

Veamos esto en el caso sencillo de una barrera como la de la figura 6.6.2, con altura  $a$  y longitud  $L$ . Definimos

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k_a = \frac{\sqrt{2m(E-a)}}{\hbar}, \quad \kappa_a = \frac{\sqrt{2m(a-E)}}{\hbar}, \quad .$$

Encontramos, después de un cálculo sencillo, pero algo latoso,

$$\begin{aligned} D &= \frac{4k^2 \kappa_a^2}{(k^2 + \kappa_a^2)^2 \sinh^2 L \kappa_a^2 + 4k^2 \kappa_a^2}, \quad \text{para } E < a; \\ D &= \frac{4k^2 k_a^2}{(k^2 - k_a^2)^2 \sen^2 L k_a^2 + 4k^2 k_a^2}, \quad \text{para } E > a; \end{aligned} \quad (6.8.12)$$

EJERCICIO: Calcular  $R$  en este caso de la barrera y comprobar que, efectivamente,  $R + D = 1$  •

PROBLEMAS

P.6.1. Considérese una partícula en un pozo infinito. Se tiene, para su función de onda,

$$\begin{aligned} d\psi(x)/dx &= \frac{Cn\pi}{L} \cos \frac{n\pi x}{L}, \quad 0 < x < L, \\ d\psi(x)/dx &= 0, \quad \text{fuera del pozo.} \end{aligned}$$

Aparentemente, esto implica que

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\left(\frac{\pi n}{L}\right) \psi(x) + C\left(\frac{\pi n}{L}\right) \{\delta(x) + \delta(x-L)\}.$$

Demuéstrese que, considerando la situación física en la que un pozo infinito es, realmente, el límite de un pozo finito con paredes muy altas, se pueden suprimir los términos con  $\delta(x)$ ,  $\delta(x-L)$ .

P.6.2. Dada una partícula en un pozo infinito, en el estado fundamental, encontrar la probabilidad  $W(p)$  de que su momento tenga el valor  $p$ .

*Solución.*  $W(p) = |\psi_1(p)|^2$ , donde  $\psi_1(p)$  es la función en espacio de impulsos. Normalizando a la unidad,  $\psi_1(x) = \sqrt{2/L} \text{sen } \pi x/L$ , se tiene

$$|\psi_1(p)|^2 = \frac{4\pi\hbar^3 L}{(p^2 L^2 - \pi^2 \hbar^2)^2} \cos^2 \frac{pL}{2\hbar}.$$

P.6.3. Calcular los coeficientes de transmisión y reflexión,  $D$  y  $R$ , en un potencial escalón

$$V(x) = 0, \quad x < 0; \quad V(x) = a, \quad x > 0$$

cuando  $E > a$ .

*Solución.*

$$R = (p_1 - p_2)^2 / (p_1 + p_2)^2; \quad D = 4p_1 p_2 / (p_1 + p_2)^2$$

con

$$p_1 = \sqrt{2mE}, \quad p_2 = \sqrt{2m(E-a)}.$$

Para  $E = a$  hay reflexión total:  $R = 1$ ,  $D = 0$ .

P.6.4. Calcular los estados ligados para un potencial *diádico* o *separable*,  $V_f = \lambda|f\rangle\langle f|$  definido por

$$V_f \psi(x) = \lambda \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dy f^*(y) \psi(y) \right\} f(x).$$

*Solución.* En espacio de momentos la ecuación de Schrödinger es

$$(p^2/2m)\psi(p) + \lambda \tilde{f}(p) \int dp' \tilde{f}^*(p') \psi(p') = E\psi(p),$$

con  $\tilde{f}(p)$  la transformada de Fourier de  $f$ . Definiendo

$$\alpha \equiv \int dp' \tilde{f}^*(p') \psi(p')$$

hallamos la función de onda

$$\psi(p) = \lambda \alpha \int dp' \tilde{f}(p)/(E - p^2/2m).$$

Los valores de la energía se obtienen de la ecuación (implícita) de consistencia que se obtiene sustituyendo este valor de  $\psi(p)$  en la expresión para  $\alpha$ :

$$\alpha = \lambda \alpha \int dp \tilde{f}^*(p) \tilde{f}(p)/(E - p^2/2m).$$

**P.6.5.** Calcular los estados ligados para un potencial de tipo delta, esto es,  $V_{x_0}(x) = \lambda \delta(x - x_0)$ .

*Solución.* En espacio de momentos el correspondiente hamiltoniano es

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi(p) &= (p^2/2m)\psi(p) + \lambda(2\pi\hbar)^{-1/2} e^{-ipx_0/\hbar} \psi(x_0) \\ &= (p^2/2m)\psi(p) + \lambda(2\pi\hbar)^{-1} e^{-ipx_0/\hbar} \int dp' e^{ip'x_0/\hbar} \psi(p'), \end{aligned}$$

que es como el del problema anterior con  $f(p) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{-ipx_0/\hbar}$ .

## CAPÍTULO 7.

# El oscilador armónico

### 7.1. Generalidades

Consideremos una partícula, clásica o cuántica, que se mueve alrededor de un punto que tomamos como origen de coordenadas, y sujeta a un potencial regular en el origen y con simetría esférica,  $V(\mathbf{r}^2)$ . Si suponemos que la partícula no se aleja mucho del origen (*pequeñas oscilaciones, o vibraciones*) podemos considerar que  $|\mathbf{r}|$  es pequeño y aproximar

$$V(\mathbf{r}^2) \simeq V(0) + \mathbf{r}^2 V'(0),$$

despreciando términos de orden  $|\mathbf{r}|^4$  y superior. El término  $V(0)$  lo podemos reabsorber en una redefinición del origen de energías; vemos pues que, en estas circunstancias, podemos aproximar cualquier potencial que sea regular en el origen por el del llamado *oscilador armónico*. Consideramos potenciales atractivos; de lo contrario, la partícula no se quedaría en una región próxima al origen. En este caso es conveniente definir la frecuencia  $\omega$  por  $V'(0) = \frac{1}{2}m\omega^2$ ; con esto el hamiltoniano se convierte en

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^3 \left( \frac{1}{2m} \hat{P}_j^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 r_j^2 \right). \quad (7.1.1a)$$

Como vemos, éste es la suma de tres hamiltonianos independientes para cada coordenada,

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^3 \hat{H}_j, \quad \hat{H}_j = \frac{1}{2m} \hat{P}_j^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 r_j^2. \quad (7.1.1b)$$

Los tres  $\hat{H}_j$  conmutan entre sí, y por tanto pueden diagonalizarse simultáneamente: basta buscar soluciones por separado de

$$\hat{H}_j \psi_{jE}(r_j) = E_j \psi_{jE}(r_j); \quad \hat{H} \psi_E(\mathbf{r}) = E \psi_E(\mathbf{r}) \quad (7.1.2a)$$

con

$$\psi_E(\mathbf{r}) = \prod_{j=1}^3 \psi_{jE}(r_j), \quad E = E_1 + E_2 + E_3. \quad (7.1.2b)$$

Es decir: hemos reducido el problema, originalmente tridimensional, a resolver el oscilador armónico en una dimensión, que escribimos simplemente como

$$\hat{H} \psi_E(x) = E \psi_E(x); \quad \hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \quad (7.1.3)$$

Antes de resolver el problema cuántico (lo que haremos por dos métodos distintos, uno funcional y otro algebraico) vamos a recapitular el caso clásico, en particular reescribiéndolo de una forma que va a ser útil para ver después el caso cuántico. El hamiltoniano (la energía) y las ecuaciones del movimiento clásicos son

$$\begin{aligned} H_{cl} = E_{cl} &= \frac{1}{2m} p_{cl}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x_{cl}^2; \\ \dot{x}_{cl} &= \frac{1}{m} p_{cl}, \quad \dot{p}_{cl} = -m \omega^2 x_{cl}, \end{aligned} \quad (7.1.4)$$

y hemos utilizado un punto para denotar derivación con respecto al tiempo. Para resolver el problema podemos, en lugar de las variables reales  $p_{cl}$ ,  $x_{cl}$ , utilizar la variable compleja  $\alpha$  (y su conjugada,  $\alpha^*$ ) con

$$\alpha(t) = \frac{1}{\sqrt{\hbar\omega}} \left\{ \omega \sqrt{\frac{m}{2}} x_{cl} + \frac{i}{\sqrt{2m}} p_{cl} \right\}. \quad (7.1.5)$$

La  $\hbar$  se introduce aquí por comodidad de paso al caso cuántico pero, por supuesto,  $\alpha$  es tan clásica como las  $x_{cl}$ ,  $p_{cl}$ . En términos de  $\alpha$ , (7.1.4) se convierte en

$$E_{cl} = \hbar\omega\alpha^*(t)\alpha(t), \quad \dot{\alpha}(t) = -i\omega\alpha(t) \quad (7.1.6a)$$

con solución

$$\alpha(t) = \alpha_0 e^{-i\omega t}, \quad E_{cl} = \hbar\omega\alpha_0^*\alpha_0 \quad (7.1.6b)$$

y  $\alpha_0$  es una constante.

## 7.2. Método funcional

Es conveniente hacer el cambio de variables

$$x \rightarrow \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad \psi_E(x) \rightarrow \psi_E(\xi). \quad (7.2.1a)$$

Con él, se puede reescribir (7.1.3) como

$$\frac{d^2\psi_E(\xi)}{d\xi^2} + \left( \frac{2E}{\hbar\omega} - \xi^2 \right) \psi_E(\xi) = 0. \quad (7.2.1b)$$

Consideremos el límite  $\xi \rightarrow \infty$ ; en él podemos despreciar  $2E/\hbar\omega$  frente a  $\xi^2$ , con lo que tenemos

$$\psi_E''(\xi) - \xi^2\psi_E(\xi) \underset{\xi \rightarrow \infty}{\simeq} 0,$$

con solución

$$\psi_E(\xi) \underset{\xi \rightarrow \infty}{\simeq} C_+ e^{\xi^2/2} + C_- e^{-\xi^2/2}.$$

$C_+$  tiene que anularse porque, si no,  $\psi_E(\xi)$  crecería sin límite para gran  $\xi$ . Por tanto,

$$\psi_E(\xi) \underset{\xi \rightarrow \infty}{\simeq} C e^{-\xi^2/2}.$$

Esto nos sugiere que definamos  $\varphi_E$  por

$$\psi_E(\xi) = e^{-\xi^2/2} \varphi_E(\xi);$$

con ello (7.2.1b) se nos convierte en la siguiente ecuación para  $\varphi_E$ :

$$\varphi_E''(\xi) - 2\xi\varphi_E'(\xi) + 2n_E\varphi_E(\xi) = 0, \quad (7.2.2a)$$

$$n_E \equiv \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}. \quad (7.2.2b)$$

La ecuación (7.2.2) es una ecuación diferencial clásica; sus únicas soluciones que no estropean el comportamiento asintótico son polinomiales, los conocidos como *polinomios de Hermite*,<sup>1</sup>  $H_n$ :

$$\varphi(\xi) = H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.2.3a)$$

Además, los  $H_n$  satisfacen la propiedad de ortogonalidad

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_{n'}(\xi) = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{nn'}, \quad (7.2.3b)$$

y esta solución sólo existe si  $n_E = n = \text{entero}$ . Por lo tanto, la energía está cuantizada y hemos obtenido que sus valores posibles son los  $E_n$  con

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.2.4)$$

Deshaciendo el cambio de variables, las soluciones completas y normalizadas a una delta de Kronecker son las  $\psi_n$  con

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} e^{-m\omega x^2/2\hbar} H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right); \quad \langle \psi_n | \psi_{n'} \rangle = \delta_{nn'}. \quad (7.2.5)$$

El oscilador armónico tiene la propiedad de ser simétrico en el espacio de las  $x$  y el de las  $p$ . En efecto: distinguiendo con el subíndice  $p$  a los operadores en representación de momentos,  $\hat{P}_p = p$ ,  $\hat{Q}_p = i\hbar d/dp$ , tenemos

$$\hat{H}_p = \frac{1}{2m} p^2 - \frac{m\omega^2 \hbar^2}{2} \frac{d^2}{dp^2}. \quad (7.2.6)$$

Para obtener la solución de  $\hat{H}_p \psi_{p,n}(p) = E_n \psi_{p,n}(p)$  basta con definir, en (7.2.6),  $M \equiv 1/m\omega^2$ . Entonces, (7.2.6) es formalmente idéntica a la ecuación original en  $x$  con la sustitución  $m \rightarrow M$ . Por tanto,

$$\begin{aligned} \psi_{p,n}(p) &= \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} e^{-M\omega p^2/2\hbar} H_n\left(p\sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}\right) \\ &= \left(\frac{1}{\pi m\omega\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} e^{-p^2/2m\omega\hbar} H_n\left(\frac{p}{\sqrt{\hbar m\omega}}\right). \end{aligned} \quad (7.2.7)$$

<sup>1</sup> Ver, por ejemplo, Courant y Hilbert (1953); Oberhettinger, Magnus y Soni (1965).

### 7.3. Método algebraico

El método algebraico se basa en el uso sistemático de las relaciones de conmutación de Heisenberg. Sin embargo, en vez de trabajar directamente con los operadores  $\hat{Q}$  y  $\hat{P}$  es conveniente introducir, análogamente a como hicimos con  $\alpha$  en el caso clásico, un nuevo operador  $\hat{a}$ ,

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{\hbar\omega}} \left\{ \omega \sqrt{\frac{m}{2}} \hat{Q} + \frac{i}{\sqrt{2m}} \hat{P} \right\} \quad (7.3.1a)$$

y su adjunto,

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{\hbar\omega}} \left\{ \omega \sqrt{\frac{m}{2}} \hat{Q} - \frac{i}{\sqrt{2m}} \hat{P} \right\}. \quad (7.3.1b)$$

En efecto, en términos de éstos tanto el hamiltoniano como las relaciones de conmutación se simplifican:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right); \quad [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1. \quad (7.3.2)$$

Lo primero que se puede demostrar fácilmente, utilizando (7.3.2), es que cualquier valor propio de la energía,  $E$ , es igual o superior a  $\hbar\omega/2$ . En efecto, normalizando  $\psi_E$  a  $\|\psi_E\| = 1$ ,

$$\begin{aligned} E &= \langle \psi_E | \hat{H} \psi_E \rangle = \hbar \langle \psi_E | \hat{a}^\dagger \hat{a} \psi_E \rangle + \frac{1}{2} \hbar\omega \langle \psi_E | \psi_E \rangle \\ &= \frac{1}{2} \hbar\omega + \hbar\omega \|\hat{a} \psi_E\|^2 \geq \frac{1}{2} \hbar\omega. \end{aligned}$$

Debido a esto, debe existir un valor mínimo de la energía,  $E_0 \geq \frac{1}{2} \hbar\omega$ ; denotaremos por  $\psi_0$  a la correspondiente función de onda propia,  $\hat{H} \psi_0 = E_0 \psi_0$ .

Para calcular  $E_0$  (y todas las demás energías) comenzamos por probar que el operador  $\hat{a}^\dagger/\hat{a}$  incrementa/disminuye la energía en la cantidad  $\hbar\omega$ . En efecto: si tenemos  $\hat{H} \psi_E = E \psi_E$ , entonces, utilizando (7.3.2),

$$\begin{aligned} \hat{H} \left( \hat{a}^\dagger \psi_E \right) &= \frac{1}{2} \hbar\omega \hat{a}^\dagger \psi_E + \hbar\omega \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger \psi_E \\ &= \hat{a}^\dagger \hbar\omega \left\{ \frac{1}{2} + \hat{a}^\dagger \hat{a} \right\} \psi_E + \hbar\omega \hat{a}^\dagger \psi_E = \hat{a}^\dagger \hat{H} \psi_E + \hbar\omega \hat{a}^\dagger \psi_E \\ &= E \hat{a}^\dagger \psi_E + \hbar\omega \hat{a}^\dagger \psi_E = (E + \hbar\omega) \left( \hat{a}^\dagger \psi_E \right). \end{aligned}$$

La demostración de que

$$\hat{H}(\hat{a} \psi_E) = (E - \hbar\omega)(\hat{a} \psi_E)$$

es similar y se deja como ejercicio. Debido a estas propiedades se llama a  $\hat{a}$  operador de *destrucción* o *aniquilación* de energía, y a  $\hat{a}^\dagger$  operador de *creación*; y a ambos *operadores escalera*.

Volvamos a  $E_0$  y  $\psi_0$ . La función de onda  $\hat{a} \psi_0$  corresponde, según lo que acabamos de demostrar, a energía  $E_0 - \hbar\omega$ . Como, por hipótesis,  $E_0$  era la energía mínima, encontramos una contradicción a menos que  $\hat{a} \psi_0$  se anule.

Utilizando la forma (7.3.2) del hamiltoniano vemos que esto implica que  $\hat{H}\psi_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega\psi_0$ : hemos demostrado que

$$\hat{H}\psi_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega\psi_0; \quad \hat{a}\psi_0 = 0. \quad (7.3.3)$$

Construimos ahora las funciones de onda  $\bar{\psi}_n$ ,

$$\bar{\psi}_n \equiv (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0.$$

Dado que cada vez que aplicamos  $\hat{a}^\dagger$  incrementamos la energía en  $\hbar\omega$ , resulta que

$$\hat{H}\bar{\psi}_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})\bar{\psi}_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.3.5)$$

Hemos encontrado una parte del espectro de energías; nos falta por demostrar que no hay más. Para ello, supongamos que  $\varphi_E$  fuese una solución de  $\hat{H}\varphi_E = E\varphi_E$ . Aplicando  $\hat{a}^\dagger$  a  $\varphi_E$  disminuimos su energía en  $\hbar\omega$  luego

$$\hat{H}(\hat{a}^\dagger\varphi_E) = (E - \hbar\omega)(\hat{a}^\dagger\varphi_E).$$

Cuando  $l$  crece, llegará un momento que  $E - \hbar\omega$  sea menor que  $\frac{1}{2}\hbar\omega$ . Como esto es imposible, hace falta que, para algún  $l_0$ , sea  $\hat{a}^{l_0}\varphi_E = 0$ . Por tanto,

$$\hat{a}(\hat{a}^{l_0-1}\varphi_E) = 0,$$

lo que, en vista de la forma de  $\hat{H}$ , (7.3.2), implica que

$$\hat{H}(\hat{a}^{l_0-1}\varphi_E) = \frac{1}{2}\hbar\omega(\hat{a}^{l_0-1}\varphi_E)$$

por una parte; pero, por otra,

$$\hat{H}(\hat{a}^{l_0-1}\varphi_E) = \{E - \hbar\omega(l_0 - 1)\}(\hat{a}^{l_0-1}\varphi_E),$$

luego, identificando, hemos encontrado que  $E = (l_0 - 1)\hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega$ , que es de la forma (7.3.5). Que  $\hat{a}^{l_0-1}\varphi_E$  es proporcional a  $\bar{\psi}_{l_0-1}$  se sigue del hecho que, para estados ligados en una dimensión, el espectro es no-degenerado (sec. 6.1).

Los estados  $\bar{\psi}_n$  no están normalizados a la unidad. Escribimos

$$\langle \bar{\psi}_n | \bar{\psi}_n \rangle = \langle \bar{\psi}_0 | \hat{a}^n (\hat{a}^\dagger)^n \bar{\psi}_0 \rangle.$$

Suponemos que hemos escogido  $\psi_0$  normalizado a la unidad,  $\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1$ . Utilizando reiteradamente las relaciones de conmutación para llevar las  $\hat{a}^\dagger$  a la izquierda de las  $\hat{a}$ , resulta que

$$\hat{a}^n (\hat{a}^\dagger)^n = n! + (\text{términos con al menos un } \hat{a} \text{ a la derecha}).$$

Estos últimos términos darán cero al aplicárseles sobre  $\psi_0$  luego

$$\langle \bar{\psi}_n | \bar{\psi}_n \rangle = \langle \bar{\psi}_0 | \hat{a}^n (\hat{a}^\dagger)^n \bar{\psi}_0 \rangle = n! \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = n!.$$

Los estados normalizados son, pues,

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0; \quad \langle \psi_n | \psi_{n'} \rangle = \delta_{nn'}. \quad (7.3.6)$$



EJERCICIO: 1. Comprobar las relaciones

$$\begin{aligned} [\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^n] &= n(\hat{a}^\dagger)^{n-1}, \\ [\hat{H}, \hat{a}] &= -\hbar\omega\hat{a}, \\ \hat{a}\psi_n &= \sqrt{n}\psi_{n-1}, \quad \hat{a}^\dagger\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1} \quad \bullet \end{aligned} \quad (7.3.7)$$

#### 7.4. Sistemas de osciladores independientes

Consideremos un cuerpo sólido, y supongamos que las moléculas del mismo están localizadas en promedio en los puntos  $\mathbf{R}(\mathbf{n})$ , donde  $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$  son números enteros,  $n_j = 0, 1, 2, \dots, N_j - 1$ . Por ejemplo, en un cristal, los puntos de la red de moléculas vienen dados por

$$\mathbf{R}(\mathbf{n}) = n_1\mathbf{u}_1 + n_2\mathbf{u}_2 + n_3\mathbf{u}_3,$$

con  $\mathbf{u}_j$  los vectores elementales de la red; en total hay  $N_1N_2N_3$  moléculas. En la figura 7.4.1 hay un ejemplo de red bidimensional, con  $N_1 = 6$ ,  $N_2 = 5$ .

Si  $\mathbf{r}(\mathbf{n})$  es el vector posición de la molécula  $\mathbf{n}$ -ésima, denotamos por  $\mathbf{q}(\mathbf{n})$  al desplazamiento de esta molécula de su posición de equilibrio (fig. 7.4.1):  $\mathbf{r}(\mathbf{n}) = \mathbf{R}(\mathbf{n}) + \mathbf{q}(\mathbf{n})$ .

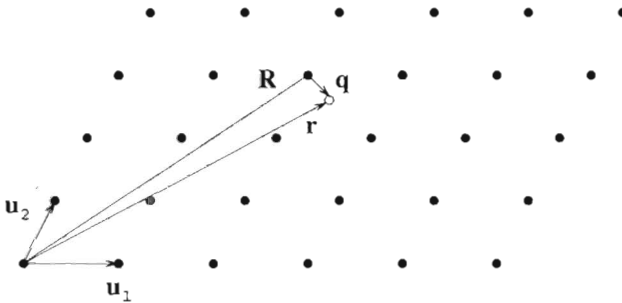


FIGURA 7.4.1. Red bidimensional.

Como primera aproximación podemos reemplazar la interacción entre las moléculas por un potencial global periódico  $V$ , con mínimos para las  $\mathbf{R}(\mathbf{n})$  y que, para pequeñas vibraciones, podemos aproximar por

$$V = \sum_{\mathbf{n}} V_{\mathbf{n}}(0) + \sum V''_{\mathbf{n},ij} q_i(\mathbf{n}) q_j(\mathbf{n}) + O(q^4).$$

No consideramos la posibilidad de que haya un término lineal que, por otra parte, podría eliminarse (problema P.7.1).

Supongamos, por simplificar, que el sólido es homogéneo e isótropo: todas las moléculas tienen la misma masa  $m$ , y el potencial no cambia de un punto a otro. Por tanto,  $V''_{\mathbf{n},ij} = c\delta_{ij}$  y  $c$  es independiente de  $\mathbf{n}$ . Podemos definir  $\omega^2$  por  $c = \frac{1}{2}m\omega^2$  con lo que el hamiltoniano del sistema se nos convierte en

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{n}} \left\{ \frac{1}{2m} \sum_j \hat{P}_{\mathbf{n}j}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 \sum_j \hat{q}_j^2(\mathbf{n}) \right\} + V(0), \quad (7.4.1)$$

$V(0) \equiv \sum V_{\mathbf{n}}(0)$ . Hemos preferido guardar aquí  $V(0)$  explícitamente en vez de cambiar el origen de energías para cancelarlo por motivos que se verán después.  $\hat{q}$  es el operador multiplicación por  $q$ , y el operador momento para cada molécula es

$$\hat{P}_{\mathbf{n},j} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_{j}(\mathbf{n})} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_j(\mathbf{n})},$$

puesto que las  $\mathbf{R}$  son constantes.

El problema se convierte en uno de  $N_1 N_2 N_3$  osciladores armónicos independientes; su solución es sencilla si buscamos estados propios, a la vez, de todos los operadores  $\hat{H}(\mathbf{n}, j)$ ,

$$\begin{aligned} \hat{H}(\mathbf{n}, j) &= \frac{1}{2m} \hat{P}_{\mathbf{n}j}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{q}_j^2(\mathbf{n}), \\ \hat{H} &= \sum_{\mathbf{n}, j} \hat{H}(\mathbf{n}, j) + V(0). \end{aligned} \quad (7.4.2)$$

Para ello, definimos los operadores  $\hat{a}(\mathbf{n}, j)$ , y su adjunto  $\hat{a}^\dagger(\mathbf{n}, j)$ , con

$$\hat{a}(\mathbf{n}, j) = \frac{1}{\sqrt{\hbar\omega}} \left\{ \omega \sqrt{\frac{m}{2}} \hat{q}_j(\mathbf{n}) + \frac{i}{\sqrt{2m}} \hat{P}_{\mathbf{n}j} \right\}. \quad (7.4.3)$$

Tenemos las relaciones de conmutación

$$\begin{aligned} [\hat{a}(\mathbf{n}, j), \hat{a}(\mathbf{n}', j')] &= 0, \\ [\hat{a}(\mathbf{n}, j), \hat{a}^\dagger(\mathbf{n}', j')] &= \delta_{jj'} \delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}'}. \end{aligned} \quad (7.4.4)$$

Además, en términos de los  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^\dagger$ ,

$$\hat{H}(\mathbf{n}, j) = \hbar\omega \left\{ \hat{a}^\dagger(\mathbf{n}, j) \hat{a}(\mathbf{n}, j) + \frac{1}{2} \right\}. \quad (7.4.5)$$

y la energía mínima se obtendrá para un estado  $\psi_0$  tal que

$$\hat{a}(\mathbf{n}, j)\psi_0 = 0. \quad \text{para todos los } \mathbf{n}, j. \quad (7.4.6)$$

Por tanto,

$$\hat{H}(\mathbf{n}, j)\psi_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega\psi_0$$

luego

$$\hat{H}\psi_0 = \left\{ \frac{3}{2}N_1N_2N_3\hbar\omega + V(0) \right\} \psi_0 \quad (7.4.7a)$$

y hemos tenido en cuenta que  $\sum_{\mathbf{n}, j} \hbar\omega = 3N_1N_2N_3\hbar\omega$ .

Ahora se ve por qué hemos guardado la  $V(0)$ . Cuando el sólido es macroscópico, las  $N_j$  son enormes; típicamente,  $N_1N_2N_3 \sim 10^{23}$  (el número de Avogadro). Por tanto, resulta más cómodo y natural escoger

$$V(0) = -\frac{3}{2}N_1N_2N_3\hbar\omega \quad (7.4.7b)$$

con lo que (7.4.7a) se convierte en

$$\hat{H}\psi_0 = 0, \quad (7.4.7c)$$

esto es, *contamos energías desde el mínimo*.

Para obtener el resto del espectro de energías y los estados propios formamos los estados

$$\psi_E = \prod_{\mathbf{n}=(0,0,0)}^{(N_1-1, N_2-1, N_3-1)} \prod_{j=1}^3 \left[ \hat{a}^\dagger(\mathbf{n}, j) \right]^{l(\mathbf{n}, j)} \psi_0 \quad (7.4.8)$$

donde los  $l(\mathbf{n}, j)$  son una colección de números enteros y se tiene

$$\hat{H}\psi_E = E\psi_E; \quad E = \hbar\omega \sum_{\mathbf{n}=(0,0,0)}^{(N_1-1, N_2-1, N_3-1)} \sum_{j=1}^3 l(\mathbf{n}, j). \quad (7.4.9)$$

EJERCICIO: 1. Escribir las fórmulas correspondientes a las que van de (7.4.2) hasta (7.4.9) en una dimensión ( $\mathbf{n} \rightarrow n$ , el índice  $j$  desaparece) •

## 7.5. Osciladores acoplados. Modos normales.

### Vibraciones de un cristal: fonones.

#### Estructura en bandas de las energías de un cristal

##### 7.5.1. Vibraciones de un sólido

Nuestro siguiente paso en el estudio de las vibraciones de un sólido va a ser el tener en cuenta las interacciones entre las moléculas, lo que nos va a permitir considerar el caso en que las perturbaciones se transmiten de unas a otras (por ejemplo, como las ondas de sonido). De estas interacciones sólo tenemos en cuenta las de cada molécula con las adyacentes (*interacción a primeros vecinos*). Esto añade un término extra al potencial que denotamos por  $V_{p.v.}$  y que, para una dimensión (vibraciones de una “cuerda” o “varilla”) y para pequeñas oscilaciones, podemos escribir como

$$V_{p.v.} = V_{p.v.}(|x(n+1) - x(n)|) \simeq \sum V_{p.v.}^{(0)} + V_{p.v.}^{(2)} \sum_n \left\{ q(n+1) - q(n) \right\}^2.$$

Es decir, suponemos que la interacción depende de lo que se separan, relativamente, los vecinos próximos. Hemos supuesto también que el sólido es homogéneo para tomar  $V^{(2)}$  independiente de  $n$  y recordamos que  $x(n) = R(n) + q(n)$  con  $R(n) = nu$ ; aquí  $u$  es la distancia entre dos moléculas adyacentes, en la posición de equilibrio (en el caso clásico; en el caso cuántico, en la posición media). Nótese, además, que un posible término lineal proporcional a  $\sum_n \{q(n+1) - q(n)\}$  se anula al sumar a todos los puntos de la cuerda, excepto por términos involucrando los extremos, que son de orden relativo  $1/N$  y despreciaremos sistemáticamente.

Para comodidad del cálculo es conveniente dejar a  $n$  que recorra los enteros positivos y negativos, de  $-N$  hasta  $+N$ :

$$n = -N, -N + 1, \dots, -1, 0, 1, 2, \dots, +N$$

de forma que el total de moléculas es ahora  $2N + 1$ . El hamiltoniano total es, pues,

$$\hat{H} = \sum_{n=-N}^{+N} \left\{ \frac{1}{2m} \hat{P}_n^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{q}^2(n) + \frac{1}{2} \lambda \left[ \hat{q}(n+1) - \hat{q}(n) \right]^2 \right\} + C \quad (7.5.1)$$

donde hemos definido  $\frac{1}{2} \lambda \equiv V_{p.v.}^{(2)}$ .

Es conveniente hacer ahora una pequeña discusión acerca de los extremos de la varilla (o cuerda). En las ecuaciones de más arriba, por ejemplo en la última, tenemos un término de la forma  $\frac{1}{2} \lambda [\hat{q}(N+1) - \hat{q}(N)]^2$  que no está definido. Podemos definirlo requiriendo periodicidad,  $\hat{q}(N+1) = \hat{q}(-N)$ ,  $\hat{q}(-N-1) = \hat{q}(N)$  o poniendo  $\hat{q}(N+1) = \hat{q}(-N-1) = 0$ , también por definición. Estas condiciones de contorno introducen términos de orden relativo  $1/(2N+1)$  y por tanto, como ya hemos mencionado antes, los despreciaremos.

### 7.5.2. Modos normales (caso clásico)

Antes de resolver el problema cuántico, es conveniente estudiar en algún detalle el caso clásico. El hamiltoniano es ahora

$$H_{cl} = \sum_{n=-N}^{+N} \left\{ \frac{1}{2m} p_n^2(t) + \frac{1}{2} m \omega^2 q_n^2(t) + \frac{1}{2} \lambda \left[ q_{n+1}(t) - q_n(t) \right]^2 \right\} + C; \quad (7.5.2)$$

hemos cambiado un poco la notación y la hemos aligerado prescindiendo del índice "cl" en  $qs$  y  $ps$ . Las ecuaciones del movimiento son

$$\begin{aligned} p_n(t) &= m \dot{q}_n(t), \\ \dot{p}_n(t) &= -m\omega^2 q_n(t) + \lambda \left[ q_{n+1}(t) + q_{n-1}(t) - 2q_n(t) \right]. \end{aligned} \quad (7.5.3)$$

El problema se resuelve en términos de los llamados *modos* (o *variables*) *normales*, que describen las vibraciones del cristal como un todo. Sustituimos el conjunto discreto de variables  $p_n(t)$ ,  $q_n(t)$  por el conjunto continuo,  $\alpha(k, t)$  donde  $k$  varía entre  $-\pi/u$  y  $+\pi/u$  y definimos

$$\alpha(k, t) = \beta(k) \sum_{n=-N}^{+N} e^{-inku} \left\{ q_n(t) + \frac{i}{m\Omega(k)} p_n(t) \right\}; \quad (7.5.4)$$

compárese con (7.4.3). Las  $\Omega(k)$  (*frecuencias normales*) se van a determinar pidiendo que las ecuaciones (7.5.3) se conviertan en lo análogo a la (7.1.6a),

$$\dot{\alpha}(k, t) = -i\Omega(k)\alpha(k, t). \quad (7.5.5a)$$

Derivando (7.5.4) y utilizando (7.5.3),

$$\dot{\alpha} = \beta \sum e^{-inku} \left\{ \frac{1}{m} p_n - i \frac{m\omega^2 + 2\lambda}{m\Omega} q_n + \frac{i}{m\Omega} (q_{n+1} + q_{n-1}) \right\}.$$

Los dos últimos términos pueden tratarse cambiando de variable de suma,  $n \rightarrow n' = n + 1$  y  $n \rightarrow n'' = n - 1$  y utilizando la periodicidad con lo que nos queda

$$i\dot{\alpha} = \beta \sum e^{-inku} \left\{ \frac{i}{m} p_n + \frac{m\omega^2 + 2\lambda(1 - \cos ku)}{m\Omega} q_n \right\},$$

luego (7.5.5a) se obtendrá si escogemos

$$\Omega^2(k) = \omega^2 + \frac{2\lambda}{m} (1 - \cos ku). \quad (7.5.5b)$$

A esta relación se la suele llamar *ley* o *relación de dispersión*. De momento  $\beta$  es arbitraria; la vamos a fijar requiriendo que

$$H_{cl} = \int_{-\pi/u}^{+\pi/u} dk \hbar \Omega(k) \alpha^*(k, t) \alpha(k, t) + \text{constante} + O(1/N), \quad (7.5.6)$$

lo que es cierto si

$$\beta(k) = \sqrt{\frac{um\Omega(k)}{4\pi\hbar}}. \quad (7.5.7)$$

EJERCICIO: Comprobarlo.

*Indicación.* Utilizar las ecuaciones

$$\int_{-\pi/u}^{+\pi/u} dk e^{i(n-n')ku} = \frac{2\pi}{u} \delta_{nn'}, \quad (7.5.8)$$

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{in(k-k')u} = \frac{2\pi}{u} \delta_{\pi/u}(k-k'),$$

y la función  $\delta_{\pi/u}$  se define por  $\int_{-\pi/u}^{+\pi/u} dk' \delta_{\pi/u}(k-k')f(k') = f(k)$  •

Ahora ya tenemos resuelto el problema. La solución de (7.5.5a) es, obviamente,

$$\alpha(k, t) = e^{-i\Omega(k)t} \alpha_0(k), \quad (7.5.9a)$$

con lo que

$$H_{cl} = \int_{-\pi/u}^{+\pi/u} dk \hbar \Omega(k) |\alpha_0(k)|^2 + C : \quad (7.5.9b)$$

el sistema se comporta como una suma continua de osciladores independientes de “frecuencia”  $\Omega(k)$ .

### 7.5.3. Vibraciones de un cristal: caso cuántico.

#### Estructura en bandas de las energías

El caso cuántico es totalmente análogo al clásico. Definimos  $\hat{a}(k)$  (y su adjunto,  $\hat{a}^\dagger(k)$ ) por

$$\hat{a}(k) = \sqrt{\frac{m u \Omega(k)}{4\pi \hbar}} \sum_{n=-N}^{+N} e^{-in k u} \left\{ \hat{q}(n) + \frac{i}{m \Omega(k)} \hat{P}(n) \right\} \quad (7.5.10a)$$

junto con la ley de dispersión

$$\Omega^2(k) = \omega^2 + \frac{2\lambda}{m} (1 - \cos k u). \quad (7.5.10b)$$

La ecuación (7.5.10a) se puede invertir fácilmente; para, por ejemplo,  $\hat{q}(n)$ ,

$$\hat{q}(n) = \sqrt{\frac{u \hbar}{4\pi m}} \int_{-\pi/u}^{+\pi/u} \frac{dk}{\sqrt{\Omega(k)}} \left\{ e^{in k u} \hat{a}(k) + e^{-in k u} \hat{a}^\dagger(k) \right\}. \quad (7.5.11)$$

Las relaciones de conmutación de  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^\dagger$  son, en el límite  $N \rightarrow \infty$ ,

$$\begin{aligned} [\hat{a}(k), \hat{a}(k')] &= 0, \\ [\hat{a}(k), \hat{a}^\dagger(k')] &= \delta(k - k'). \end{aligned} \quad (7.5.12)$$

La expresión de  $\hat{H}$  en términos de creadores y aniquiladores es

$$\hat{H} = \int_{-\pi/u}^{+\pi/u} dk \hbar \Omega(k) \left\{ \hat{a}^\dagger(k) \hat{a}(k) + \frac{1}{2} \right\} + C,$$

o, escogiendo  $C$  para que cancele el término  $\int_{-\pi/u}^{+\pi/u} dk \hbar \Omega(k) \times \frac{1}{2}$ ,

$$\hat{H} = \int_{-\pi/u}^{+\pi/u} dk \hbar \Omega(k) \hat{a}^\dagger(k) \hat{a}(k). \quad (7.5.13)$$

En esta representación de  $\hat{H}$  los valores y estados propios se obtienen fácilmente. El estado fundamental,  $\psi_0$ , satisface

$$\hat{a}(k) \psi_0 = 0, \quad \text{para todo } k;$$

los estados y valores propios son los

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_{k_1, \dots, k_l} &= \hat{a}^\dagger(k_1) \dots \hat{a}^\dagger(k_l) \psi_0, \\ \hat{H} \bar{\psi}_{k_1, \dots, k_l} &= \hbar \{ \Omega(k_1) + \dots + \Omega(k_l) \} \bar{\psi}_{k_1, \dots, k_l} \end{aligned} \quad (7.5.14)$$

con los  $k_1, \dots, k_l$  distintos o no.

La extensión al caso tridimensional no presenta problemas. Para un cristal cúbico, esto es, con

$$\mathbf{R}(\mathbf{n}) = u\mathbf{n}, \quad n_j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N,$$

tenemos

$$\begin{aligned} \hat{a}_j(\mathbf{k}) &= \sqrt{\frac{mu^3 \Omega(k)}{2(2\pi)^3 \hbar}} \sum_{n_1, n_2, n_3} e^{-i\mathbf{n}\mathbf{k}u} \left\{ \hat{q}_j(\mathbf{n}) + \frac{i}{m\Omega(k)} \hat{P}_j(\mathbf{n}) \right\}, \\ \Omega^2(k) &= \omega^2 + \frac{2\lambda}{m} \sum_{j=1}^3 (1 - \cos k_j u). \end{aligned} \quad (7.5.15)$$

Las relaciones de conmutación son, en el límite  $N \rightarrow \infty$ ,

$$\begin{aligned} [\hat{a}_j(\mathbf{k}), \hat{a}_l(\mathbf{k}')] &= 0, \\ [\hat{a}_j(\mathbf{k}), \hat{a}_l^\dagger(\mathbf{k}')] &= \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{jl}. \end{aligned} \quad (7.5.16)$$

Finalmente,

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{\mathbf{n}, j} \left\{ \frac{1}{2m} \hat{P}_j(\mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{q}_j(\mathbf{n})^2 + \frac{\lambda}{2} \left[ \hat{q}_j(\mathbf{n} + \mathbf{i}) - \hat{q}_j(\mathbf{n}) \right]^2 \right\} \\ &= \sum_j \int_{-\pi/u}^{+\pi/u} dk_1 \int_{-\pi/u}^{+\pi/u} dk_2 \int_{-\pi/u}^{+\pi/u} dk_3 \hbar \Omega(k) \hat{a}_j^\dagger(\mathbf{k}) \hat{a}_j(\mathbf{k}); \end{aligned} \quad (7.5.17)$$

aquí,  $\mathbf{i}$  es un vector unitario a lo largo del eje  $i$ ,  $i = 1, 2, 3$ , y el término en  $\lambda$  en la primera expresión de  $\hat{H}$  tiene en cuenta la interacción con los primeros vecinos en las tres direcciones espaciales.

El estado  $\bar{\psi}_{k_1, \dots, k_l}$  tiene propiedades parecidas a las de un estado de  $l$  partículas libres, con energía  $\hbar\Omega(k_i)$  cada una. A estas "pseudopartículas" (o *cuasi-partículas*) se les llama *fonones*. Las energías de un cristal se ordenan en *bandas*; en el caso sencillo que hemos considerado, la primera banda la constituyen las energías  $\hbar\Omega(k)$ ,  $-\pi/u \leq k \leq \pi/u$  (un fonon excitado); la segunda, las  $\hbar\{\Omega(k_1) + \Omega(k_2)\}$ ,  $-\pi/u \leq k_{1,2} \leq \pi/u$  (dos fonones excitados), etc. Más detalles, aplicaciones y la generalización a cristales distintos de los cúbicos pueden verse en el texto de Kittel (1971).

### PROBLEMAS

P.7.1. Hallar las funciones de onda estacionarias y el espectro de energías del oscilador asimétrico,

$$V(x) = \nu x + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2.$$

*Solución.* Cambiando de variables  $x = y - \nu/m\omega^2$  la ecuación de Schrödinger se convierte en

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{\text{as}}(y)}{dy^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 \psi_{\text{as}}(y) = \left( E + \frac{\nu^2}{2m\omega^2} \right) \psi_{\text{as}}(y),$$

idéntica a la del oscilador armónico ordinario cambiando  $\psi(x)$  por  $\psi_{\text{as}}(y)$  y  $E$  por  $E - \nu^2/2m\omega^2$ . Por tanto,

$$E_{\text{as}, n} = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega - \nu^2/2m\omega^2; \quad \psi_{\text{as}, n}(y) = \psi_n(x + \nu/m\omega^2),$$

con  $\psi_n$  las de (7.2.5).

P.7.2. Resolver el oscilador anisótropo en tres dimensiones, con potencial

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{i,j=1}^3 v_{ij} r_i r_j.$$

*Solución.* Es claro que podemos suponer  $v_{ij} = v_{ji}$ . Además, para que  $V$  sea autoadjunto, las  $v_{ij}$  tienen que ser reales. Por tanto la matriz  $\underline{v} = (v_{ij})$  es hermitica y real, luego se la puede diagonalizar por medio de una matriz ortogonal,  $\underline{C} = (c_{ij})$ . Cambiemos de variables:

$$\rho_i = \sum_j c_{ij} r_j$$

Por ser  $\underline{C}$  ortogonal, el laplaciano no cambia:  $\Delta_r = \Delta_\rho$ . Si los valores propios de  $\underline{v}$  (que suponemos positivos) los denotamos por  $\frac{1}{2}m\omega_i^2$ ,  $i = 1, 2, 3$ , la ecuación de Schrödinger se nos convierte en

$$\sum_i \left( \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \rho_i^2} + \frac{1}{2}m\omega_i^2 \rho_i^2 \right) \psi(\boldsymbol{\rho}) = E\psi(\boldsymbol{\rho}),$$



aquí,  $\mathbf{i}$  es un vector unitario a lo largo del eje  $i$ ,  $i = 1, 2, 3$ , y el término en  $\lambda$  en la primera expresión de  $\hat{H}$  tiene en cuenta la interacción con los primeros vecinos en las tres direcciones espaciales.

El estado  $\bar{\psi}_{k_1, \dots, k_l}$  tiene propiedades parecidas a las de un estado de  $l$  partículas libres, con energía  $\hbar\Omega(k_i)$  cada una. A estas “pseudopartículas” (o *cuasi-partículas*) se les llama *fonones*. Las energías de un cristal se ordenan en *bandas*; en el caso sencillo que hemos considerado, la primera banda la constituyen las energías  $\hbar\Omega(k)$ ,  $-\pi/u \leq k \leq \pi/u$  (un fonon excitado); la segunda, las  $\hbar\{\Omega(k_1) + \Omega(k_2)\}$ ,  $-\pi/u \leq k_{1,2} \leq \pi/u$  (dos fonones excitados), etc. Más detalles, aplicaciones y la generalización a cristales distintos de los cúbicos pueden verse en el texto de Kittel (1971).

### PROBLEMAS

P.7.1. Hallar las funciones de onda estacionarias y el espectro de energías del oscilador asimétrico,

$$V(x) = \nu x + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2.$$

*Solución.* Cambiando de variables  $x = y - \nu/m\omega^2$  la ecuación de Schrödinger se convierte en

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{\text{as}}(y)}{dy^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 \psi_{\text{as}}(y) = \left( E + \frac{\nu^2}{2m\omega^2} \right) \psi_{\text{as}}(y),$$

idéntica a la del oscilador armónico ordinario cambiando  $\psi(x)$  por  $\psi_{\text{as}}(y)$  y  $E$  por  $E - \nu^2/2m\omega^2$ . Por tanto,

$$E_{\text{as}, n} = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega - \nu^2/2m\omega^2; \quad \psi_{\text{as}, n}(y) = \psi_n(x + \nu/m\omega^2),$$

con  $\psi_n$  las de (7.2.5).

P.7.2. Resolver el oscilador anisótropo en tres dimensiones, con potencial

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{i,j=1}^3 v_{ij} r_i r_j.$$

*Solución.* Es claro que podemos suponer  $v_{ij} = v_{ji}$ . Además, para que  $V$  sea autoadjunto, las  $v_{ij}$  tienen que ser reales. Por tanto la matriz  $v = (v_{ij})$  es hermitica y real, luego se la puede diagonalizar por medio de una matriz ortogonal,  $C = (c_{ij})$ . Cambiemos de variables:

$$\rho_i = \sum_j c_{ij} r_j.$$

Por ser  $C$  ortogonal, el laplaciano no cambia:  $\Delta_r = \Delta_\rho$ . Si los valores propios de  $v$  (que suponemos positivos) los denotamos por  $\frac{1}{2}m\omega_i^2$ ,  $i = 1, 2, 3$ , la ecuación de Schrödinger se nos convierte en

$$\sum_i \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \rho_i^2} + \frac{1}{2}m\omega_i^2 \rho_i^2 \right) \psi(\boldsymbol{\rho}) = E\psi(\boldsymbol{\rho}),$$

que se separa en tres osciladores armónicos unidimensionales ordinarios.

P.7.3. Comprobar que, para pequeño valor del número de ondas  $k$ , la relación entre energía y  $k$  para un fonón es como la de una partícula ordinaria con “masa” efectiva

$$m_{\text{ef}} = \hbar m \omega / 2 \lambda u^2.$$

## CAPÍTULO 8.

# Límites clásico y semiclásico: Teorema de Ehrenfest. Aproximación WKB

### 8.1. Teorema de Ehrenfest

Hemos mencionado repetidas veces que la mecánica clásica es el límite de la cuántica cuando  $\hbar$  es pequeño con respecto a las dimensiones del sistema; formalmente, cuando  $\hbar \rightarrow 0$ . Vamos ahora a estudiar esto en más detalle.

Comenzaremos por el *teorema de Ehrenfest* que nos dice, en términos generales, que los promedios cuánticos se comportan como las cantidades clásicas correspondientes. Concretamente, vamos a considerar el momento y la posición.

Clásicamente, las ecuaciones que obedecen  $\mathbf{r}_{\text{cl}}$  y  $\mathbf{p}_{\text{cl}}$  son las de Newton; denotando con un punto a la derivación con respecto al tiempo,

$$\dot{\mathbf{r}}_{\text{cl}} = \frac{1}{m} \mathbf{p}_{\text{cl}}, \quad \dot{\mathbf{p}}_{\text{cl}} = \mathbf{F}_{\text{cl}} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{\text{cl}}} V(\mathbf{r}_{\text{cl}}),$$

con  $\mathbf{F}_{\text{cl}}$  la fuerza y  $V$  el potencial. Cuánticamente, en cualquier estado  $\Psi$ ,

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{Q}_j \rangle_{\Psi} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{Q}_j] \rangle_{\Psi}.$$

Pero  $\hat{H} = \hat{\mathbf{P}}^2/2m + V(\mathbf{r})$  luego

$$[\hat{H}, \hat{Q}_j] = \frac{1}{2m} [\hat{\mathbf{P}}^2, \hat{Q}_j] = \frac{-i\hbar}{m} \hat{P}_j,$$

esto es,

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{Q}_j \rangle_{\Psi} = \frac{1}{m} \langle \hat{P}_j \rangle_{\Psi}. \quad (8.1.1)$$

Análogamente,

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{P}_j \rangle_{\Psi} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{P}_j] \rangle_{\Psi};$$

como  $[\hat{H}, \hat{P}_j] = i\hbar \partial V / \partial r_j$ , tenemos

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{P}_j \rangle_{\Psi} = - \left\langle \frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial r_j} \right\rangle_{\Psi}. \quad (8.1.2)$$

Nótese, sin embargo, una importante diferencia con el caso clásico: no es cierto en general que  $\langle V(\mathbf{r}) \rangle$  sea lo mismo que  $V(\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle)$ : el valor medio de  $V$  en  $\mathbf{r}$  no es lo mismo que el valor de  $V$  en el  $\mathbf{r}$  promedio. Para ver el límite clásico con más claridad tenemos que restringirnos a funciones de onda apropiadas, lo que vamos a ver en detalle para el oscilador armónico.

## 8.2. Límite clásico del oscilador armónico. Estados coherentes

Buscamos estados  $\Psi(x, t)$  tales que se tenga

$$\langle \hat{P} \rangle_{\Psi} \underset{\hbar \rightarrow 0}{\simeq} p_{\text{cl}}(t), \quad \langle \hat{Q} \rangle_{\Psi} \underset{\hbar \rightarrow 0}{\simeq} x_{\text{cl}}(t), \quad \langle \hat{H} \rangle_{\Psi} \underset{\hbar \rightarrow 0}{\simeq} E_{\text{cl}}. \quad (8.2.1)$$

Trabajamos en una dimensión y está claro que los estados estacionarios que encontramos en el capítulo 7 no nos valen ya que en ellos los valores esperados de momento y posición son independientes del tiempo. Utilizaremos, en vez de  $x_{\text{cl}}$  y  $p_{\text{cl}}$  las variables  $\alpha(t) = \alpha_0 e^{-i\omega t}$  y  $\alpha^*$  definidas en la sección 7.1, y también haremos los cálculos para los operadores  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^\dagger$  en lugar de utilizar los  $\hat{P}$ ,  $\hat{Q}$ .

Debido al teorema de Ehrenfest no tenemos que comprobar que (8.2.1) vale para todo instante de tiempo,  $t$ ; basta que se cumpla en un instante inicial, que tomamos convenientemente como  $t = 0$ . Escribiendo  $\Psi(x, t = 0) \equiv \psi(x)$  tenemos pues que verificar

$$\langle \hat{a} \rangle_{\psi} \underset{\hbar \rightarrow 0}{\simeq} \alpha_0, \quad \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi} \underset{\hbar \rightarrow 0}{\simeq} \alpha_0^*, \quad \left\langle \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right\rangle_{\psi} \underset{\hbar \rightarrow 0}{\simeq} |\alpha_0|^2. \quad (8.2.2)$$

En realidad, no necesitamos preocuparnos de la segunda ecuación, ya que es consecuencia de la primera: si  $\langle \hat{a} \rangle_{\psi} \simeq \alpha_0$  entonces

$$\alpha_0^* \simeq \langle \hat{a} \rangle_{\psi}^* = \langle \psi | \hat{a} \psi \rangle = \langle \hat{a}^\dagger \rangle_{\psi}.$$

Consideremos el operador  $\hat{b} = \hat{a} - \alpha_0$ . De (8.2.2) resulta inmediatamente que  $\langle \hat{b} \psi | \hat{b} \psi \rangle \simeq 0$ . Esto sugiere especificar  $\psi$  que, en principio, está únicamente determinado salvo correcciones de orden relativo  $\hbar$ , requiriendo igualdad, esto es, que  $\hat{b} \psi = 0$ . Podemos denotar a este  $\psi$  por  $\psi_{\alpha_0}$ , estado que está por tanto definido por

$$\hat{a} \psi_{\alpha_0} = \alpha_0 \psi_{\alpha_0}. \quad (8.2.3)$$

Desarrollando  $\psi_{\alpha_0}$  en las  $\psi_n$  de (7.3.6),

$$\psi_{\alpha_0} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0.$$

Sustituyendo esta expresión en (8.2.3), utilizando las relaciones de conmutación de creadores y aniquiladores, y la propiedad  $\hat{a} \psi_0 = 0$ , obtenemos la condición

$$\begin{aligned} \hat{a} \psi_{\alpha_0} &= \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) \frac{c_{n+1}}{\sqrt{n+1}} (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0 \\ &= \alpha_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0. \end{aligned}$$

Por tanto,  $c_{n+1} = \alpha_0 c_n / \sqrt{n+1}$ , relación de recurrencia cuya solución es  $c_n = \alpha_0^n c_0 / \sqrt{n!}$ . Podemos calcular  $c_0$  pidiendo que  $\|\psi_{\alpha_0}\|^2 = 1$ :

$$1 = \|\psi_{\alpha_0}\|^2 = \sum c_n^2 = |c_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha_0|^{2n}}{n!} = |c_0|^2 e^{|\alpha_0|^2}.$$

Tomando  $c_0$  real hemos obtenido por tanto,

$$\psi_{\alpha_0} = e^{-\frac{1}{2}|\alpha_0|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha_0^n}{n!} \psi_0 = e^{-\frac{1}{2}|\alpha_0|^2 + \alpha_0 \hat{a}} \psi_0 \quad (8.2.4a)$$

que también se puede escribir en términos de  $E_{cl}$  como

$$\psi_{\alpha_0} = e^{-E_{cl}/2\hbar\omega} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(E_{cl}/\hbar\omega)^{n/2}}{n!} \frac{\alpha_0^n}{n!} \psi_0. \quad (8.2.4b)$$

A estos  $\psi_{\alpha_0}$  se les llama *estados coherentes*.

Las dos primeras ecuaciones en (8.2.2) se satisfacen; de hecho, tenemos igualdad estricta,

$$\langle \hat{a} \rangle_{\psi_{\alpha_0}} = \alpha_0.$$

Veamos la tercera: después de un cálculo sencillo encontramos

$$\left\langle \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right\rangle_{\psi_{\alpha_0}} = |\alpha_0|^2 \left\{ 1 + \frac{\hbar\omega}{2E_{cl}} \right\},$$

que, efectivamente, es igual a  $|\alpha_0|^2$  salvo una corrección de orden  $\hbar$ .

EJERCICIO: 1. Demostrar que  $(\Delta E)_{\psi_{\alpha_0}}/E_{cl} \simeq \sqrt{\hbar\omega/E_{cl}}$  •

Consideremos ahora el valor esperado de  $\hat{a}$  en un instante de tiempo arbitrario,  $\langle \hat{a} \rangle_t \equiv \langle \hat{a} \rangle_{\psi_0}(t)$ . Tenemos

$$\frac{d\langle \hat{a} \rangle_t}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{a}] \rangle_t = -i\omega \langle \hat{a} \rangle_{\psi_0}$$

y hemos utilizado que  $[\hat{H}, \hat{a}] = -\hbar\omega \hat{a}$ . Por tanto, integrando esto,

$$\langle \hat{a} \rangle_t = e^{-i\omega t} \langle \hat{a} \rangle_{t=0} = \alpha_0 e^{-i\omega t}$$

que, como era de esperar, es el valor clásico para todo  $t$ .

Calculemos la proyección de  $\psi_{\alpha_0}$  sobre otro estado coherente,  $\psi_{\beta_0}$ :

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\alpha_0} | \psi_{\beta_0} \rangle &= e^{-(|\alpha_0|^2 + |\beta_0|^2)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha_0^* \beta_0)^n}{n!} \\ &= \exp \left\{ -\frac{|\alpha_0|^2 + |\beta_0|^2 - 2\alpha_0^* \beta_0}{2} \right\}. \end{aligned} \quad (8.2.5)$$

Los estados  $\psi_{\alpha_0}$  y  $\psi_{\beta_0}$  no son ortogonales. Esto no es sorprendente ya que son autoestados del operador  $\hat{a}$  que no es autoadjunto (ni normal<sup>1</sup>). Sin embargo, en el límite clásico,  $\hbar \rightarrow 0$ , el solape tiende a cero. En efecto, de (8.2.5),

$$|\langle \psi_{\alpha_0} | \psi_{\beta_0} \rangle|^2 \leq e^{-|E'_{cl}{}^{1/2} - E'_{cl}{}^{1/2}|^2 / \hbar \omega} \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} 0,$$

y hemos denotado por  $E'_{cl}$  a la energía correspondiente a  $\beta_0$ ,  $E'_{cl} = \hbar \omega |\beta_0|^2$ .

La forma analítica de  $\psi_{\alpha_0}$  es fácil de encontrar. La ecuación  $\hat{a}\psi_{\alpha_0} = \alpha_0\psi_{\alpha_0}$  puede escribirse como

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \psi'_{\alpha_0}(x) + x \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \psi_{\alpha_0}(x) = \alpha_0 \psi_{\alpha_0},$$

con solución

$$\psi_{\alpha_0}(x) = C \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + x\alpha_0 \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \right\}. \quad (8.2.6)$$

### 8.3. La aproximación WKB

Aunque la mecánica cuántica es el límite de la clásica para  $\hbar \rightarrow 0$ , este límite no es analítico. En efecto, recordamos que en la sec. 4.1 argüíamos que las funciones de onda tienen un comportamiento

$$\Psi \underset{\hbar \rightarrow 0}{\sim} e^{iA_{cl}/\hbar}.$$

Lo que esperamos poder desarrollar, sin embargo, es el coeficiente de  $1/\hbar$  en el logaritmo de  $\Psi$ . Este es el método WKB.<sup>2</sup>

Según esto, escribimos (considerando el caso estacionario para fijar ideas)

$$\psi = e^{i\sigma/\hbar}, \quad (8.3.1a)$$

y vamos a desarrollar  $\sigma$  en potencias de  $\hbar$ :

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i} \sigma_1 + \left( \frac{\hbar}{i} \right)^2 \sigma_2 + \dots; \quad (8.3.1b)$$

la  $i$  se introduce por conveniencia futura. Esperamos que  $\sigma_0$  esté relacionado con la acción clásica y veremos que, en efecto, es así.

<sup>1</sup> Se dice que un operador es *normal* si conmuta con su adjunto. Puede demostrarse que los vectores propios de operadores normales, correspondientes a valores propios distintos, son ortogonales.

<sup>2</sup> WKB son las iniciales de Wentzel, Kramers y Brillouin. Otras permutaciones de las letras WKB se pueden encontrar en la literatura. El nombre “método de Jeffreys” también aparece en algunos textos.

Sustituyendo (8.3.1) en la ecuación de Schrödinger e igualando orden por orden las potencias de  $\hbar$  podemos encontrar las  $\sigma_n$ . En una dimensión, y para una sola partícula, la ecuación de Schrödinger se nos convierte en

$$\frac{1}{2m} \sigma'(x)^2 - \frac{i\hbar}{2m} \sigma''(x) = E - V(x). \quad (8.3.1c)$$

Al orden más bajo esto da

$$\frac{\sigma'_0(x)^2}{2m} = E - V(x)$$

luego, para  $E > V(x)$ ,

$$\sigma_0(x) = \pm \int^x dy \sqrt{2m(E - V(y))}. \quad (8.3.2)$$

Por tanto, a este orden, la solución más general es

$$\psi^{(0)}(x) = A_+ e^{\frac{i}{\hbar} \int^x dy p_{cl}(y)} + A_- e^{-\frac{i}{\hbar} \int^x dy p_{cl}(y)}, \quad E > V(x), \quad (8.3.3)$$

y hemos identificado  $p_{cl}(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$  con el momento clásico.

Este resultado era de esperar. La función de onda completa será, escogiendo por ejemplo la solución con  $A_- = 0$ , que corresponde a partículas moviéndose en el sentido de las  $x$  positivas, y escribiendo directamente la función de onda con dependencia temporal incluida,  $\Psi^{(0)}(x, t)$ ,

$$\Psi^{(0)}(x, t) = A e^{-iEt/\hbar} \exp \frac{i}{\hbar} \int^x dy p_{cl}(y).$$

Si cambiamos variables en la segunda integral,

$$\int^x dy p_{cl}(y) = \int^t dt' \dot{x}_{cl}(t') p_{cl}(t'), \quad x = x_{cl}(t)$$

podemos escribir, absorbiendo el límite inferior de la integral en la constante arbitraria,

$$\Psi^{(0)}(x, t) = C \exp \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \{ \dot{x}_{cl}(t') p_{cl}(t') - E \}.$$

Por otra parte, al orden que estamos trabajando,  $E$  coincide con  $E_{cl}$ ,

$$E_{cl} = \frac{1}{2} \dot{x}_{cl} p_{cl} + V_{cl}.$$

Como el lagrangiano clásico, calculado sobre la trayectoria clásica, es  $L_{cl} = \frac{1}{2} \dot{x}_{cl} p_{cl} - V_{cl}$ , resulta que hemos obtenido

$$\Psi^{(0)}(x, t) = C \exp \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' L_{cl} = C e^{iA/\hbar}, \quad (8.3.4)$$

con lo que, en particular, la discusión de la sec. 4.1 queda completamente justificada. Esta última expresión (8.3.4) es válida en general (y no sólo para una dimensión).

Pasemos ahora al caso  $E < V(x)$ . Podemos definir

$$\bar{p}(x) = \sqrt{2m(V(x) - E)},$$

y entonces la solución general es

$$\bar{\psi}^{(0)}(x) = \bar{A}_+ e^{\frac{1}{\hbar} \int dy \bar{p}(y)} + \bar{A}_- e^{-\frac{1}{\hbar} \int dy \bar{p}(y)}, \quad E < V(x). \quad (8.3.5)$$

Podemos obtener esta solución, así como el análogo de (8.3.4) directamente (como lo hemos hecho aquí) o con el siguiente truco: hacemos continuación analítica en la variable tiempo, de manera que

$$t \rightarrow it. \quad (8.3.6)$$

Denotando por una barra las cantidades obtenidas con la sustitución (8.3.6) tenemos, en el caso  $E < V$ ,

$$\bar{\Psi}^{(0)}(x, t) = \bar{A}_+ e^{\frac{1}{\hbar} \bar{A}_{cl}} + \bar{A}_- e^{-\frac{1}{\hbar} \bar{A}_{cl}} \quad (8.3.7a)$$

con

$$\bar{A}_{cl} \int dt' \bar{L}_{cl}, \quad \bar{L}_{cl} \equiv -\frac{m\dot{x}_{cl}^2}{2} - V. \quad (8.3.7b)$$

Pasemos al orden siguiente,  $O(\hbar)$  en (8.3.1). Obtenemos de nuevo el valor de  $\sigma_0$  ya conocido y, además, encontramos la ecuación

$$\sigma_1' \sigma_0' + \frac{\sigma_0''}{2} = 0,$$

luego

$$\sigma_1(x) = -\frac{1}{2} \log p_{cl}(x) + \text{constante}. \quad (8.3.8)$$

Por tanto, a este orden,

$$\psi^{(1)}(x) = \frac{A_+}{\sqrt{p_{cl}(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int^x dy p_{cl}(y)} + \frac{A_-}{\sqrt{p_{cl}(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int^x dy p_{cl}(y)}; \quad E > V(x) \quad (8.3.9)$$

y

$$\bar{\psi}^{(1)}(x) = \frac{\bar{A}_+}{\sqrt{\bar{p}(x)}} e^{\frac{1}{\hbar} \int^x dy \bar{p}(y)} + \frac{\bar{A}_-}{\sqrt{\bar{p}(x)}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int^x dy \bar{p}(y)}; \quad E < V(x). \quad (8.3.10)$$

El empalme entre las dos regiones,  $E > V(x)$  y  $E < V(x)$  es complicado y nosotros no lo veremos aquí,<sup>3</sup> a pesar de que son precisamente las condiciones de

<sup>3</sup> El lector interesado puede consultar el texto de Galindo y Pascual (1978) o el de Landau y Lifshitz (1967), que contiene también muchas aplicaciones del método WKB.



empalme las que permiten encontrar el espectro de energías en la aproximación WKB.

¿Cuándo será una buena aproximación el método WKB? Al menos cuando  $|\hbar\sigma_1| \ll |\sigma_0|$ , esto es, cuando

$$\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1, \quad \lambda = \hbar/p_{cl} : \quad (8.3.11)$$

la aproximación es buena cuando la longitud de onda de de Broglie es lentamente variable de un punto a otro.

Por supuesto, la condición (8.3.11) no se satisface en los puntos en los que se tiene  $E = V$ , donde  $p_{cl} = 0$  y  $\lambda = \infty$ . Éstos son precisamente los puntos de empalme, que corresponden a puntos de retroceso en la trayectoria clásica. Sin embargo, la aproximación WKB es excelente para calcular, por ejemplo, coeficientes de reflexión/transmisión incluso cuando (8.3.11) falla. La razón la veremos en la sec. 10.4, cuando demos otra interpretación de la aproximación WKB.

#### 8.4. Efecto túnel en la aproximación WKB

Vamos ahora a calcular el coeficiente de transmisión, al orden más bajo en la aproximación WKB, para tres barreras representativas (fig. 8.4.1). En los tres casos suponemos que la partícula viene de la izquierda y despreciamos la reflexión múltiple. Escogiendo el origen de coordenadas de forma que  $V(0) = E$ , tenemos

$$\bar{\psi}_{\text{WKB}}(x) = C \exp \frac{-1}{\hbar} \int_0^x dy \bar{p}(y). \quad (8.4.1)$$

El coeficiente de transmisión será<sup>4</sup>

$$D = \frac{|\bar{\psi}_{\text{WKB}}(L)|^2}{|\bar{\psi}_{\text{WKB}}(0)|^2} = \exp \frac{-2}{\hbar} \int_0^L dx \bar{p}(y). \quad (8.4.2)$$

En el caso A (barrera cuadrada),  $V - E = a$ , y entonces

$$\bar{p}_A(x) = \sqrt{2ma}.$$

En el caso B (diente de sierra),  $V(x) - E = ax/L$ , luego

$$\bar{p}_B(x) = \sqrt{\frac{2max}{L}}.$$

<sup>4</sup> Intuitivamente, esto es obvio;  $D$  es el cociente entre la probabilidad de encontrar la partícula en  $0 + \epsilon$  (a la entrada en la barrera) y en  $L - \epsilon$  (a la salida de la barrera), para  $\epsilon \rightarrow 0$ . Una demostración más completa requiere discutir las condiciones de empalme; ver Galindo y Pascual (1978).

En el caso C (barrera parabólica),  $V(x) - E = 4ax(L - x)/L^2$  y tenemos

$$\bar{p}_C(x) = \frac{2}{L} \sqrt{2max(L - x)}.$$

Los coeficientes de transmisión son, por tanto,

$$\begin{aligned} D_A^{\text{WKB}} &= \exp \left\{ -\frac{2\sqrt{2ma}}{\hbar} L \right\}, \\ D_B^{\text{WKB}} &= \exp \left\{ -\frac{2}{3} \frac{2\sqrt{2ma}}{\hbar} L \right\}, \\ D_C^{\text{WKB}} &= \exp \left\{ -\frac{\pi}{4} \frac{2\sqrt{2ma}}{\hbar} L \right\}. \end{aligned} \quad (8.4.3)$$

Podemos comparar el primero con el cálculo exacto, ecuación (6.8.12). La primera de estas ecuaciones, con la notación de la figura 8.4.1 nos da

$$D_A^{\text{exacto}} = \frac{16Ea}{(E+a)^2} \left( 1 + O(e^{-2\sqrt{2ma}L/\hbar}) \right) \exp \left\{ -\frac{2\sqrt{2ma}}{\hbar} L \right\}.$$

El término  $O(e^{-2\sqrt{2ma}L/\hbar})$  se debe a reflexiones múltiples, que tampoco tuvimos en cuenta en el cálculo WKB. El término exponencial,

$$\exp \left\{ -\frac{2\sqrt{2ma}}{\hbar} L \right\}$$

es idéntico en el cálculo exacto y en el WKB. Como veremos, esto es una propiedad general.

## 8.5. Operadores en el límite clásico

Vamos ahora a tratar brevemente el límite clásico de operadores. Cuando  $\hbar \rightarrow 0$  podemos utilizar como función de onda la WKB, (8.3.4):

$$\Psi \simeq \Psi_{\text{WKB}} = C \exp \frac{i}{\hbar} \{ \mathcal{A}_{\text{cl}}(x_{\text{cl}}(t), x_0) + O(\hbar) \}$$

(por sencillez trabajamos en una dimensión). Por tanto, y a orden relativo  $\hbar$ ,

$$\begin{aligned} \hat{Q}\Psi(x, t) &\simeq x_{\text{cl}}(t)\Psi(x, t), \\ \hat{P}\Psi(x, t) &= \frac{-i\hbar\partial\Psi(x, t)}{\partial x} \simeq \frac{\partial\mathcal{A}_{\text{cl}}(x, x_0)}{\partial x} \Psi(x, t) = p_{\text{cl}}(t)\Psi(x, t) \end{aligned} \quad (8.5.2)$$

y en la segunda expresión hemos utilizado que

$$\mathcal{A}_{\text{cl}} = -E_{\text{cl}}t + \int^x dy p_{\text{cl}}(y), \quad x = x_{\text{cl}}(t)$$

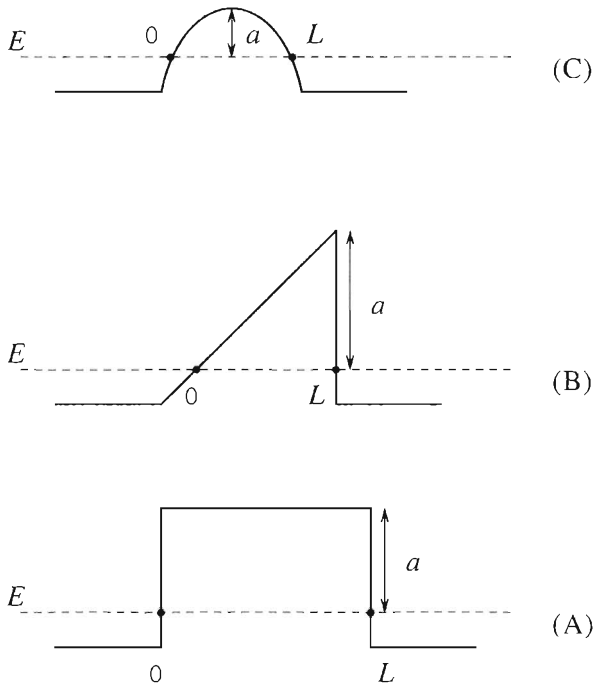


FIGURA 8.4.1. (A) Barrera cuadrada. (B) Diente de sierra.  
(C) Barrera parabólica.

(cf. sec. 8.3).

Según un teorema de von Neumann, cualquier operador autoadjunto  $\hat{F}$  puede escribirse como función de  $\hat{Q}$ ,  $\hat{P}$ :

$$\hat{F} = F(\hat{Q}, \hat{P}).$$

Despreciando términos de orden  $\hbar$ , puede tomarse que  $\hat{Q}$  y  $\hat{P}$  conmutan. Por tanto, tenemos, para cualquier  $\hat{F}$ ,

$$\hat{F}\Psi = F(x_{cl}, p_{cl})\Psi.$$

En definitiva, y como ya habíamos indicado, en el límite clásico los operadores actúan simplemente multiplicando la función de onda por la cantidad clásica correspondiente, lo que podemos escribir como

$$\hat{F}\Psi = F(x_{cl}, p_{cl})\Psi + O(\hbar). \quad (8.5.3)$$

## 8.6. Desintegración alfa en la aproximación de Gamow

Algunos núcleos atómicos sufren lo que se llama *desintegración  $\alpha$* , en la que el núcleo inicial ( $\mathcal{N}$ ) emite una partícula alfa<sup>5</sup> pasando a convertirse en un nuevo núcleo,  $\mathcal{N}'$ :

$$\mathcal{N} \rightarrow \mathcal{N}' + \alpha.$$

Las vidas medias para este tipo de procesos varían enormemente, desde menos de un segundo hasta billones de años. La explicación de estos procesos, uno de los primeros triunfos de la mecánica cuántica aplicada a núcleos, se debe a Gamow. En su modelo se supone que la partícula  $\alpha$  preexiste en el núcleo y que está sujeta a un potencial cuyas características describimos a continuación. En la región del interior del núcleo,

$$0 \leq r \leq L,$$

con  $r$  la coordenada radial (suponemos el núcleo con simetría esférica), consideramos que las fuerzas nucleares y las coulombianas, debidas al resto del núcleo, producen un potencial que, en promedio, podemos tomar plano. En la región de la frontera del núcleo,

$$L \leq r \leq R$$

las fuerzas nucleares, que son de corto alcance, pueden despreciarse, y nos queda únicamente la repulsión coulombiana, que produce un potencial  $2Z'e^2/r$ . Aquí,  $Z'e$  es la carga del núcleo  $\mathcal{N}$  menos dos unidades de la partícula alfa (igual a la carga del núcleo  $\mathcal{N}'$ ) y  $2e$  la carga de la partícula alfa;  $e$  es la carga del protón.

El potencial, por tanto, es como el de la fig. 8.6.1, donde hemos puesto una barrera infinita en  $r = 0$  para obligar a que el radio vector,  $r$ , sea positivo.

Denotamos por  $E$  a la energía de la partícula  $\alpha$  (la línea de puntos en la figura 8.6.1); la barrera de potencial le impediría salir del núcleo, en mecánica clásica. Pero, en mecánica cuántica, puede atravesarla por el efecto túnel. En una primera aproximación podemos calcular como si el núcleo fuese estable, y aproximar el potencial en la región I por un pozo infinito de manera que

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2L^2 m_\alpha}, \quad k = \frac{\pi}{L}. \quad (8.6.1a)$$

<sup>5</sup> Las partículas  $\alpha$  son, de hecho, núcleos de helio.

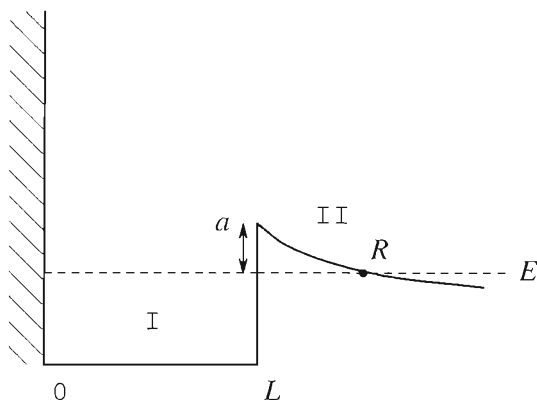


FIGURA 8.6.1. Potencial para una partícula alfa en un núcleo, en el modelo de Gamow

La función de onda en la región I es pues

$$\psi_I(r) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin kr = \frac{1}{2i} \sqrt{\frac{2}{L}} \{e^{ikr} - e^{-ikr}\}. \quad (8.6.1b)$$

El número de veces por unidad de tiempo que la partículas alfa llega a la barrera (el punto  $L$ ) es la corriente  $j_+$ , calculada sólo con el trozo en  $e^{ikr}$  en (8.6.1b); tenemos,

$$j_+ = \frac{1}{4} \frac{p}{m_\alpha} \frac{2}{L} = \frac{\hbar\pi}{2m_\alpha L^2}. \quad (8.6.2)$$

Hay ahora que tener en cuenta la *probabilidad* de que la partícula atraviese la barrera por el efecto túnel. Ésta es, a primer orden en la aproximación WKB,

$$D = \exp \left\{ -2 \int_L^R dr \sqrt{2m(E - 2Z'e^2/r)} \right\}. \quad (8.6.3a)$$

El valor de  $R$  se determina porque es la solución de  $E = V(R)$ , esto es,

$$R = \frac{4Z'e^2 L^2 m_\alpha^2}{\hbar^2 \pi^2}. \quad (8.6.3b)$$

La probabilidad por unidad de tiempo de que la partícula alfa atraviese la barrera y se escape del núcleo es el producto  $j_+ D$ ; la vida media del núcleo,  $\tau$ , será pues el inverso de esta cantidad:

$$\tau = \frac{1}{j_+ D}, \quad (8.6.3c)$$

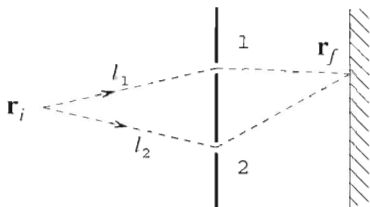
con  $j_+$ ,  $D$  dados por (8.6.2a,b). La cantidad  $\tau$  depende exponencialmente de los parámetros nucleares  $Z'$ ,  $L$ ; esto explica la gran variación de vidas medias para distintos núcleos.

### PROBLEMAS

P.8.1. Calcular la vida media frente a desintegración alfa de un núcleo con  $L = 6$  fm,  $Z' = 79$ ,  $a = 2$  MeV,  $E = 23$  MeV.

P.8.2. Calcular el proceso inverso de la desintegración alfa, esto es, la probabilidad de que una partícula alfa con energía  $E_\alpha$  penetre en el interior de un núcleo (*fusión nuclear*).

P.8.3. Considérese un dispositivo como el de las rendijas de Young; ver la figura adjunta. Calcular, en la aproximación WKB al orden más bajo, la función de onda en  $\mathbf{r}_f$ ; el foco, rendijas y  $\mathbf{r}_f$  están en el plano del papel.



*Solución.* Tenemos  $\psi(\mathbf{r}_f) = \psi_1(\mathbf{r}_f) + \psi_2(\mathbf{r}_f)$ , donde  $\psi_a$  es la función de onda con sólo la rendija  $a$  abierta,  $a = 1, 2$ . Las trayectorias clásicas son las  $\ell_a$ . Entonces,

$$\psi_a(\mathbf{r}_f) = C \exp \frac{i}{\hbar} \int_{\ell_a} d\ell \mathbf{p}_{cl} = C \left\{ \int_{\mathbf{r}_i}^{\mathbf{r}_a} + \int_{\mathbf{r}_a}^{\mathbf{r}_f} d\ell \mathbf{p}_{cl} \right\}.$$

De  $\mathbf{r}_i$  a  $\mathbf{r}_a$ ,  $\mathbf{p}_{cl} = p(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_i)/|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_i|$ ; y de  $\mathbf{r}_a$  a  $\mathbf{r}_f$ ,  $\mathbf{p}_{cl} = p(\mathbf{r}_f - \mathbf{r}_a)/|\mathbf{r}_f - \mathbf{r}_a|$ . Por tanto,

$$\begin{aligned} \psi_a(\mathbf{r}_f) &= C \exp \frac{i}{\hbar} (|\mathbf{r}_f - \mathbf{r}_a| + |\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_i|) \\ &= \bar{C} \exp \frac{ip}{2\hbar} \left[ \sqrt{L^2 + d^2} + \sqrt{L^2 + (x \pm d)^2} \right] \end{aligned}$$

con  $x$  la coordenada vertical de  $\mathbf{r}_f$  (contada a partir del punto medio),  $L$  la distancia del foco al plano de las rendijas, supuesta igual a la distancia de éste al detector, y  $d$  es la separación entre las rendijas; los signos  $(\pm)$ , según  $a = 1, 2$ . Para  $d, |x| \ll L$ ,

$$\psi = (\text{Const.}) e^{ip(x^2+d^2)/2\hbar L} \cos \frac{pdx}{\hbar L}.$$

## CAPÍTULO 9.

# Formulación general de la mecánica cuántica. Imágenes de Schrödinger, Heisenberg y Dirac. Matriz densidad

### 9.1. Postulados de la mecánica cuántica en el formalismo de Dirac

En la sección 3.5 vimos que es posible describir el estado de un sistema por una función de onda en espacio de posición o de momentos. En esta sección nos vamos a liberar de representaciones concretas y vamos a dar una formulación general de la mecánica cuántica (propuesta por primera vez por Dirac); lo que, de paso, nos va a servir para recapitular sus postulados. En la siguiente sección conectaremos con el formalismo de las funciones de onda.

#### Postulados de la mecánica cuántica

*M.C. 1.* Los estados de un sistema cuántico vienen representados por los vectores,<sup>1</sup> que denotaremos por  $|\Psi\rangle$ ,  $|\Phi\rangle$ , ... de un espacio de Hilbert,  $\mathfrak{H}$ . Los vectores  $|\Psi\rangle$ ,  $\lambda|\Psi\rangle$  representan el mismo estado, aunque la constante relativa entre dos estados *distintos* es medible físicamente.

*M.C. 2.* Si  $|\Psi\rangle$ ,  $|\Phi\rangle$  son estados posibles de un sistema, también la combinación  $\alpha|\Psi\rangle + \beta|\Phi\rangle$  lo es, para cualquier par de números complejos  $\alpha$ ,  $\beta$  (*principio de superposición*).

*M.C. 3.* Si un sistema está en el estado  $|\Psi\rangle$ , la amplitud de probabilidad de encontrarlo en el estado  $|\Phi\rangle$  es  $\langle\Phi|\Psi\rangle$ ; la probabilidad es  $W(\Phi, \Psi) = |\langle\Phi|\Psi\rangle|^2$ ; suponemos  $|\Psi\rangle$ ,  $|\Phi\rangle$  normalizados a la unidad,  $\langle\Psi|\Psi\rangle = \langle\Phi|\Phi\rangle = 1$ . De lo contrario,

$$W(\Phi, \Psi) = \frac{|\langle\Phi|\Psi\rangle|^2}{\langle\Psi|\Psi\rangle \langle\Phi|\Phi\rangle}.$$

*M.C. 4.* A cada cantidad físicamente medible le corresponde un operador autoadjunto,  $\hat{F}$ . El valor medio (o esperado) de  $\hat{F}$  en el estado  $|\Psi\rangle$  es

$$\langle F \rangle_\Psi = \frac{\langle\Psi|\hat{F}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}.$$

---

<sup>1</sup> A los vectores  $|\ \rangle$  se les llama en inglés *vectores ket* y a los  $\langle \ |$  *vectores bra*.

Nótese que, en la notación que habíamos utilizado hasta ahora,  $\langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle$  lo escribíamos  $\langle \Psi | \hat{F} \Psi \rangle$ . Utilizaremos ambas notaciones indistintamente.

*M.C. 5.* Las transformaciones de simetría de un sistema cuántico vienen representadas por operadores unitarios.<sup>2</sup>

Aunque no es un postulado, ya que puede demostrarse matemáticamente a partir de los postulados dados, citamos aquí una propiedad básica de la mecánica cuántica: el conjunto de los vectores propios de un operador observable forma un conjunto completo en  $\mathfrak{H}$ . Esto es, si

$$\hat{F}|\Psi_n\rangle = f_n|\Psi_n\rangle,$$

y escogemos las  $|\Psi_n\rangle$  de forma que  $\langle \Psi_n | \Psi_{n'} \rangle = \delta_{nn'}$ , se tiene la *relación de cierre*

$$\sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n| = 1.$$

El operador  $|\Psi\rangle \langle \Psi|$  se define de la forma “natural,”

$$|\Psi\rangle \langle \Psi| : |\Phi\rangle = |\Psi\rangle \langle \Psi | \Phi \rangle = \{ \langle \Psi | \Phi \rangle \} |\Psi\rangle.$$

Para espectro continuo, reemplazar sumas por integrales y delta de Kronecker por delta de Dirac.

Finalmente, escribimos la ecuación de Schrödinger en este formalismo como

$$i\hbar \partial_t |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle.$$

## 9.2. Conexión con el formalismo de funciones de onda

Consideremos el operador posición,  $\hat{Q}$ , y sean  $|\mathbf{r}\rangle$  sus estados propios:

$$\hat{Q}_j |\mathbf{r}\rangle = r_j |\mathbf{r}\rangle. \quad (9.2.1)$$

Análogamente, para el operador momento  $\hat{P}$  tenemos los vectores  $|\mathbf{p}\rangle$  con

$$\hat{P}_j |\mathbf{p}\rangle = p_j |\mathbf{p}\rangle. \quad (9.2.2)$$

Sea  $|\Psi\rangle$  un estado arbitrario. Según M.C.3, la cantidad  $\langle \mathbf{r} | \Psi \rangle$  es la amplitud de probabilidad de encontrar el sistema con vector de estado  $|\Psi\rangle$  en el vector estado  $|\mathbf{r}\rangle$ , esto es, con un valor  $\mathbf{r}$  de la posición. Por tanto, debemos identificar esta amplitud con la función de onda en el espacio de posición:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \Psi \rangle. \quad (9.2.3)$$

En espacio de momentos,

$$\Psi(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | \Psi \rangle. \quad (9.2.4)$$

<sup>2</sup> Una excepción es la inversión temporal, que estudiaremos en la sec. 15.2, representada por un operador *antiunitario*.



Consideremos ahora la cantidad  $\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle$ : será la función de onda de una partícula con momento  $\mathbf{p}$ , esto es, una onda plana:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = C e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}.$$

Para encontrar  $C$ , vamos a normalizar los  $|\mathbf{r}\rangle$ ,  $|\mathbf{p}\rangle$  a deltas,

$$\langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \quad \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (9.2.5a)$$

y, por tanto, tendremos

$$\int d^3p |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| = \int d^3r |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| = 1. \quad (9.2.5b)$$

Si  $\Psi(\mathbf{r})$  es la función de onda que corresponde al vector  $|\Psi\rangle$ , y  $\Psi'(\mathbf{r})$  la que corresponde a  $|\Psi'\rangle$  debemos tener

$$\langle \Psi | \Psi' \rangle = \int_{R^3} d^3r \Psi^*(\mathbf{r}) \Psi'(\mathbf{r}), \quad (9.2.6)$$

luego

$$\begin{aligned} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') &= \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle = \int d^3r \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \mathbf{p}' \rangle = \int d^3r \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle^* \langle \mathbf{r} | \mathbf{p}' \rangle \\ &= |C|^2 \int d^3r e^{i(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\mathbf{r}/\hbar} = (2\pi\hbar)^3 |C|^2 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \end{aligned}$$

Por tanto, tiene que ser  $(2\pi\hbar)^3 |C|^2 = 1$  y hemos demostrado que

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}; \quad (9.2.7)$$

hemos fijado la fase arbitraria de los  $|\mathbf{r}\rangle$ ,  $|\mathbf{p}\rangle$  de manera que  $C$  sea real positivo.

EJERCICIO: 1. Demostrar la relación (9.2.6) utilizando que  $\Psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \Psi \rangle$  y que  $\int d^3r |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| = 1$  •

### 9.3. Matriz densidad

Hasta ahora hemos considerado que los estados de los sistemas cuánticos que estudiábamos eran lo que se conoce como *estados puros*: esto es, hemos supuesto que el sistema se encontraba en un estado  $|\Psi\rangle$  bien definido. En general, sin embargo, no tenemos una información tan detallada, sino que sólo sabemos que el sistema tiene una cierta probabilidad *estadística*,  $\rho_n$ ,  $n = 1, 2, \dots$  (con  $\rho_n \geq 0$  y  $\sum_n \rho_n = 1$ ) de encontrarse en el estado  $|\Psi_n\rangle$ . A estos estados se les conoce como *estados mezcla*, ya que el sistema se encuentra en una “mezcla” estadística<sup>3</sup> de los estados  $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle, \dots$ , con probabilidades  $\rho_1, \rho_2, \dots$ .

Supongamos que queremos medir el valor del observable  $\hat{F}$  en este estado mezcla. Si suponemos los estados  $|\Psi_n\rangle$  ortonormales,

$$\langle\Psi_n|\Psi_{n'}\rangle = \delta_{nn'},$$

entonces el valor medio del observable,  $\overline{F}_\rho$ , será

$$\overline{F}_\rho = \sum_n \rho_n \langle F \rangle_{\Psi_n}. \quad (9.3.1)$$

Podemos reescribir esto de forma más conveniente introduciendo un operador, que se conoce con el nombre de *matriz densidad*,<sup>4</sup> asociado al estado mezcla, y definido por

$$\hat{\rho} = \sum_n \rho_n |\Psi_n\rangle \langle\Psi_n|. \quad (9.3.2a)$$

Esta matriz es claramente autoadjunta.

EJERCICIO: Demostrar que  $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$  •

Calculemos  $\overline{F}_\rho$ . Desarrollando (9.3.1),

$$\begin{aligned} \overline{F}_\rho &= \sum_n \rho_n \langle F \rangle_{\Psi_n} = \sum_n \rho_n \langle\Psi_n|\hat{F}|\Psi_n\rangle \\ &= \sum_n \rho_n \sum_{n'} \langle\Psi_n|\Psi_{n'}\rangle \langle\Psi_{n'}|\hat{F}|\Psi_n\rangle \\ &= \sum_n \langle\Psi_n|\left\{ \sum_{n'} \rho_{n'} |\Psi_{n'}\rangle \langle\Psi_{n'}| \right\} \hat{F}|\Psi_n\rangle \\ &= \sum_n \langle\Psi_n|\hat{\rho}\hat{F}|\Psi_n\rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{F}), \end{aligned}$$

y hemos utilizado la completitud y ortonormalidad de los  $|\Psi_n\rangle$ . La ecuación que hemos deducido,

$$\overline{F}_\rho = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{F}) \quad (9.3.2b)$$

<sup>3</sup> Es importante no confundir esa mezcla estadística con una superposición lineal, a la que correspondería un estado puro.

<sup>4</sup> En general,  $\hat{\rho}$  es un operador; se le conoce como matriz por razones históricas.

puede también utilizarse para estados puros. En efecto, un estado puro  $|\Psi_k\rangle$  podemos caracterizarlo por una matriz densidad  $\hat{\rho}$  tal que  $\rho_n = \delta_{nk}$  con lo que, en este caso,  $\hat{\rho} = |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|$  y

$$\overline{F}_\rho = \langle\Psi_k|\hat{F}|\Psi_k\rangle.$$

Para estados mezcla, la dinámica vendrá dada por la evolución temporal de  $\hat{\rho}$ . Si suponemos las probabilidades  $\rho_n$  independientes del tiempo, utilizamos la ecuación de Schrödinger para las  $|\Psi_n\rangle$  y obtenemos

$$\begin{aligned}\partial_t\hat{\rho} &= \sum_n \rho_n \left\{ \left( \partial_t |\Psi_n\rangle \right) \langle\Psi_n| + |\Psi_n\rangle \left( \partial_t \langle\Psi_n| \right) \right\} \\ &= \sum_n \rho_n \left\{ \frac{1}{i\hbar} \hat{H} |\Psi_n\rangle \langle\Psi_n| + |\Psi_n\rangle \left\langle \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi_n \right\rangle \right\}. \\ &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]\end{aligned}$$

Es decir, la ecuación de evolución temporal viene dada por

$$i\hbar\partial_t\hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}]. \quad (9.3.3)$$

Es interesante verificar que  $\hat{\rho}$  es conservada en el tiempo,  $\dot{\hat{\rho}} = 0$ , lo que puede verse de (9.3.3) usando también (4.4.2).

Por supuesto, podríamos haber introducido la matriz densidad con el formalismo de funciones de onda; si hemos esperado a verla después de introducir el formalismo de Dirac es porque, en éste, es más sencilla y transparente. En el formalismo de funciones de onda, por ejemplo de una partícula,  $\hat{\rho}$  es un operador integral de núcleo

$$K_\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \sum_n \rho_n \Psi_n(\mathbf{r}, t) \Psi_n^*(\mathbf{r}', t). \quad (9.3.4)$$

En efecto: tenemos que demostrar que, para cualquier  $\Phi$ ,

$$\hat{\rho}\Phi(\mathbf{r}, t) = \int d^3r' K_\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \Phi(\mathbf{r}', t). \quad (9.3.5)$$

Utilizando (9.3.2a) y que  $\int d^3r' |\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}'| = 1$ , y suprimiendo la variable  $t$  para aligerar la notación,

$$\begin{aligned}\hat{\rho}\Phi(\mathbf{r}) &= \sum_n \rho_n \langle\mathbf{r}|\Psi_n\rangle \langle\Psi_n|\Phi\rangle = \sum_n \rho_n \langle\mathbf{r}|\Psi_n\rangle \langle\Psi_n| \int d^3r' |\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}'|\Phi\rangle \\ &= \int d^3r' \left\{ \sum_n \rho_n \langle\mathbf{r}|\Psi_n\rangle \langle\Psi_n|\mathbf{r}'\rangle^* \right\} \Phi(\mathbf{r}') \\ &= \int d^3r' \left\{ \sum_n \rho_n \Psi_n(\mathbf{r}) \Psi_n^*(\mathbf{r}') \right\} \Phi(\mathbf{r}'),\end{aligned}$$

como queríamos demostrar.

### 9.4. Imágenes de Schrödinger y Heisenberg

En todo lo que antecede hemos trabajado, sin decirlo explícitamente, en lo que se llama la *imagen de Schrödinger*: hemos considerado que los estados  $|\Psi(t)\rangle$  (o las funciones de onda,  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ ) dependen del tiempo explícitamente, y que operadores tales como los  $\hat{\mathbf{Q}}, \hat{\mathbf{P}}$  no tienen dependencia explícita en  $t$ . Es posible, sin embargo, formular la mecánica cuántica en otra imagen, llamada *imagen de Heisenberg*, en la que los estados  $|\Psi\rangle_{\text{H}}$  (o las funciones de onda,  $\Psi_{\text{H}}$ ) son independientes del tiempo, pero los operadores  $\hat{\mathbf{Q}}_{\text{H}}(t), \hat{\mathbf{P}}_{\text{H}}(t)$  sí dependen explícitamente de  $t$ . Ambas imágenes están relacionadas entre sí por medio de un operador unitario, por lo cual son totalmente equivalentes.

En lo que queda de esta sección y en la próxima denotaremos con el subíndice S a los estados y operadores en la imagen de Schrödinger. Llamemos también  $\hat{T}(t)$  al operador que nos pasa de una imagen a otra; evidentemente, ha de depender del tiempo. Escojamos el origen de los tiempos de forma que las dos imágenes, Schrödinger y Heisenberg, coincidan en el instante  $t = 0$ :  $|\Psi\rangle_{\text{H}} = |\Psi(0)\rangle_{\text{S}}$ . Por tanto, el operador  $\hat{T}$  deberá de satisfacer las condiciones

$$|\Psi\rangle_{\text{H}} = \hat{T}(t)|\Psi(t)\rangle_{\text{S}}, \quad \hat{T}(t=0) = 1, \quad (9.4.1a)$$

y, además, garantizar la independencia en el tiempo de  $|\Psi\rangle_{\text{H}}$ ,

$$\partial_t |\Psi\rangle_{\text{H}} = 0. \quad (9.4.1b)$$

Consideremos un sistema conservativo, esto es, tal que el hamiltoniano  $\hat{H}_{\text{S}}$  no depende del tiempo. De (9.4.1) y utilizando la ecuación de Schrödinger,

$$\begin{aligned} 0 &= \partial_t |\Psi\rangle_{\text{H}} = \left\{ \partial_t \hat{T}(t) \right\} |\Psi(t)\rangle_{\text{S}} + \hat{T}(t) \partial_t |\Psi(t)\rangle_{\text{S}} \\ &= \left\{ \partial_t \hat{T}(t) + \frac{1}{i\hbar} \hat{T}(t) \hat{H}_{\text{S}} \right\} |\Psi(t)\rangle_{\text{S}}, \end{aligned}$$

lo que, por valer para cualquier  $|\Psi(t)\rangle_{\text{S}}$  implica que

$$\partial_t \hat{T}(t) = \frac{i}{\hbar} \hat{T}(t) \hat{H}_{\text{S}}, \quad (9.4.2)$$

con solución

$$\hat{T}(t) = e^{i\hat{H}_{\text{S}}t/\hbar}. \quad (9.4.3)$$

Esto era de esperar:  $\hat{T}(t)$  es el inverso del operador evolución temporal (sec. 5.3),

$$\hat{T}(t) = \hat{U}^{-1}(t, 0) \quad (9.4.4)$$

esto es,  $\hat{T}(t)$  “vuelve” el estado  $|\Psi(t)\rangle_{\text{S}}$  al estado que había en el tiempo  $t = 0$ .

La expresión *formal* de los operadores  $\hat{\mathbf{Q}}_{\text{H}}(t)$  y  $\hat{\mathbf{P}}_{\text{H}}(t)$  es sencilla; tenemos que pedir que, por ejemplo, para todo par de estados,

$${}_{\text{H}}\langle \Psi | \hat{\mathbf{Q}}_{\text{H}j}(t) \Phi \rangle_{\text{H}} = {}_{\text{S}}\langle \Psi | \hat{\mathbf{Q}}_{\text{S}j} \Phi \rangle_{\text{S}}.$$

Por tanto tenemos

$$\hat{Q}_{H_j}(t) = \hat{T}(t)\hat{Q}_{S_j}\hat{T}^{-1}(t) \quad (9.4.5a)$$

y, análogamente,

$$\hat{P}_{H_j}(t) = \hat{T}(t)\hat{P}_{S_j}\hat{T}^{-1}(t). \quad (9.4.5b)$$

La expresión explícita, sin embargo, sólo puede expresarse a través del desarrollo en serie de las exponenciales que definen  $\hat{T}$ ,  $\hat{T}^{-1}$  ya que  $\hat{T}$  y  $\hat{Q}_{S_j}$  o  $\hat{P}_{S_j}$  no conmutan. Como  $\hat{T}$  y  $\hat{H}_S$  sí conmutan, resulta que la expresión del hamiltoniano es la misma en las dos imágenes:

$$\hat{H}_S = \hat{H}_H. \quad (9.4.6)$$

La imagen de Heisenberg es útil, sobre todo, en teoría cuántica relativista, pero nosotros no la vamos a utilizar apenas.

### 9.5. Imagen de Dirac

En muchos casos se puede descomponer el hamiltoniano de un problema en dos trozos,

$$\hat{H}_S = \hat{H}_S^{(0)} + \hat{H}_S^{(1)} \quad (9.5.1)$$

donde la ecuación de Schrödinger se puede resolver exactamente para  $\hat{H}_S^{(0)}$ , y el efecto de  $\hat{H}_S^{(1)}$  lo tenemos en cuenta en aproximaciones sucesivas. Un ejemplo importante de esta situación lo veremos en teoría de colisiones, cuando  $\hat{H}_S^{(0)}$  es el hamiltoniano libre y  $\hat{H}_S^{(1)}$  el potencial:

$$\hat{H} = H_0 + \hat{V}. \quad (9.5.2)$$

Dirac introdujo una representación intermedia entre las de Schrödinger y Heisenberg, en la que la evolución de los estados viene dada sólo por  $\hat{H}_S^{(1)}$ , es decir, en cierto modo hemos “sustraído” explícitamente la parte conocida,  $\hat{H}_S^{(0)}$ . Los vectores en esta *imagen de Dirac*<sup>5</sup> se definen, pues, por

$$|\Psi(t)\rangle_D = e^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}|\Psi(t)\rangle_S \quad (9.5.3)$$

con lo que las tres imágenes (S, H y D) coinciden a tiempo  $t = 0$ . En la imagen de Dirac los operadores son

$$\hat{Q}_{D_j}(t) = e^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}\hat{Q}_{S_j}(t)e^{-i\hat{H}^{(0)}t/\hbar} \dots \text{ etcétera.}$$

Particularmente importante es el operador  $\hat{H}_D^{(1)}(t)$ , que resulta ser *dependiente* del tiempo, ya que (en general)  $\hat{H}_S^{(0)}$ ,  $\hat{H}_S^{(1)}$  no conmutan:

$$\hat{H}_D^{(1)}(t) = e^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}\hat{H}_S^{(1)}(t)e^{-i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}. \quad (9.5.4)$$

<sup>5</sup> A veces conocida también como *imagen de interacción* o, en teoría relativista de campos, *imagen de Dyson*.

Sin embargo,  $\hat{H}_D^{(0)}$  coincide con  $\hat{H}_S^{(0)}$ :

$$\hat{H}_D^{(0)} = \hat{H}_S^{(0)} \equiv \hat{H}^{(0)}. \quad (9.5.5)$$

Evaluemos ahora la evolución en el tiempo de los estados en la imagen de Dirac. En la imagen de Schrödinger tenemos

$$i\hbar\partial_t|\Psi(t)\rangle_S = \left(\hat{H}^{(0)} + \hat{H}_S^{(1)}\right)|\Psi(t)\rangle_S. \quad (9.5.6)$$

De (9.5.3) y (9.5.6),

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t|\Psi(t)\rangle_D &= -\hat{H}^{(0)}e^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}|\Psi(t)\rangle_S + e^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}\left(\hat{H}^{(0)} + \hat{H}_S^{(1)}\right)|\Psi(t)\rangle_S \\ &= -\hat{H}^{(0)}|\Psi(t)\rangle_D + \left(\hat{H}^{(0)} + e^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}\hat{H}_S^{(1)}(t)e^{-i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}\right)|\Psi(t)\rangle_D, \end{aligned}$$

y, por tanto,

$$i\hbar\partial_t|\Psi(t)\rangle_D = \hat{H}_D^{(1)}(t)|\Psi(t)\rangle_D. \quad (9.5.7)$$

Como queríamos,  $|\Psi\rangle_D$  evoluciona sólo con  $\hat{H}_D^{(1)}$ .

Para tiempos finitos, el encontrar el operador evolución temporal,  $\hat{U}_D(t, t_0)$ , requiere un proceso algo más complicado que el seguido en la sec. 5.3 en la imagen de Schrödinger. Comenzamos por definirlo de manera que se tenga

$$\hat{U}_D(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle_D = |\Psi(t)\rangle_D. \quad (9.5.8)$$

Utilizando (9.5.7),

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\hat{U}_D(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle_D &= i\hbar\partial_t|\Psi(t)\rangle_D \\ &= \hat{H}_D^{(1)}(t)|\Psi(t)\rangle_D = \hat{H}_D^{(1)}(t)\hat{U}_D(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle_D. \end{aligned}$$

Como esto vale para todo  $|\Psi(t_0)\rangle_D$ , tenemos

$$i\hbar\partial_t\hat{U}_D(t, t_0) = \hat{H}_D^{(1)}(t)\hat{U}_D(t, t_0). \quad (9.5.9a)$$

Además,  $\hat{U}_D$  satisface la condición de contorno

$$\hat{U}_D(t_0, t_0) = 1. \quad (9.5.9b)$$

Ambas ecuaciones (9.5.9) son equivalentes a una sola ecuación integral:

$$\hat{U}_D(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}_D^{(1)}(t')\hat{U}_D(t', t_0) \quad (9.5.10)$$

que, a su vez, puede resolverse por el método de Neumann–Liouville de iteraciones (o aproximaciones) sucesivas. La aproximación de orden cero se obtiene considerando  $\hat{H}^{(1)} \simeq 0$ , con lo que

$$\hat{U}_{0D}(t, t_0) = 1.$$

Sustituyendo en el miembro de la derecha de (9.5.10) obtenemos la aproximación de orden uno,

$$\hat{U}_{1D}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}_D^{(1)},$$

la de orden dos sustituyendo esto en (9.5.10), etc. Iterando el proceso llegamos al desarrollo

$$\hat{U}_D(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}_D^{(1)}(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{H}_D^{(1)}(t_2) \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}_D^{(1)}(t_n); \quad (9.5.11)$$

el término de orden cero en (9.5.11) se define como la unidad. Podemos definir una nueva función, la T-exponencial, como el miembro de la derecha de (9.5.11) y escribimos

$$\hat{U}_D(t, t_0) = T \exp \left\{ \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}_D^{(1)} \right\}. \quad (9.5.11)$$

En la próxima sección estudiaremos con más detalle la T-exponencial. Como un subproducto de nuestro cálculo podemos ahora demostrar la fórmula (5.3.2). En efecto, si  $\hat{H}(t)$  depende del tiempo basta escoger  $\hat{H}^{(0)} = 0$ ,  $\hat{H}^{(1)} = \hat{H}(t)$ .

## 9.6. Apéndice: ordenación temporal y T-exponencial

Consideremos una expresión como la del término  $n$ -ésimo de (9.5.11):

$$\hat{A}_n(t, t_0) = \lambda^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{F}(t_1) \hat{F}(t_2) \dots \hat{F}(t_n). \quad (9.6.1)$$

El orden de las  $\hat{F}(t_1), \dots, \hat{F}(t_n)$  es esencial cuando, como ocurre con las  $\hat{H}^{(1)}(t)$ , no conmutan a tiempos distintos:

$$[\hat{F}(t_i), \hat{F}(t_j)] \neq 0, \quad \text{para } t_i \neq t_j.$$

Definimos la operación *ordenación temporal*, o *producto-T*, y lo denotamos por T, de la forma siguiente: si tenemos un conjunto de operadores que dependen del tiempo  $\hat{M}_1(t_1), \dots, \hat{M}_n(t_n)$  y los tiempos son tales que

$$t_{i_1} \geq t_{i_2} \geq \dots \geq t_{i_n}, \quad (9.6.2a)$$

entonces

$$T\{\hat{M}_1(t_1) \dots \hat{M}_n(t_n)\} \equiv \hat{M}_{i_1}(t_{i_1}) \dots \hat{M}_{i_n}(t_{i_n}). \quad (9.6.2a)$$

Es decir, T ordena el producto de operadores en el sentido de los tiempos crecientes de derecha a izquierda. Con esta definición podemos reescribir (9.6.1) como

$$\hat{A}_n(t, t_0) = \lambda^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n T\{\hat{F}(t_1) \hat{F}(t_2) \dots \hat{F}(t_n)\}. \quad (9.6.3)$$



Una propiedad interesante del producto ordenado en el tiempo es que no depende del orden en que se tomen los operadores, de forma que

$$\mathbb{T}\{\hat{M}_1(t_1) \dots \hat{M}_n(t_n)\} = \mathbb{T}\{\hat{M}_{j_1}(t_{j_1}) \dots \hat{M}_{j_n}(t_{j_n})\},$$

con  $(j_1, \dots, j_n)$  cualquier permutación  $\Pi$  de los  $(1, \dots, n)$ . Podemos por tanto reescribir (9.6.2) como

$$\mathbb{T}\{\hat{M}_1(t_1) \dots \hat{M}_n(t_n)\} = \sum_{\Pi} \theta(t_{j_1} - t_{j_2}) \dots \theta(t_{j_{n-1}} - t_{j_n}) \hat{M}_{j_1}(t_{j_1}) \dots \hat{M}_{j_n}(t_{j_n}) \quad (9.6.4)$$

y la suma se extiende a todas las permutaciones. Efectivamente, debido a las funciones escalón  $\theta(t_{j_\nu} - t_{j_{\nu+1}})$  el único término no-nulo de (9.6.4) es aquel con  $j_1 = i_1, \dots, j_n = i_n$ , para el que se verifica (9.6.2a).

Debido a que el producto- $\mathbb{T}$  no depende del orden podemos escribir también, para las  $\hat{F}$ ,

$$\mathbb{T}\{\hat{F}(t_1) \dots \hat{F}(t_n)\} = \frac{1}{n!} \sum_{\Pi} \mathbb{T}\{\hat{F}(t_{j_1}) \dots \hat{F}(t_{j_n})\} \quad (9.6.5)$$

y  $\Pi$  es la permutación

$$\Pi(1, \dots, n) = (j_1, \dots, j_n). \quad (9.6.6)$$

Finalmente, la presencia de las funciones escalón, implícitas en la definición del producto- $\mathbb{T}$ , nos permiten extender las integrales hasta el límite superior máximo,  $t$ . Entonces tenemos,

$$\hat{A}_n(t, t_0) = \frac{\lambda^n}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_n \mathbb{T}\{\hat{F}(t_1) \dots \hat{F}(t_n)\}. \quad (9.6.7)$$

Podemos definir esto, formalmente, como

$$\int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_n \mathbb{T}\{\hat{F}(t_1) \dots \hat{F}(t_n)\} \equiv \mathbb{T}\left\{\int_{t_0}^t dt' \hat{F}(t')\right\}^n$$

de manera que  $\hat{A}_n$  se puede representar como una  $T$ -potencia  $n$ -ésima. De aquí definimos la  $T$ -exponencial, suma de las  $\hat{A}_n$ , como

$$\hat{A}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{A}_n(t, t_0) \equiv \mathbb{T} \exp \lambda \int_{t_0}^t dt' \hat{F}(t'). \quad (9.6.8)$$

**EJERCICIO:** Demostrar que si  $\hat{F}$  es independiente del tiempo  $t$ , entonces la  $T$ -exponencial coincide con la exponencial ordinaria, es decir, se tiene  $\mathbb{T} \exp \lambda \int_{t_0}^t dt' \hat{F} = e^{\lambda \hat{F}}$  •



## PROBLEMAS

P.9.1. Dado un operador  $\hat{A}$  demostrar que

$$\hat{A}\Psi(\mathbf{r}) = \int d^3r' A(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}'); \quad \hat{A}\Psi(\mathbf{p}) = \int d^3p' A(\mathbf{p}, \mathbf{p}')\Psi(\mathbf{p}')$$

con

$$A(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | \hat{A} | \mathbf{r}' \rangle, \quad A(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \langle \mathbf{p} | \hat{A} | \mathbf{p}' \rangle.$$

Hallar los núcleos correspondientes a los casos  $\hat{A} = \hat{Q}_j$ ,  $\hat{P}_l$  y  $\hat{V}$  ( $\hat{V}$  es un potencial).

*Solución.* Para el caso general,

$$\hat{A}\Psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \hat{A} | \Psi \rangle = \int d^3r' \langle \mathbf{r} | \hat{A} | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \Psi \rangle = \int d^3r' A(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}').$$

Con esto se obtiene fácilmente que

$$Q_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = r_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'); \quad Q_j(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_j} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}').$$

$$P_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_j} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'); \quad P_j(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = p_j \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}').$$

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'); \quad V(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \tilde{V}(\mathbf{p} - \mathbf{p}').$$

En la última fórmula,  $\tilde{V}$  está dado por (4.5.4a).

## CAPÍTULO 10.

# Formulación de integrales de camino de la mecánica cuántica

### 10.1. Formalismo lagrangiano en mecánica clásica

Comenzamos por recordar el formalismo lagrangiano en mecánica clásica. Denotamos por  $q = \{q_\alpha\}$  al conjunto de variables posición de un sistema; por ejemplo, para una sola partícula,  $q$  representa el conjunto de las tres componentes de  $\mathbf{r}$ . El *lagrangiano* del sistema es una función de  $q, \dot{q}$ :  $L_{cl}(q, \dot{q})$ , y consideramos el caso de sistemas en los que  $L_{cl}$  no depende del tiempo. Para una partícula libre, el lagrangiano es

$$L_{0cl} = \frac{1}{2}m\dot{q}^2, \quad (10.1.1)$$

donde hay suma implícita sobre las  $\dot{q}$  (y sobre las  $m$ , si hubiera distintas partículas con distintas masas). Si hay interacción,

$$L_{cl} = L_{0cl} + L_{Icl} \quad (10.1.2a)$$

donde, para una interacción debida a un potencial  $V_{cl}$ ,

$$L_{Icl} = -V_{cl}(q). \quad (10.1.2b)$$

El momento canónico conjugado a la variable  $q_\alpha$  se define por

$$p_\alpha = \partial L_{cl} / \partial \dot{q}_\alpha, \quad (10.1.3)$$

de forma que, cuando  $L_{cl}$  viene dado por (10.1.2), podemos comprobar que  $p_\alpha = m\dot{q}_\alpha$  y reescribir (10.1.2) como

$$L_{cl} = \frac{p^2}{2m} + L_{Icl}. \quad (10.1.4)$$

La *acción*,  $\mathcal{A}$ , se define como la primitiva de  $L_{cl}$ :

$$\mathcal{A}(t_2, t_1) = \int_{t_1}^{t_2} dt L_{cl}(q, \dot{q}). \quad (10.1.5)$$

Las trayectorias clásicas,  $q_{cl}(t), p_{cl}(t)$  son aquellas para las que la acción es estacionaria. Si escribimos, con  $\delta q$  infinitesimal,  $q \rightarrow q_{cl} + \delta q$ , la acción variará

$$\mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}_{cl} + \delta\mathcal{A}. \quad (10.1.6)$$

donde

$$\mathcal{A}_{cl} = \int_{t_1}^{t_2} dt L_{cl}(q_{cl}, \dot{q}_{cl}). \quad (10.1.7)$$

Por ser  $\mathcal{A}$  estacionaria,  $\delta\mathcal{A} = 0$ , lo que nos da las *ecuaciones de Euler–Lagrange*

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L_{cl}}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial L_{cl}}{\partial q} \quad (10.1.8)$$

que, en el caso (10.1.2), se nos convierten en las de Newton

$$m\ddot{q}_{cl} = -\frac{\partial}{\partial q_{cl}} V_{cl}. \quad (10.1.9)$$

En la aproximación WKB y al estudiar el límite clásico de la función de onda, vimos que, en la aproximación semiclásica, la función de onda viene dada por

$$\Psi \underset{\hbar \rightarrow 0}{\sim} \exp \frac{i}{\hbar} \mathcal{A}_{cl}(q_{cl}, \dot{q}_{cl}),$$

lo que sugiere una conexión entre trayectorias clásicas y amplitudes cuánticas. Esta conexión fue establecida por Feynman (1948) siguiendo un método originado por Dirac (1933) y permite calcular amplitudes cuánticas *exactamente* integrando caminos clásicos. El método lo vamos a describir en las siguientes secciones; más detalles y aplicaciones pueden encontrarse en el libro de Feynman y Hibbs (1965).

## 10.2. Amplitudes de transición para un tiempo infinitesimal

Consideramos una partícula cuántica que en el tiempo  $t_0$  está en el lugar  $\mathbf{r}_0$ , esto es, en el estado  $|\mathbf{r}_0\rangle$ . Queremos calcular la amplitud de probabilidad de encontrarla en el lugar  $\mathbf{r}$ , esto es, en el estado  $|\mathbf{r}\rangle$  en el instante de tiempo  $t$ . Claramente, para el tiempo  $t$  el estado habrá evolucionado al estado  $\hat{U}(t, t_0)|\mathbf{r}_0\rangle$  y, por tanto, la amplitud deseada, que denotamos por  $D_{t-t_0}(\mathbf{r}_0 \rightarrow \mathbf{r})$  vendrá dada por

$$D_{t-t_0}(\mathbf{r}_0 \rightarrow \mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \hat{U}(t, t_0) | \mathbf{r}_0 \rangle. \quad (10.2.1)$$

Suponemos que el hamiltoniano no depende del tiempo; de lo contrario,  $D_{t-t_0}(\mathbf{r}_0 \rightarrow \mathbf{r})$  dependería también del instante de tiempo inicial,  $t_0$ .

A partir de  $D_{t-t_0}(\mathbf{r}_0 \rightarrow \mathbf{r})$  podemos encontrar la función de onda  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  evolucionada de una arbitraria, dada en  $t_0$ . En efecto:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) &= \langle \mathbf{r} | \Psi(t) \rangle = \langle \mathbf{r} | \hat{U}(t, t_0) | \Psi(t_0) \rangle \\ &= \int d^3 r_0 \langle \mathbf{r} | \hat{U}(t, t_0) | \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \Psi(t_0) \rangle \end{aligned}$$

luego

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3 r_0 D_{t-t_0}(\mathbf{r}_0 \rightarrow \mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}_0, t_0). \quad (10.2.2)$$

A  $D$  se le suele llamar *propagador*.

Comencemos por el caso en que  $\tau \equiv t - t_0$  es infinitesimal. Por razones que serán obvias en un momento, vamos a cambiar la notación, llamando  $\mathbf{r}_i$  a  $\mathbf{r}_0$  y  $\mathbf{r}_{i+1}$  a  $\mathbf{r}$ . Queremos, pues, calcular

$$D_\tau(\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}_{i+1}) = \langle \mathbf{r}_{i+1} | \hat{U}(t_0 + \tau, t_0) | \mathbf{r}_i \rangle. \quad (10.2.3)$$

Tenemos que  $\hat{U}(t_0 + \tau, t_0) = \exp(-i\tau\hat{H}/\hbar)$ ; sustituyendo en (10.2.3), introduciendo la unidad en la forma  $\int d^3p |\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}| = 1$  y, desarrollando a primer orden la exponencial en la expresión para  $\hat{U}$ , nos queda

$$\begin{aligned} D_\tau(\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}_{i+1}) &= \int d^3p \langle \mathbf{r}_{i+1} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | e^{-i\tau\hat{H}/\hbar} | \mathbf{r}_i \rangle \\ &= \int d^3p \langle \mathbf{r}_{i+1} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \left\{ 1 - \frac{i\tau}{\hbar} \hat{H} \right\} | \mathbf{r}_i \rangle + O(\tau^2). \end{aligned}$$

Ahora bien: si el hamiltoniano es de la forma

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + \hat{V}(\hat{Q}), \quad (10.2.4)$$

entonces, haciendo actuar  $\hat{P}^2$  a la izquierda y  $\hat{V}(\hat{Q})$  a la derecha tenemos

$$\langle \mathbf{p} | \hat{P} = \langle \mathbf{p} | \mathbf{p} \quad \text{y} \quad \hat{Q} | \mathbf{r} = \mathbf{r} | \mathbf{r} \rangle,$$

luego

$$\langle \mathbf{p} | \hat{H} | \mathbf{r} \rangle = \left\{ \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + V(\mathbf{r}) \right\} \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle = H_{cl}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle,$$

donde  $H_{cl}$  es el hamiltoniano clásico. En general, incluso si  $\hat{H}$  no es de la forma (10.2.4), podemos *definir* el hamiltoniano clásico correspondiente a  $\hat{H}$  por

$$\langle \mathbf{p} | \hat{H} | \mathbf{r} \rangle \equiv H_{cl}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle. \quad (10.2.5)$$

Podemos tomar a (10.2.5) como una expresión del principio de correspondencia.

Utilizando (10.2.5) y reexponenciando encontramos que

$$\begin{aligned} D_\tau(\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}_{i+1}) &= \int d^3p \langle \mathbf{r}_{i+1} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \mathbf{r}_i \rangle \left\{ 1 - \frac{i\tau}{\hbar} \hat{H}_{cl}(\mathbf{p}, \mathbf{r}_i) \right\} + O(\tau^2) \\ &= \int d^3p \langle \mathbf{r}_{i+1} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \mathbf{r}_i \rangle e^{-i\tau\hat{H}_{cl}(\mathbf{p}, \mathbf{r}_i)/\hbar} + O(\tau^2). \end{aligned}$$

Finalmente, utilizando (9.2.7) para los  $\langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle$  obtenemos

$$D_\tau(\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}_{i+1}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ -\tau \hat{H}_{cl}(\mathbf{p}, \mathbf{r}_i) + (\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i) \mathbf{p} \right\} + O(\tau^2), \quad (10.2.6a)$$

o, si  $\hat{H}$  tiene la forma (10.2.4),

$$D_\tau(\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}_{i+1}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \exp \frac{i\tau}{\hbar} \left\{ \frac{\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i}{\tau} \mathbf{p} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - V(\mathbf{r}_i) \right\} + O(\tau^2). \quad (10.2.6b)$$

Si la partícula fuese una partícula clásica (que *no lo es*)  $(\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i)/\tau$  sería la velocidad de la partícula. Esto nos sugiere definir  $\dot{\mathbf{r}}_i$  por

$$\dot{\mathbf{r}}_i \equiv \frac{\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i}{\tau}. \quad (10.2.7)$$

Repetimos que *no* es cierto que  $\dot{\mathbf{r}}_i$  coincida con  $d\mathbf{r}_i/dt$ ; (10.2.7) no es, por el momento, más que una notación cómoda.

En el caso (10.2.6b) la integral sobre  $d^3p$  es de tipo gaussiano<sup>1</sup> y puede hacerse explícitamente con lo que obtenemos

$$D_\tau(\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}_{i+1}) = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{3/2} \exp \frac{i\tau}{\hbar} L_{cl}(\mathbf{r}_i, \dot{\mathbf{r}}_i) + O(\tau^2) \quad (10.2.8)$$

donde hemos definido

$$L_{cl}(\mathbf{r}_i, \dot{\mathbf{r}}_i) \equiv \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}_i^2 - V(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{2} m \left( \frac{\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i}{\tau} \right)^2 - V(\mathbf{r}_i)$$

que coincidiría, si  $\dot{\mathbf{r}}$  fuese realmente  $d\mathbf{r}/dt$ , con el lagrangiano clásico de las variables  $\mathbf{r}_i, \dot{\mathbf{r}}_i$ .

Las ecuaciones (10.2.6 y 8) son notables. Nos dan una amplitud de transición cuántica,  $D_\tau$ , en términos de cantidades clásicas  $L_{cl}, H_{cl}$ . De momento, si embargo, estas ecuaciones sólo son válidas para  $\tau \rightarrow 0$ .

EJERCICIO: Comprobar que, si  $\hat{H}$  depende del tiempo, se tiene

$$\begin{aligned} D_{t_0, \tau}(\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}_{i+1}) &\equiv \langle \mathbf{r}_{i+1} | \hat{U}(t_0 + \tau, t_0) | \mathbf{r}_i \rangle \\ &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \exp \frac{i\tau}{\hbar} \left\{ \dot{\mathbf{r}}_i \mathbf{p} - H_{cl}(\mathbf{p}, \mathbf{r}_i, t_0) \right\} + O(\tau^2) \\ &= \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{3/2} \exp \frac{i\tau}{\hbar} L_{cl}(\mathbf{r}_i, \dot{\mathbf{r}}_i, t_0) + O(\tau^2) \quad \bullet \end{aligned} \quad (10.2.9)$$

<sup>1</sup> *Strictu senso*, la integral (10.2.6b) no está definida (es divergente). Podemos darle sentido añadiendo a  $\tau$  una pequeña parte imaginaria positiva,  $\tau \rightarrow \tau + i\epsilon$ ,  $\epsilon > 0$ , con lo que la integral es convergente y podemos tomar el límite  $\epsilon \rightarrow 0$  después de hacerla. Supondremos que todas las integrales divergentes en esta y la próxima sección las definimos de esta manera.

### 10.3. Formulación de integral sobre caminos de las amplitudes de transición

Consideramos ahora  $D$  dado por (10.2.1) con  $t - t_0$  finito. Este caso podemos reducirlo al anterior utilizando la propiedad de grupo del operador de evolución temporal

$$\hat{U}(t_3, t_2)\hat{U}(t_2, t_1) = \hat{U}(t_3, t_1).$$

Para ello dividimos el intervalo  $T = t - t_0$  en  $N$  intervalos de duración  $\tau \equiv T/N$ . Definiendo  $t_n = t_0 + n\tau$  ( $t_N$  coincide con  $t = t_0 + T$ , y también identificaremos  $\mathbf{r}_N$  con  $\mathbf{r}$ ) tenemos

$$D_T(\mathbf{r}_0 \rightarrow \mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \hat{U}(t_N, t_{N-1}) \dots \hat{U}(t_{i+1}, t_i) \dots \hat{U}(t_1, t_0) | \mathbf{r}_0 \rangle. \quad (10.3.1)$$

Introduciendo  $N-1$  veces la unidad en la forma  $\int d^3r_i |\mathbf{r}_i\rangle\langle \mathbf{r}_i|$ ,  $i = 1, \dots, N-1$ ,

$$\begin{aligned} D_T(\mathbf{r}_0 \rightarrow \mathbf{r}) &= \int d^3r_1 \dots d^3r_{N-1} \langle \mathbf{r} | \hat{U}(t_N, t_{N-1}) | \mathbf{r}_{N-1} \rangle \times \\ &\times \dots \langle \mathbf{r}_{i+1} | \hat{U}(t_{i+1}, t_i) | \mathbf{r}_i \rangle \dots \langle \mathbf{r}_1 | \hat{U}(t_1, t_0) | \mathbf{r}_0 \rangle \\ &= \int \prod_{j=1}^{N-1} d^3r_j \prod_{i=1}^{N-1} D_\tau(\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}_{i+1}) | \mathbf{r}_0 \rangle. \end{aligned}$$

Podemos ahora utilizar sin más (10.2.6a), por ejemplo. En efecto; el error en cada término es  $O(\tau^2) = O(1/N^2)$ . Como hay  $N$  términos, el error total será  $O(1/N)$  luego

$$\begin{aligned} D_T(\mathbf{r}_0 \rightarrow \mathbf{r}) &= \\ &\int d^3r_1 \dots d^3r_{N-1} \int \frac{d^3p_1}{(2\pi\hbar)^3} \dots \frac{d^3p_N}{(2\pi\hbar)^3} \exp \frac{i\tau}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} \left\{ \dot{\mathbf{r}}_i \mathbf{p}_{i+1} - H_{\text{cl}}(\mathbf{p}_{i+1}, \mathbf{r}_i) \right\} \\ &+ O\left(\frac{1}{N}\right) \end{aligned}$$

o, si se prefiere,

$$\begin{aligned} D_T(\mathbf{r}_0 \rightarrow \mathbf{r}) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int d^3r_1 \dots d^3r_{N-1} \int \frac{d^3p_1}{(2\pi\hbar)^3} \dots \frac{d^3p_N}{(2\pi\hbar)^3} \\ &\times \exp \frac{i\tau}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} \left\{ \dot{\mathbf{r}}_i \mathbf{p}_{i+1} - H_{\text{cl}}(\mathbf{p}_{i+1}, \mathbf{r}_i) \right\}. \end{aligned} \quad (10.3.2)$$

Si hubiéramos utilizado (10.2.8) habríamos obtenido

$$D_T(\mathbf{r}_0 \rightarrow \mathbf{r}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{3N/2} \int d^3r_1 \dots d^3r_{N-1} \exp \frac{i\tau}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} L_{\text{cl}}(\mathbf{r}_i, \dot{\mathbf{r}}_i). \quad (10.3.3)$$

En ambas ecuaciones,

$$\tau = \frac{t - t_0}{N}, \quad \dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i}{\tau}.$$

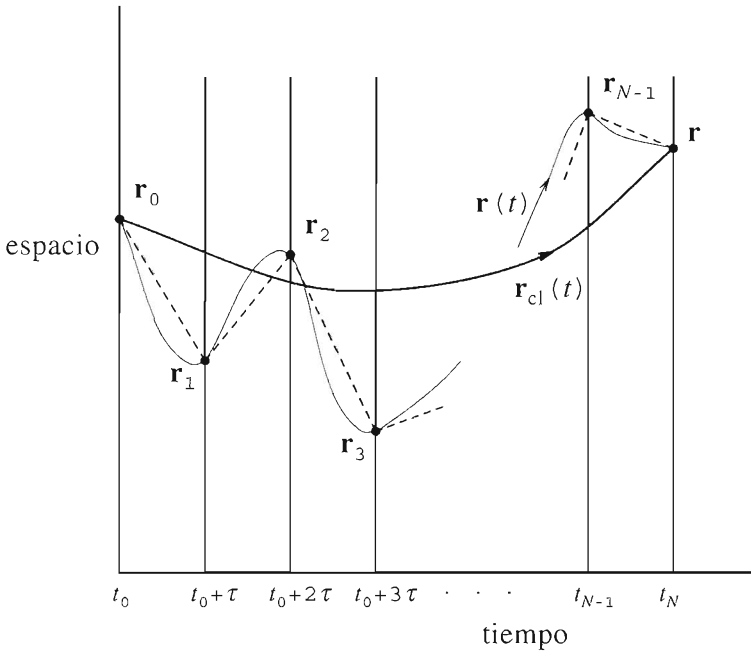


FIGURA 10.3.1. Trayectorias. Línea de puntos: trayectoria quebrada uniendo los puntos  $(t_i, \mathbf{r}_i)$ . Línea delgada ondulada: interpolación  $\mathbf{r}(t)$ . Línea gruesa curvada: trayectoria clásica.

EJERCICIO: Utilícese (10.2.9) para demostrar que, si  $\hat{H}$  depende del tiempo,

$$\begin{aligned}
 & D_{t_0, T}(\mathbf{r}_0 \rightarrow \mathbf{r}) \\
 &= \lim_N \int \prod_{j=1}^{N-1} d^3 r_j \prod_{k=1}^N \frac{d^3 p_k}{(2\pi\hbar)^3} \exp \frac{i\tau}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} \left\{ \dot{\mathbf{r}}_i \mathbf{p}_{i+1} - H_{cl}(\mathbf{p}_{i+1}, \mathbf{r}_i, t_i) \right\} \bullet
 \end{aligned}
 \tag{10.3.4}$$

Concentrémonos ahora en el caso en el que el hamiltoniano es de la forma  $\hat{\mathbf{P}}^2/2m + V(\mathbf{r})$  y, por tanto,  $D_T$  venga dado por (10.3.3). Construimos una función  $\mathbf{r}(t)$  (camino o trayectoria) con las condiciones

$$\mathbf{r}(t_i) = \mathbf{r}_i, \quad d\mathbf{r}(t_i)/dt_i = \dot{\mathbf{r}}_i.$$

Una tal trayectoria es la línea delgada continua de la figura 10.3.1 (representada en una dimensión). Podemos escribir  $d\mathbf{r}_i \equiv d\mathbf{r}(t_i)$ . Además,

$$\begin{aligned} \tau \sum_{i=0}^{N-1} L_{cl}(\mathbf{r}_i, \dot{\mathbf{r}}_i) &= \tau \sum_{i=0}^{N-1} L_{cl}(\mathbf{r}(t_i), d\mathbf{r}(t_i)/dt_i) \\ &\xrightarrow{\tau \rightarrow 0} \int_{t_0}^{t_0+T} dt' L_{cl}\left(\mathbf{r}(t'), \frac{d\mathbf{r}(t')}{dt'}\right) \equiv \mathcal{A}_{t_0}^t[\mathbf{r}], \end{aligned}$$

donde  $\mathcal{A}_{t_0}^t[\mathbf{r}]$  es la acción calculada a lo largo de la trayectoria  $\mathbf{r}(t)$ . La ecuación (10.3.3) nos dice entonces que

$$\begin{aligned} D_T(\mathbf{r}_0 \rightarrow \mathbf{r}) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{3N/2} \\ &\times \int \prod_{n=1}^{N-1} d^3r(t_n) \exp \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_0+T} L_{cl}\left(\mathbf{r}(t), \frac{d\mathbf{r}(t)}{dt}\right) dt \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{3N/2} \int \prod_{n=1}^{N-1} d^3r(t_n) \exp \frac{i}{\hbar} \mathcal{A}_{t_0}^t[\mathbf{r}]. \end{aligned} \quad (10.3.5)$$

La expresión (10.3.5) es lo que se llama una *integral funcional*; esto es, no integramos sobre una o varias variables,  $\prod_{\alpha} dr_{\alpha}$ , sino sobre un conjunto de funciones. Simbólicamente representamos la “diferencial funcional” por  $D\mathbf{r}$ , y entonces (10.3.5) se escribe como

$$D_T(\mathbf{r}_0 \rightarrow \mathbf{r}) = C \int (D\mathbf{r})_1^{N-1} \exp \frac{i}{\hbar} \mathcal{A}_{t_0}^{t_N}[\mathbf{r}], \quad t_N \equiv t_0 + T. \quad (10.3.6)$$

Debe quedar claro, sin embargo, que el sentido de (10.3.6) viene dado por su igualdad con (10.3.5).

Volvamos ahora a la imagen representada por la figura 10.3. Intuitivamente, podemos decir que la amplitud de probabilidad de que la partícula, que partió de  $\mathbf{r}_0$ , llegue a un punto dado  $\mathbf{r}$  (situado en cualquier lugar del espacio) es el producto de las amplitudes de probabilidad de que llegue de  $\mathbf{r}_0$  a  $\mathbf{r}_1$ ,  $\mathbf{r}_1$  arbitrario; de éste a otro también arbitrario  $\mathbf{r}_2$ , etc., hasta acabar en  $\mathbf{r}$ , integrando sobre todas las posibilidades intermedias,  $d^3r_1, \dots, d^3r_{N-1}$ . Esto es, en efecto, lo que encontramos en (10.3.5), por ejemplo. Pero es más: podemos decir que una partícula cuántica, para ir de  $\mathbf{r}_0$  a  $\mathbf{r}$ , recorre *todas* las trayectorias posibles,  $\mathbf{r}(t)$  (y no sólo la clásica, señalada con la línea gruesa en la fig. 10.3.1); cada trayectoria contribuye a la amplitud con la exponencial de  $i/\hbar$  multiplicado por la acción clásica calculada a lo largo de dicha trayectoria. Hay, además, que sumar (integrar) las contribuciones de todos los caminos. De nuevo esto aparece claramente en la ecuación (10.3.5).



Feynman ha demostrado que es posible *deducir* la formulación ordinaria de la mecánica cuántica *postulando* la ecuación (10.3.6) o la (10.2.9), de manera que hay una completa equivalencia entre ambas formulaciones. Intuitivamente esto es obvio; una prueba formal de que, por ejemplo, (10.2.9) implica la ecuación de Schrödinger no es difícil. Consideramos el caso en que  $H_{cl} = \mathbf{p}^2/2m + V(\mathbf{r})$ . De (10.2.2) y (10.2.6a) tenemos, para  $\tau$  infinitesimal,

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t + \tau) &= \int d^3r_0 \Psi(\mathbf{r}_0, t) \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \left\{ 1 - \frac{i\tau}{\hbar} \left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}_0) \right) e^{i(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\mathbf{p}/\hbar} \right\} \\ &\quad + O(\tau^2) \\ &= \int d^3r_0 \Psi(\mathbf{r}_0, t) e^{i(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\mathbf{p}/\hbar} \\ &\quad - \frac{i\tau}{\hbar} \int d^3r_0 \Psi(\mathbf{r}_0, t) \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{i(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\mathbf{p}/\hbar} \left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}_0) \right) + O(\tau^2) \\ &= \Psi(\mathbf{r}, t) \\ &\quad - \frac{i\tau}{\hbar} \int d^3r_0 \Psi(\mathbf{r}_0, t) \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{i(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\mathbf{p}/\hbar} \left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}_0) \right) + O(\tau^2) \end{aligned}$$

y hemos utilizado que  $\int d^3p e^{i(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\mathbf{p}/\hbar} = (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ . Por tanto, en el límite  $\tau \rightarrow 0$ ,

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\Psi(\mathbf{r}, t) &= \int d^3r_0 \Psi(\mathbf{r}_0, t) \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{i(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\mathbf{p}/\hbar} \left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}_0) \right) \\ &= \int d^3r_0 \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{i(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\mathbf{p}/\hbar} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Psi(\mathbf{r}_0, t) \\ &\quad + \int d^3r_0 V(\mathbf{r}_0) \Psi(\mathbf{r}_0, t) \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{i(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\mathbf{p}/\hbar} \\ &= \left( \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}, t) \end{aligned}$$

que es, efectivamente, la ecuación de Schrödinger.

Para acabar, damos explícitamente la fórmula para la función de onda  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  evolucionada de una  $\Psi(\mathbf{r}, t_0)$ , que se sigue de (10.3.5):

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{3N/2} \\ &\quad \times \int \prod_{n=0}^{N-1} d^3r(t_n) \Psi(\mathbf{r}_0, t_0) \exp \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' L_{cl} \left( \mathbf{r}(t), \frac{d\mathbf{r}}{dt} \right). \end{aligned} \quad (10.3.7)$$

## 10.4. La aproximación WKB en formulación de integrales de caminos

La expresión (10.3.5) y la interpretación de integrales de caminos que presentamos nos sugiere inmediatamente la aproximación semiclásica. La exponencial  $\exp i\mathcal{A}/\hbar$  oscilará violentamente si  $|\mathcal{A}| \gg \hbar$ ; las contribuciones de los diferentes caminos tienden a cancelarse, y sólo sobrevivirán los caminos para los que  $\mathcal{A}$  sea mínimo, es decir, las trayectorias clásicas.

Para ver esto formalmente hacemos un cambio de variables utilizando, en vez de las  $\mathbf{r}_n = \mathbf{r}(t_n)$  las  $\boldsymbol{\xi}$  definidas por

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_{\text{cl}}(t) + \hbar^{1/2}\boldsymbol{\xi}(t). \quad (10.4.1)$$

Podemos interpretar las  $\boldsymbol{\xi}$  como las *fluctuaciones cuánticas* alrededor de la trayectoria clásica,  $\mathbf{r}_{\text{cl}}(t)$ . El cambio de variables es tal que, en (10.3.7),

$$\prod_{n=0}^{N-1} d\mathbf{r}(t_n) = \hbar^{3N/2} \prod_{n=0}^{N-1} d\boldsymbol{\xi}(t_n),$$

con lo que la dependencia en  $\hbar$  de la constante en (10.3.7) se cancela. Esta es, por supuesto, la razón de la  $\hbar^{1/2}$  en (10.4.1). Tenemos, pues

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) &= \lim_{N \rightarrow \infty} C(N, T) \\ &\times \int \prod_{n=0}^{N-1} d^3\xi_n \Psi(\boldsymbol{\xi}_0, t_0) \exp \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' L_{\text{cl}} \left( \mathbf{r}_{\text{cl}} + \hbar^{1/2}\boldsymbol{\xi}, \frac{d\mathbf{r}_{\text{cl}}}{dt'} + \hbar^{1/2} \frac{d\boldsymbol{\xi}}{dt'} \right) \end{aligned}$$

y la constante  $C(N, T) = (m/2\pi i \tau)^{3N/2}$  es independiente de  $\hbar$ . Consideremos ahora la acción, y desarrollémosla en potencias de  $\hbar^{1/2}$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{t_0}^t[\mathbf{r}_{\text{cl}} + \hbar^{1/2}\boldsymbol{\xi}] &= \int_{t_0}^t dt' L_{\text{cl}} \left( \mathbf{r}_{\text{cl}} + \hbar^{1/2}\boldsymbol{\xi}, \frac{d\mathbf{r}_{\text{cl}}}{dt'} + \hbar^{1/2} \frac{d\boldsymbol{\xi}}{dt'} \right) \\ &= \int_{t_0}^t dt' L_{\text{cl}}(\mathbf{r}_{\text{cl}}, \dot{\mathbf{r}}_{\text{cl}}) \\ &+ \int_{t_0}^t dt' \sum_i \left\{ \frac{\partial L_{\text{cl}}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}})}{\partial r_{\text{cl},i}} - \frac{d}{dt'} \frac{\partial L_{\text{cl}}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}})}{\partial \dot{r}_{\text{cl},i}} \right\} \xi_i \\ &+ \int dt' F, \end{aligned} \quad (10.4.3a)$$

donde hemos llevado a cabo una integración por partes y

$$F = \sum_{ik} \left( \frac{\partial^2 L_{\text{cl}}}{\partial r_{\text{cl},i} \partial r_{\text{cl},k}} \xi_i \xi_k + 2 \frac{\partial^2 L_{\text{cl}}}{\partial r_{\text{cl},i} \partial \dot{r}_{\text{cl},k}} \xi_i \dot{\xi}_k + \frac{\partial^2 L_{\text{cl}}}{\partial \dot{r}_{\text{cl},i} \partial \dot{r}_{\text{cl},k}} \dot{\xi}_i \dot{\xi}_k \right) + O(\hbar). \quad (10.4.3b)$$

El término en corchetes de (10.4.3a) se anula debido a las ecuaciones de Euler-Lagrange. El término

$$\int_{t_0}^t dt' L_{cl}(\mathbf{r}_{cl}, \dot{\mathbf{r}}_{cl}) = \mathcal{A}_{cl}[\mathbf{r}_{cl}]$$

(la acción a lo largo de la trayectoria clásica) es independiente de  $\xi$ , luego sale fuera de la integral cuando sustituimos (10.4.3) en (19.4.2). Por tanto, esta última se convierte en

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) &= e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' L_{cl}(\mathbf{r}_{cl}, \dot{\mathbf{r}}_{cl})} \lim_{N \rightarrow \infty} C(N, T) \int \prod d^3 \xi_n \Psi(\boldsymbol{\xi}_0, t_0) \exp iF \\ &= (\text{Constante}) \exp \frac{i}{\hbar} \{ \mathcal{A}_{cl}[\mathbf{r}_{cl}] + O(\hbar) \}, \end{aligned} \quad (10.4.4)$$

y la constante es independiente de  $\hbar$  en el límite  $\hbar \rightarrow 0$ .

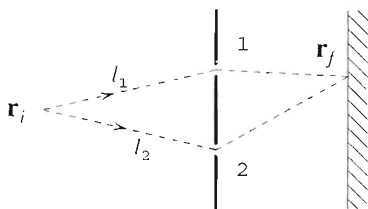
La ecuación (10.4.4) se reconoce como el primer término del desarrollo WKB, ecuación (8.3.4). Integrando explícitamente el término en  $F$ , con la forma de  $F$  dada en (10.4.3b), obtendríamos la constante en (10.4.4) y siguiendo con el desarrollo (10.4.3b) tantos términos como quisiéramos. Este método es válido cuando hay solución,  $\mathbf{r}_{cl}$ , de las ecuaciones clásicas del movimiento; en zonas prohibidas clásicamente hay que utilizar un truco similar al de la sección 8.3, pasando de  $t$  a  $it$ .

Aunque extraordinariamente intuitivo, y muy útil en estudios formales de teoría de campos cuánticos, el formalismo de integrales de caminos es mucho más difícil de utilizar que el basado en la ecuación de Schrödinger, y por ello lo abandonamos aquí.

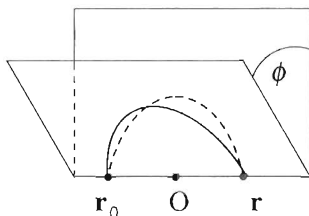
## PROBLEMAS

P.10.1. Evaluar, en el formalismo de integral de caminos, el propagador  $D$  para un oscilador armónico en una dimensión

P.10.2. Adaptar la aproximación semiclásica al caso en que A) Hay más de una trayectoria clásica que va de  $\mathbf{r}_0$  a  $\mathbf{r}$ . En concreto, considérese el caso de dos rendijas de Young, como en la primera figura; y B) Al caso en que hay un continuo de trayectorias posibles, por ejemplo, un potencial central con  $\mathbf{r}_0$  y  $\mathbf{r}$  alineadas una con otra y con el centro de potencial,  $O$ , como en la segunda figura.



*Solución.* En el primer caso, ver P.8.1. En el segundo, consideremos los planos que pasan por la línea  $\mathbf{r}_0\mathbf{O}\mathbf{r}$ . Los podemos parametrizar por el ángulo  $\phi$  que forman con un plano fijo. Cada trayectoria clásica se realiza en uno de estos planos, y la existencia de varias trayectorias posibles se debe a la simetría con respecto a rotaciones alrededor de la línea  $\mathbf{r}_0\mathbf{O}\mathbf{r}$ . Podemos entonces caracterizar la posición de la partícula no por las componentes cartesianas,  $\mathbf{r} = r_j$ ,  $j = 1, 2, 3$  sino por las  $\phi, \rho$  donde  $\rho$  es un vector de *dos* componentes en el plano de ángulo  $\phi$ . Debido a la invariancia bajo rotaciones alrededor de la línea  $\mathbf{r}_0\mathbf{O}\mathbf{r}$ ,  $D_T(\rho_0, \phi \rightarrow \rho, \pi)$  no puede depender de  $\phi$  y basta con repetir el análisis como si tratáramos con el movimiento de una partícula en un plano.



## CAPÍTULO 11.

# Teoría de perturbaciones y aproximaciones

### 11.1. Perturbaciones de niveles no degenerados. Oscilador anarmónico

Hay muy pocos casos en los que la ecuación de Schrödinger puede resolverse exactamente; pero hay, por otra parte, muchas situaciones en las que el hamiltoniano puede descomponerse en dos trozos,

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \lambda\hat{H}_1, \quad (11.1.1)$$

tales que la ecuación de Schrödinger puede resolverse exactamente para  $\hat{H}^{(0)}$  y la corrección (*perturbación*)  $\lambda\hat{H}_1$  es suficientemente pequeña para que tenga sentido buscar soluciones desarrollando en potencias de  $\lambda$ . Nótese que la situación es muy distinta de la del método WKB; ahora el problema, incluso a orden cero, es completamente cuántico.

#### 11.1.1. Espectro discreto y no-degenerado

Comenzaremos por el caso más sencillo en el que  $\hat{H}^{(0)}$  (al que se llama *hamiltoniano no-perturbado*) tiene espectro discreto no-degenerado; esto es, la ecuación

$$\hat{H}^{(0)}|\psi_i^{(0)}\rangle = E_i^{(0)}|\psi_i^{(0)}\rangle \quad (11.1.2)$$

tiene solución única para cada  $E_i^{(0)}$  salvo, por supuesto, la inevitable constante arbitraria. Suponemos que el espectro de  $\hat{H}$  es también discreto y no-degenerado; de lo contrario, la serie perturbativa no tendría sentido.<sup>1</sup>

Buscamos soluciones de la *ecuación perturbada*

$$\hat{H}|\psi_i(\lambda)\rangle = E_i(\lambda)|\psi_i(\lambda)\rangle. \quad (11.1.3)$$

Para ello, desarrollamos los estados  $|\psi_i(\lambda)\rangle$  en la base formada por los estados sin perturbar,  $|\psi_k^{(0)}\rangle$ , que suponemos ortonormalizados:

$$\langle\psi_k^{(0)}|\psi_{k'}^{(0)}\rangle = \delta_{kk'}.$$

Escribimos pues,

$$|\psi_i(\lambda)\rangle = \sum_k c_{ik}(\lambda)|\psi_k^{(0)}\rangle. \quad (11.1.4)$$

---

<sup>1</sup> La teoría de perturbaciones que presentamos aquí se debe a Rayleigh y Schrödinger.

Sustituyendo en (11.1.3) y usando (11.1.2),

$$\sum_k c_{ik}(\lambda) \left( E_k^{(0)} + \lambda \hat{H}_1 \right) |\psi_k^{(0)}\rangle = E_i(\lambda) \sum_k c_{ik} |\psi_k^{(0)}\rangle.$$

Multiplicando escalarmente por  $\langle \psi_j^{(0)} |$ ,

$$E_i(\lambda) c_{ij}(\lambda) = E_j^{(0)} c_{ij}(\lambda) + \lambda \sum_k c_{ik}(\lambda) \langle \psi_j^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_k^{(0)} \rangle, \quad (11.1.5a)$$

o, definiendo los elementos de matriz  $u_{jk}$ ,

$$\left\{ E_i(\lambda) - E_j^{(0)} \right\} c_{ij}(\lambda) = \lambda \sum_k u_{jk} c_{ik}(\lambda), \quad u_{jk} = \langle \psi_j^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_k^{(0)} \rangle. \quad (11.1.5b)$$

Las (11.1.5) forman un conjunto de ecuaciones lineales para las  $c_{jk}$ ; un método de solución podría ser truncar las sumas  $\sum_k$ , en general infinitas, y calcular con un ordenador. Aquí vamos a utilizar un procedimiento distinto; consideramos  $\lambda$  pequeño y obtenemos la solución desarrollando en potencias de  $\lambda$ :

$$\begin{aligned} E_i(\lambda) &= E_i^{(0)} + \lambda E_i^{(1)} + \cdots + \lambda^n E_i^{(n)} + \cdots, \\ c_{ik}(\lambda) &= \delta_{ik} + \lambda c_{ik}^{(1)} + \lambda^2 \cdots + c_{ik}^{(n)} + \cdots; \\ |\bar{\psi}_i(\lambda)\rangle &= |\psi_i^{(0)}\rangle + |\psi_i^{(1)}\rangle + \cdots + |\psi_i^{(n)}\rangle + \cdots. \end{aligned} \quad (11.1.6a)$$

Está claro que  $c_{ik}^{(0)} = \delta_{ik}$  ya que para  $\lambda = 0$  tenemos que recobrar la solución no-perturbada. Un punto sutil que hay que tener en cuenta es el de la *normalización*; las ecuaciones (11.1.6a) no nos fijan la normalización de los estados perturbados. Para hacerlo es conveniente, en primer lugar, requerir la condición

$$\langle \bar{\psi}_i | \psi_i^{(0)} \rangle = 1 \quad (11.1.6b)$$

y pedir que sea válida al orden en el que estemos trabajando. Es importante darse cuenta que esto *no* produce una  $|\bar{\psi}_i\rangle$  normalizada a la unidad; para obtener una solución normalizada, debemos todavía dividir por la norma de este estado para obtener, a orden  $n$ ,

$$|\psi_i\rangle_n \equiv \frac{|\psi_i^{(0)}\rangle + |\psi_i^{(1)}\rangle + \cdots + |\psi_i^{(n)}\rangle}{\| |\psi_i^{(0)}\rangle + |\psi_i^{(1)}\rangle + \cdots + |\psi_i^{(n)}\rangle \|}; \quad {}_n\langle \psi_i | \psi_i \rangle_n = 1. \quad (11.1.6c)$$

Además, fijamos la fase (que aún es arbitraria) de tal manera que las constantes diagonales sean reales:

$$\text{Im } c_{ii}(\lambda) = 0, \quad \text{para todo } i. \quad (11.1.6d)$$

Comencemos al primer orden no trivial. (11.2.6c) junto con la condición de normalización nos dicen que

$$\delta_{ik} = {}_1\langle \psi_i | \psi_i \rangle_1 = \delta_{ik} + \lambda \left( c_{ik}^{(1)} + c_{ik}^{(1)*} \right), \quad i \neq k;$$

para  $i = k$  esto implica  $\operatorname{Re} c_{ii}^{(1)} = 0$  luego, como lo hemos escogido sin parte imaginaria, resulta que se anula. Añadiendo también lo que se obtiene para  $i \neq k$  tenemos

$$c_{ii}^{(1)} = 0; \quad c_{ik}^{(1)} = -c_{ki}^{(1)*}, \quad k \neq i. \quad (11.1.7)$$

Pasemos ahora a (11.1.5), a orden  $\lambda$ :

$$\delta_{ij} E_i^{(1)} + \left( E_i^{(0)} - E_j^{(0)} \right) c_{ij}^{(1)} = u_{ji}.$$

Por tanto,

$$E_i^{(1)} = u_{ii}, \quad E_i = E_i^{(0)} + E_i^{(1)} = E_i^{(0)} + \langle \psi_i^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_i^{(0)} \rangle + O(\lambda^2), \quad (11.1.8)$$

y, para  $i \neq j$ , las  $c$  que nos faltaban:

$$c_{ij}^{(1)} = \frac{u_{ji}}{E_i^{(0)} - E_j^{(0)}}, \quad i \neq j. \quad (11.1.9a)$$

Por tanto,

$$|\psi_i\rangle = |\psi_i^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{j \neq i} \frac{\langle \psi_j^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_i^{(0)} \rangle}{E_i^{(0)} - E_j^{(0)}} |\psi_j^{(0)}\rangle + O(\lambda^2). \quad (11.1.9b)$$

En particular, estas ecuaciones nos dicen que la aproximación tiene sentido si

$$|\lambda u_{ki}| \ll |E_i^{(0)} - E_k^{(0)}|, \quad k \neq i \quad (11.1.10a)$$

y, además,

$$|\lambda u_{ii}| \ll |E_i^{(0)} - E_{i-1}^{(0)}|, |E_{i+1}^{(0)} - E_i^{(0)}|. \quad (11.1.10b)$$

Los cálculos a órdenes elevados los veremos más adelante.

### 11.1.2. Espectro continuo no-degenerado

La extensión al caso continuo no presenta dificultades. Lo único que requiere aclaración es en qué se convierten sumas como  $\sum_{j \neq i}$ . Claramente, si hacemos  $i \rightarrow \mu$ ,  $j \rightarrow \nu$  con  $\mu, \nu$  índices continuos, entonces

$$\sum_{j \neq i} = \sum_{j=1}^{i-1} + \sum_{j=i+1} \rightarrow \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \int^{\mu-\epsilon} d\nu + \int_{\mu+\epsilon} d\nu \right\} \equiv \text{P.P.} \int d\nu.$$

Por tanto con

$$\hat{H}^{(0)} |\psi_\nu^{(0)}\rangle = E_\nu^{(0)} |\psi_\nu^{(0)}\rangle, \quad \langle \psi_\mu^{(0)} | \psi_\nu^{(0)} \rangle = \delta(\mu - \nu)$$

y

$$\hat{H} |\psi_\nu\rangle = E_\nu |\psi_\nu\rangle, \quad \langle \psi_\mu | \psi_\nu \rangle = \delta(\mu - \nu)$$

tenemos

$$\begin{aligned} E_\nu &= E_\nu^{(0)} + \lambda \langle \psi_\nu^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_\nu^{(0)} \rangle + O(\lambda^2), \\ |\psi_\nu\rangle &= |\psi_\nu^{(0)}\rangle + \lambda \text{P.P.} \int d\mu \frac{1}{E_\nu^{(0)} - E_\mu^{(0)}} |\psi_\mu^{(0)}\rangle \langle \psi_\mu^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_\nu^{(0)} \rangle + O(\lambda^2). \end{aligned} \quad (11.1.11)$$

### 11.1.3. Espectro discreto no-degenerado: solución a orden arbitrario

Tomamos el caso de un espectro discreto para fijar ideas. El operador  $|\psi_i^{(0)}\rangle\langle\psi_i^{(0)}|$  proyecta sobre el vector  $|\psi_i^{(0)}\rangle$ . En efecto, si  $|\psi\rangle$  es un vector arbitrario con

$$|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\psi_i^{(0)}\rangle$$

entonces

$$\left(|\psi_i^{(0)}\rangle\langle\psi_i^{(0)}|\right) |\psi\rangle = \alpha_i |\psi_i^{(0)}\rangle.$$

Además,

$$\left(|\psi_i^{(0)}\rangle\langle\psi_i^{(0)}|\right)^2 = |\psi_i^{(0)}\rangle\langle\psi_i^{(0)}|.$$

Consideramos ahora el operador

$$\hat{N}_i = 1 - |\psi_i^{(0)}\rangle\langle\psi_i^{(0)}|; \quad \hat{N}_i^2 = \hat{N}_i = \hat{N}_i^\dagger. \quad (11.1.12)$$

$\hat{N}_i$  proyecta sobre el subespacio ortogonal al vector  $|\psi_i^{(0)}\rangle$ . Ambos operadores,  $|\psi_i^{(0)}\rangle\langle\psi_i^{(0)}|$  y  $\hat{N}_i$  conmutan con el hamiltoniano no perturbado  $\hat{H}^{(0)}$  y por tanto tenemos, en particular,

$$\frac{1}{E_i^{(0)} - \hat{H}^{(0)}} \hat{N}_i = \hat{N}_i \frac{1}{E_i^{(0)} - \hat{H}^{(0)}} \hat{N}_i.$$

Utilizando esto podemos reescribir (11.1.9b) como

$$|\psi_i\rangle = |\psi_i^{(0)}\rangle + \frac{1}{E_i^{(0)} - \hat{H}^{(0)}} \hat{N}_i \lambda \hat{H}_1 |\psi_i^{(0)}\rangle + O(\lambda^2),$$

lo que sugiere la generalización del método perturbativo a un orden arbitrario. En efecto, trabajando por iteración no es difícil de comprobar que se tiene

$$|\bar{\psi}_i^{(n)}\rangle = \frac{1}{E_i^{(0)} - \hat{H}^{(0)}} \hat{N}_i \left\{ \lambda \hat{H}_1 |\bar{\psi}_i^{(n-1)}\rangle - \sum_{n'=1}^{n-1} E_i^{(n')} |\bar{\psi}_i^{(n-n')}\rangle \right\} \quad (11.1.13a)$$

y, además,

$$E_i^{(n)} = \langle\psi_i^{(0)}|\lambda\hat{H}_1|\bar{\psi}_i^{(n-1)}\rangle. \quad (11.1.13b)$$

Recordamos que las  $|\bar{\psi}_i^{(n)}\rangle$  no están normalizadas; vectores estado normalizados se obtienen como en (11.1.6c).



## 11.1.4. Oscilador anarmónico

Como una primera aplicación consideramos el caso del *oscilador anarmónico*, con potencial (en una dimensión)

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2\hat{Q}^2 + \lambda\hat{Q}^4.$$

Para resolverlo, suponemos que  $|\lambda| \ll 1$ ; tomamos al hamiltoniano del oscilador armónico ordinario como el no-perturbado,

$$\hat{H}^{(0)} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 = \frac{1}{2}m\omega^2\hat{Q}^2$$

y al término

$$\lambda\hat{H}_1 = \lambda\hat{Q}^4$$

como la perturbación. Para resolver el problema es conveniente utilizar el método algebraico. Escribimos

$$\hat{Q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger).$$

Utilizando las relaciones de conmutación de creadores y aniquiladores podemos escribir  $\hat{Q}^4$  con todos los creadores a la izquierda de los aniquiladores:

$$\begin{aligned} \hat{Q}^4 &= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \\ &\times \left\{ \hat{a}^4 + (\hat{a}^\dagger)^4 + 6(\hat{a}^\dagger)^2\hat{a}^2 + 4\hat{a}^\dagger\hat{a}^3 + 4(\hat{a}^\dagger)^3\hat{a} + 12\hat{a}^\dagger\hat{a} + 6\hat{a}^2 + 6(\hat{a}^\dagger)^2 + 3 \right\}. \end{aligned} \quad (11.1.14)$$

EJERCICIO: Comprobarlo, y comprobar que

$$\hat{Q}^3 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \left\{ \hat{a}^3 + (\hat{a}^\dagger)^3 + 3\hat{a}^\dagger\hat{a}^2 + 3(\hat{a}^\dagger)^3\hat{a} + 3\hat{a} + 3\hat{a}^\dagger \right\} \bullet$$

A esta manera de escribir productos de creadores y aniquiladores, con todos los creadores a la izquierda, se la conoce como *producto normal* o *producto de Wick*. En la forma (11.1.14) es sencillo evaluar diversas cantidades para la perturbación anarmónica. Por ejemplo, para el desplazamiento de energía del nivel  $n$  a primer orden tenemos

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \lambda \hat{Q}^4 | \psi_n^{(0)} \rangle = \lambda \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \langle \psi_n^{(0)} | \left\{ 6(\hat{a}^\dagger)^2\hat{a}^2 + 12\hat{a}^\dagger\hat{a} + 3 \right\} | \psi_n^{(0)} \rangle.$$

En efecto, los términos con distinto número de creadores y aniquiladores dan cero. Teniendo en cuenta además que

$$|\psi_n^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |\psi_0^{(0)}\rangle, \quad \hat{a}^k (\hat{a}^\dagger)^n |\psi_0^{(0)}\rangle = \frac{n!}{(n-k)!} (\hat{a}^\dagger)^{n-k} |\psi_0^{(0)}\rangle$$

obtenemos

$$\langle \psi_n^{(0)} | \hat{Q}^4 | \psi_n^{(0)} \rangle = \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 (6n^2 + 6n + 3). \quad (11.1.15)$$

La corrección crece como  $n^2$ , luego la aproximación falla para niveles elevados. Esto se puede entender físicamente porque, para  $n$  grande,  $(\Delta Q)_{\psi_n^{(0)}}$  es grande, luego la aproximación de despreciar  $\langle \hat{Q}^4 \rangle$  frente a  $\langle \hat{Q}^2 \rangle$  tiene que fallar.

EXERCICIO: Demostrar que

$$(\Delta Q)_{\psi_n^{(0)}}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (2n + 1) \quad \bullet$$

## 11.2. Perturbaciones de un espectro degenerado

Vamos a considerar ahora el caso en el que el espectro de  $\hat{H}^{(0)}$  es degenerado; esto es, para cada  $E_i^{(0)}$  tenemos  $J$  estados linealmente independientes,

$$\hat{H}^{(0)} |\psi_{i\alpha}^{(0)}\rangle = E_i^{(0)} |\psi_{i\alpha}^{(0)}\rangle, \quad \alpha = 1, 2, \dots, J. \quad (11.2.1)$$

Resolveremos únicamente el caso de espectro discreto. Siempre podemos escoger las  $|\psi_{i\alpha}^{(0)}\rangle$  de manera que sean ortogonales,

$$\langle \psi_{j\beta}^{(0)} | \psi_{i\alpha}^{(0)} \rangle = \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta}. \quad (11.2.2)$$

La situación ahora es más complicada que en el caso no-degenerado por el siguiente motivo. Supongamos que las  $|\psi_{i\alpha}(\lambda)\rangle$  son los autoestados del hamiltoniano perturbado,  $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \lambda \hat{H}_1$ :

$$\hat{H} |\psi_{i\alpha}(\lambda)\rangle = E_{i\alpha}(\lambda) |\psi_{i\alpha}(\lambda)\rangle. \quad (11.2.3)$$

(Nótese que no hay razón para que el espectro de  $\hat{H}$  sea tan degenerado como el de  $\hat{H}^{(0)}$ ; en general, al añadir la perturbación, la degeneración del espectro desaparece total o parcialmente). Si ahora tomamos el límite  $\lambda \rightarrow 0$ , tenemos  $E_{i\alpha}(\lambda) \rightarrow E_i^{(0)}$  y las  $|\psi_{i\alpha}(\lambda)\rangle$  tienden a soluciones de la ecuación de Schrödinger no perturbada. Escribimos

$$|\tilde{\psi}_{i\alpha}^{(0)}\rangle \equiv \lim_{\lambda \rightarrow 0} |\psi_{i\alpha}(\lambda)\rangle. \quad (11.2.4)$$

Como no conocemos la solución del problema perturbado no podemos saber, a priori, cuáles son las  $|\tilde{\psi}_{i\alpha}^{(0)}\rangle$ . Si las desarrollamos en nuestra base, (11.2.1),

$$|\tilde{\psi}_{i\alpha}^{(0)}\rangle = \sum_{\beta=1}^J s_{i\alpha\beta} |\psi_{i\beta}^{(0)}\rangle, \quad (11.2.5)$$

tenemos que tratar las  $s_{i\alpha\beta}$  también como incógnitas. Si escribimos

$$|\psi_{i\alpha}(\lambda)\rangle = \sum_{\beta} \sum_k c_{ik,\alpha\beta}(\lambda) |\tilde{\psi}_{i\alpha}^{(0)}\rangle, \quad (11.2.6a)$$

y desarrollamos en potencias de  $\lambda$ , el primer término (que corresponde a  $\lambda = 0$ ) tiene que ser una delta, debido a la condición (11.2.4):

$$c_{ik,\alpha\beta}(\lambda) = \delta_{ik}\delta_{\alpha\beta} + \lambda c_{ik,\alpha\beta}^{(1)}(\lambda) + \dots \quad (11.2.6b)$$

Esta condición nos va a permitir encontrar simultáneamente las  $c$  y las  $s$ . Escribiendo

$$E_{i\alpha}(\lambda) = E_i^{(0)} + \lambda E_{i\alpha}^{(1)} + \dots \quad (11.2.7)$$

y procediendo como en el caso no degenerado, esto es, sustituyendo (11.2.7), (11.2.6) en (11.2.3) y tomando el producto escalar con  $\langle \tilde{\psi}_{j\gamma}^{(0)} |$ , obtenemos una ecuación que, a orden  $\lambda^0$  se satisface trivialmente; y, a orden  $\lambda$ , la condición

$$(E_i^{(0)} - E_j^{(0)})c_{ij,\alpha\gamma}^{(1)} = \langle \tilde{\psi}_{j\gamma}^{(0)} | \hat{H}_1 | \tilde{\psi}_{i\alpha}^{(0)} \rangle - E_{i\alpha}^{(1)} \delta_{ij} \delta_{\alpha\gamma}. \quad (11.2.8)$$

De aquí, y para  $i = j$ ,  $\alpha = \gamma$ ,

$$E_{i\alpha}^{(1)} = \langle \tilde{\psi}_{i\alpha}^{(0)} | \hat{H}_1 | \tilde{\psi}_{i\alpha}^{(0)} \rangle; \quad (11.2.9)$$

para  $i \neq j$ ,

$$c_{ij,\alpha\gamma}^{(1)} = \frac{\langle \tilde{\psi}_{j\gamma}^{(0)} | \hat{H}_1 | \tilde{\psi}_{i\alpha}^{(0)} \rangle}{E_i^{(0)} - E_j^{(0)}}, \quad i \neq j \quad (11.2.10a)$$

La condición de normalización nos permite demostrar, como en el caso no degenerado que

$$c_{ii,\alpha\gamma}^{(1)} = 0. \quad (11.2.10b)$$

Sólo nos falta encontrar las  $s$ . Para ello es conveniente utilizar notación matricial. Definimos las matrices  $\tilde{U}_i$ ,  $U_i$  con elementos  $\tilde{u}_{i\gamma\alpha}$ ,  $u_{i\gamma\alpha}$ :

$$\begin{aligned} \tilde{U}_i &= (\tilde{u}_{i\gamma\alpha}), & \tilde{u}_{i\gamma\alpha} &= \langle \tilde{\psi}_{i\gamma}^{(0)} | \hat{H}_1 | \tilde{\psi}_{i\alpha}^{(0)} \rangle; \\ U_i &= (u_{i\gamma\alpha}), & u_{i\gamma\alpha} &= \langle \psi_{i\gamma}^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_{i\alpha}^{(0)} \rangle, \end{aligned}$$

y la matriz diagonal

$$E_i^{(1)} = (E_{i\gamma\alpha}^{(1)}); \quad E_{i\gamma\alpha}^{(1)} = E_{i\alpha}^{(1)} \delta_{\gamma\alpha}.$$

La ecuación (11.2.8) para  $i = j$  nos da

$$E_i^{(1)} = \tilde{U}_i; \quad (11.2.11)$$

en la base  $|\tilde{\psi}_i^{(0)}\rangle$   $\tilde{U}_i$  es diagonal. Finalmente, definimos la matriz  $S_i = (s_{i\gamma\alpha})$ . Sustituyendo (11.2.5) en (11.2.11) nos queda

$$S_i^\dagger U_i S_i = \tilde{U}_i = E_i^{(1)}. \quad (11.2.12)$$

Teniendo en cuenta que  $S_i$  nos pasa de una base ortonormal, la  $|\psi_i^{(0)}\rangle$ , a otra también ortonormal, la  $|\tilde{\psi}_i^{(0)}\rangle$ , tiene que ser unitaria:

$$S_i^\dagger = S_i^{-1}.$$

Por tanto, (11.2.12) nos indica que las  $s_{i\gamma\alpha}$  no son sino los elementos de la matriz unitaria que diagonaliza a la matriz conocida,  $U_i$ .

De (11.2.12) y (11.2.11) podemos dar una fórmula que nos proporciona *directamente* los desplazamientos de las energías,  $E_{i\alpha}^{(1)}$ . En efecto, estas cantidades son los valores propios de la matriz  $\tilde{U}_i$ , que coinciden con los de la matriz conocida  $U_i$ . Por tanto son las soluciones de la ecuación

$$\det(U_i - E_i^{(1)}I) = 0, \quad (11.2.13)$$

donde  $I$  es la matriz unidad. Por razones históricas se conoce a la ecuación (11.2.13) como *ecuación secular*.

### 11.3. Perturbaciones dependientes del tiempo

El caso que vamos a considerar ahora es el de perturbaciones que dependen del tiempo:  $\hat{H}_1 = \hat{H}_1(t)$ . Supondremos, sin embargo, que el hamiltoniano no perturbado  $\hat{H}^{(0)}$  es independiente del tiempo. Puesto que en este caso el hamiltoniano total  $\hat{H}(t)$  depende del tiempo, no tendremos estados estacionarios.

Considerando que el espectro de  $\hat{H}^{(0)}$  es discreto y no degenerado podemos escribir

$$\hat{H}^{(0)}\psi_n^{(0)} = E_n\psi_n^{(0)}; \quad \Psi_n^{(0)}(t) = e^{-it\omega_n}\psi_n^{(0)}, \quad (11.3.1a)$$

y hemos definido  $\omega_n = E_n/\hbar$ . Suponemos las  $\psi_n^{(0)}$  normalizadas,

$$\langle \psi_n^{(0)} | \psi_k^{(0)} \rangle = \delta_{nk}. \quad (11.3.1b)$$

Buscamos ahora las soluciones de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo,

$$i\hbar\partial_t\Psi(t) = \left\{ \hat{H}^{(0)} + \lambda\hat{H}_1(t) \right\} \Psi(t). \quad (11.3.2)$$

Una manera de solucionar el problema es el llamado *método de variación de las constantes*, introducido para ecuaciones diferenciales por Lagrange y, en nuestro caso, por Dirac. Escribimos

$$\Psi(t) = \sum_n \alpha_n(t)\Psi_n^{(0)}(t),$$

$\Psi_n^{(0)}(t)$  dado por (11.3.1a), con lo que (11.3.2) se convierte en

$$i\hbar \sum_n \Psi_n^{(0)}(t) \frac{d\alpha_n(t)}{dt} = \lambda \sum_n \alpha_n(t) \hat{H}_1 \Psi_n^{(0)}(t). \quad (11.3.3)$$

Tomando el producto escalar con  $\Psi_k^{(0)}$  tenemos la ecuación diferencial

$$i\hbar \frac{d\alpha_k(t)}{dt} = \lambda \sum_n u_{kn}(t) \alpha_n(t) \quad (11.3.4a)$$

donde

$$u_{kn}(t) \equiv \langle \Psi_k^{(0)}(t) | \hat{H}_1(t) | \Psi_n^{(0)}(t) \rangle = e^{i(\omega_k - \omega_n)t} \langle \psi_k^{(0)} | \hat{H}_1(t) | \psi_n^{(0)} \rangle. \quad (11.3.4b)$$

Consideramos especialmente el caso en el que la perturbación se introduce en un instante de tiempo dado, que podemos tomar como el origen  $t = 0$ . Es decir, suponemos que  $\hat{H}_1(t) = 0$  para  $t \leq 0$ . Si, en este instante de tiempo, el sistema está en un estado con función de onda  $\Psi_j^{(0)}$ , entonces, para  $\lambda = 0$  tendremos  $\alpha_n(t)|_{\lambda=0} = \delta_{nj}$ . Por tanto,

$$\alpha_n(t) = \delta_{nj} + \lambda \alpha_n^{(1)}(t) + O(\lambda^2)$$

y (11.3.4a) nos queda, a orden  $\lambda$ ,  $i\hbar d\alpha_k^{(1)}(t)/dt = u_{kj}(t)$ , con solución

$$\alpha_k^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' u_{kj}(t'). \quad (11.3.5)$$

Este método de “variación de las constantes” está íntimamente relacionado con la representación de Dirac (sec. 9.5), reemplazando al operador que allí llamábamos  $\hat{H}^{(1)}(t)$  por  $\lambda \hat{H}_1(t)$ . Manteniendo la hipótesis  $\hat{H}_1(0) = 0$  tenemos, obviamente,

$$|\Psi(t)\rangle_D = \hat{U}_D(t, 0) |\Psi_j^{(0)}(0)\rangle_D$$

y  $\hat{U}_D(t, 0)$  viene dado por lo equivalente a (9.5.11),

$$\hat{U}_D(t, 0) = \sum_{N=0}^{\infty} \left( \frac{-i\lambda}{\hbar} \right)^N \int_0^t dt_1 \dots \int_0^{t_{N-1}} dt_N \hat{H}_{1D}(t_1) \dots \hat{H}_{1D}(t_N). \quad (11.3.6)$$

A orden  $\lambda$ ,

$$|\Psi(t)\rangle_D = |\Psi_j^{(0)}(0)\rangle_D + \frac{-i\lambda}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{H}_{1D}(t') |\Psi_j^{(0)}(0)\rangle_D + O(\lambda^2). \quad (11.3.7a)$$

Recordando que

$$\hat{H}_{1D}(t) = e^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar} \hat{H}_1(t) e^{-i\hat{H}^{(0)}t/\hbar} \quad (11.3.7b)$$

y tomando el producto escalar por  ${}_D\langle \Psi_k^{(0)}(0) |$  podemos comprobar que las ecuaciones (11.3.7) reproducen el resultado ya obtenido en (11.3.5). El interés del método dado en (11.3.6) es lo sencillo que es, al menos en principio, ir a cualquier orden en  $\lambda$ .

## 11.4. Transiciones bajo la influencia de una perturbación. Desintegraciones. Relación de incertidumbre tiempo-energía

### 11.4.1. Transiciones debidas a una perturbación

Consideremos un sistema cuántico gobernado por el hamiltoniano  $\hat{H}^{(0)}$ , independiente del tiempo. En el instante de tiempo  $t = -T/2$  le aplicamos la perturbación  $\lambda\hat{H}_1(t)$ . En el instante  $t = +T/2$  dejamos de aplicar la perturbación. En el instante  $t = -T/2$  suponemos el sistema en un estado estacionario del hamiltoniano no-perturbado (*estado inicial*),  $|\Psi_i^{(0)}\rangle$ ,

$$\hat{H}^{(0)}|\Psi_i^{(0)}\rangle = E_i|\Psi_i^{(0)}\rangle; \quad (11.4.1)$$

queremos calcular la probabilidad de que, cuando dejamos de aplicar la perturbación (esto es, para  $t = T/2$ ) el sistema haya evolucionado a un *estado final*  $|\Psi_f^{(0)}\rangle$ , también estacionario:

$$\hat{H}^{(0)}|\Psi_f^{(0)}\rangle = E_f|\Psi_f^{(0)}\rangle. \quad (11.4.2)$$

Denotamos por  $\mathcal{T}(i \rightarrow f)$  a la amplitud de probabilidad de tal transición. Evidentemente, y suponiendo a los  $|\Psi_{i,f}^{(0)}\rangle$  normalizados a la unidad,

$$\mathcal{T}(i \rightarrow f) = \langle\Psi_f^{(0)}|\hat{U}(T/2, -T/2)|\Psi_i^{(0)}\rangle \quad (11.4.3a)$$

y la probabilidad es

$$W(i \rightarrow f) = |\mathcal{T}(i \rightarrow f)|^2. \quad (11.4.3b)$$

A orden  $\lambda$ , y para  $i \neq f$ , podemos utilizar (11.3.7) para encontrar

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(i \rightarrow f) &= \frac{-i\lambda}{\hbar} \int_{-T/2}^{T/2} dt \langle\Psi_f^{(0)}|\hat{H}_{1D}(t)|\Psi_i^{(0)}\rangle \\ &= \frac{-i\lambda}{\hbar} \int_{-T/2}^{T/2} dt e^{i(E_f - E_i)t/\hbar} \langle\psi_f^{(0)}|\hat{H}_1(t)|\psi_i^{(0)}\rangle. \end{aligned} \quad (11.4.4)$$

Como un ejemplo importante, consideramos el caso de un *oscilador armónico forzado*. Aquí,

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(0)} &= \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1/2), \\ \lambda\hat{H}_1(t) &= f(t)\hat{Q} = f(t)\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \\ f(t) &= 0 \quad \text{para } t \leq -T/2, \text{ y } t \geq +T/2. \end{aligned}$$

La amplitud de probabilidad de transición del nivel  $n_i$  al  $n_f$  en el tiempo  $T$  es

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(i \rightarrow f) &= \frac{-i}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \langle \psi_{n_f}^{(0)} | (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) | \psi_{n_i}^{(0)} \rangle \int_{-T/2}^{+T/2} dt e^{i(n_f - n_i)\omega t} f(t) \\ &= \frac{-iK(T)}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \{ \delta_{n_f+1, n_i} \sqrt{n_i} + \delta_{n_i+1, n_f} \sqrt{n_f} \} \end{aligned}$$

donde

$$K(T) = \int_{-T/2}^{+T/2} dt e^{i(n_f - n_i)\omega t} f(t).$$

A primer orden sólo hay transiciones entre niveles consecutivos.

#### 11.4.2. Desintegraciones. Relación de incertidumbre tiempo-energía

Consideramos ahora la importante aplicación de teoría de perturbaciones al estudio de desintegraciones. Aquí tenemos un sistema (por ejemplo, un oscilador armónico en un estado excitado) que se desintegra en dos o más sistemas; en el ejemplo, en el oscilador, en el estado fundamental más un fotón. Denotamos por  $|i\rangle$  al estado inicial, y queremos evaluar la probabilidad de que se desintegre produciendo el estado final  $|f\rangle$ . Descomponemos el hamiltoniano del sistema en dos piezas:  $\hat{H}^{(0)}$ , del que son estados propios  $|i\rangle$ ,  $|f\rangle$ , a los que suponemos ortogonales entre sí; y un trozo,  $\hat{H}_I$  que conecta  $|i\rangle$  con  $|f\rangle$ , esto es, tal que el elemento de matriz

$$\langle f | \hat{H}_I | i \rangle \equiv h_{fi}$$

no se anula.<sup>2</sup> En el instante de tiempo  $t = -T/2$  preparamos el sistema en el estado  $|i\rangle$ . Como  $|i\rangle$  no es un estado propio del hamiltoniano total,  $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}_I$ , al evolucionar con el tiempo habrá una probabilidad de que acabe en el estado  $|f\rangle$ , esto es, que se desintegre. La amplitud de probabilidad de que el estado no se desintegre en el tiempo  $T$  es

$$\mathcal{T}_T(i \rightarrow i) = \langle i | \hat{U}(T/2, -T/2) | i \rangle,$$

y la de que se desintegre en el estado  $|f\rangle$ ,

$$\mathcal{T}_T(i \rightarrow f) = \langle f | \hat{U}(T/2, -T/2) | i \rangle.$$

El cálculo de esta última es similar a los que ya hemos hecho. A primer orden en  $\hat{H}_I$ ,

$$\mathcal{T}_T(i \rightarrow f) = \frac{-i}{\hbar} \int_{-T/2}^{+T/2} dt e^{i(E_f - E_i)t/\hbar} \langle f | \hat{H}_I | i \rangle. \quad (11.4.5)$$

<sup>2</sup> Nótese que esto no es, propiamente hablando, un problema de perturbaciones dependientes del tiempo, ya que  $\hat{H}_I$  no depende de  $t$ .

Si, como estamos suponiendo,  $\hat{H}_I$  no depende de  $t$ , la integral es trivial y obtenemos

$$\mathcal{T}_T(i \rightarrow f) = -2i \langle f | \hat{H}_I | i \rangle \frac{\text{sen} \frac{(E_f - E_i)T}{2\hbar}}{E_f - E_i}; \quad (11.4.6a)$$

la probabilidad es

$$W_T(i \rightarrow f) = 4 |\langle f | \hat{H}_I | i \rangle|^2 \frac{\text{sen}^2 \frac{(E_f - E_i)T}{2\hbar}}{(E_f - E_i)^2}. \quad (11.4.6b)$$

Después volveremos a interpretar esta última fórmula; de momento acabaremos el cálculo de la desintegración. La probabilidad *total* de desintegración se obtendrá integrando a todos los estados posibles. Si  $|f\rangle$  está unívocamente determinado por su energía, que varía continuamente, y está normalizado a  $\langle f | f' \rangle = \delta(E_f - E_{f'})$ , esto quiere decir integrar a todas las energías finales posibles,<sup>3</sup>  $E_f$ :

$$W_T(i \rightarrow \text{todos los } f) = 4 \int dE_f |\langle f | \hat{H}_I | i \rangle|^2 \frac{\text{sen}^2 \frac{(E_f - E_i)T}{2\hbar}}{(E_f - E_i)^2}. \quad (11.4.7)$$

para  $T$  muy grande, el integrando sólo es apreciablemente distinto de cero cuando se cumple

$$|E_f - E_i| < \hbar/T, \quad (11.4.8)$$

luego podemos tomar como límites de integración en (11.4.7)  $-\infty$  y  $+\infty$ , con error despreciable para  $T \rightarrow \infty$ . Entonces,

$$W_T(i \rightarrow \text{todos los } f) \rightarrow 2\pi\hbar^{-1} |\langle f | \hat{H}_I | i \rangle|^2 T$$

y hemos utilizado que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\text{sen}^2 x}{x^2} = \pi.$$

Por tanto, la *probabilidad de desintegración por unidad de tiempo*,  $w(i)$ , tiene el valor

$$w(i) \equiv \frac{W_T(i \rightarrow \text{todos los } f)}{T} \xrightarrow{T \rightarrow \infty} 2\pi\hbar^{-1} |\langle f | \hat{H}_I | i \rangle|^2 : \quad (11.4.9)$$

<sup>3</sup> En sentido estricto, deberíamos excluir el estado  $|i\rangle$  de la suma a estados finales, pero el hacer esto no cambia el resultado, ya que equivale a eliminar un sólo punto de un continuo.



$w(i)$  es independiente de  $T$ , para gran  $T$ . Esto quiere decir que el número de estados  $|i\rangle$ ,  $N_i$ , decrece exponencialmente en el tiempo con una ley<sup>4</sup>

$$N_i(t) = e^{-\Gamma t/\hbar} N_i(0), \quad \Gamma = \hbar w(i) = 2\pi |\langle f | \hat{H}_I | i \rangle|^2. \quad (11.4.10)$$

Hemos obtenido que la *vida media*  $\tau_i$  del estado  $|i\rangle$  (esto es, el tiempo en el que  $N_i(\tau) = e^{-1} N_i(0)$ ) es

$$\tau_i = \hbar/\Gamma. \quad (11.4.11)$$

A  $\Gamma$  se le llama *anchura* del estado  $|i\rangle$ ; en efecto, la energía de dicho estado está indeterminada en una cantidad  $\Delta E \sim \Gamma$ .

Demostremos esta última afirmación, conocida como *relación de incertidumbre tiempo-energía*, o *relación de incertidumbre de Bohr-Heisenberg*. Para ello volvamos a la ecuación (11.4.6), que nos indica que, durante el tiempo  $T$ , el sistema “oscila” entre los estados  $|i\rangle$ ,  $|f\rangle$  con energías  $E_i$ ,  $E_f$ . Según (11.4.8), la incertidumbre en energía es, pues,

$$\Delta E \simeq |E_f - E_i| \simeq \hbar/T$$

lo que implica que, haciendo una medida que dure un tiempo  $T$  no se puede saber la energía con más precisión que  $\Delta E$ . La relación

$$T\Delta E \sim \hbar \quad (11.4.12)$$

es la expresión de la relación de incertidumbre deseada.

¿Qué ocurre con los estados estacionarios? Puesto que éstos son estables, resulta que no podemos medir su energía directamente. Para conocer la *diferencia* de energías entre dos estados, hay que excitar el sistema y dejarlo desintegrarse, midiendo por ejemplo la frecuencia de la radiación emitida en esta desintegración. En este caso es cuando se aplica (11.4.12): las energías de los estados *excitados* no están exactamente definidas; su indefinición,  $\Gamma_n$ , es inversamente proporcional a la vida media,  $\tau$ .

Vamos ahora a generalizar la ecuación (11.4.9) a los casos más usuales en los que el estado final  $|f\rangle$  es degenerado, es decir, hay más de un estado para cada valor de la energía. Concretamente, consideramos que los estados finales contienen  $F$  partículas con momentos  $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_F$ :

$$|f\rangle = |\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_F\rangle.$$

Si suponemos el estado inicial en reposo, por conservación del momento total ha de ser  $\mathbf{p}_1 + \dots + \mathbf{p}_F = 0$ , de forma que sólo los momentos  $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_{F-1}$  son independientes.

<sup>4</sup> La ley de desintegración no es exactamente exponencial sino para tiempos grandes, pero no muy grandes; para  $t \rightarrow 0$  y  $t \rightarrow \infty$  hay correcciones que el lector interesado puede encontrar en el texto de Galindo y Pascual (1978).

Volvemos ahora a (11.4.6b) que reescribimos, utilizando (11.4.5), como

$$W_T(i \rightarrow f) = \frac{1}{\hbar^2} |\langle \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_F | \hat{H}_I | i \rangle|^2 \left| \int_{-T/2}^{+T/2} dt \exp \frac{it}{\hbar} (E_f - E_i) \right|^2;$$

la probabilidad de transición para tiempos grandes la podemos escribir, pues, como

$$w(i \rightarrow f) = \frac{1}{\hbar} \lim_{T \rightarrow \infty} |\langle \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_F | \hat{H}_I | i \rangle|^2 \frac{\left| \int_{-T/2}^{+T/2} dt \exp \frac{it}{\hbar} (E_f - E_i) \right|}{T} \\ \times \left| \int_{-T/2}^{+T/2} dt \exp \frac{it}{\hbar} (E_f - E_i) \right|.$$

(cf. (11.4.9)). Si tomamos el límite  $T \rightarrow \infty$  en la segunda integral,

$$\int_{-T/2}^{+T/2} dt \exp \frac{it}{\hbar} (E_f - E_i) \rightarrow 2\pi\hbar\delta(E_f - E_i),$$

con lo que en la primera podemos poner ya  $E_f = E_i$  y tenemos

$$\int_{-T/2}^{+T/2} dt \exp \frac{it}{\hbar} (E_f - E_i) \Big|_{E_f=E_i} = T.$$

Finalmente,

$$w(i \rightarrow f) = 2\pi\hbar^{-1}\delta(E_f - E_i)|\langle \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_F | \hat{H}_I | i \rangle|^2. \quad (11.4.13a)$$

La probabilidad total de desintegración se obtiene sumando a todos los estados finales posibles. Si los  $|\mathbf{p}\rangle$  los suponemos normalizados a  $\langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$ , esta probabilidad total se obtiene integrando (11.4.13a) sobre las variables  $d^3p_1, \dots, d^3p_{F-1}$  o, más simétricamente, integrando a todos los  $d^3p$  y multiplicando por una delta de conservación de momento total. Podemos definir la probabilidad diferencial por

$$dw(i \rightarrow f) \equiv W(i \rightarrow f) \delta \left( \sum_{n=1}^F \mathbf{p}_n \right) d^3p_1 \dots d^3p_F \quad (11.4.13b)$$

con  $w(i \rightarrow f)$  dado por la ecuación (11.4.13a). Entonces, la probabilidad total de desintegración y la anchura son

$$w(i) = \int dw(i \rightarrow f) \\ = 2\pi\hbar^{-1} \int d^3p_1 \dots d^3p_F \delta \left( \sum_{n=1}^F \mathbf{p}_n \right) \delta(E_f - E_i) |\langle \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_F | \hat{H}_I | i \rangle|^2; \\ \Gamma = \hbar w(i). \quad (11.4.14)$$

Para terminar esta sección hacemos un comentario acerca de sumas sobre estados finales. Si denotamos por  $|f\rangle$  a un estado final genérico, la suma a todo  $|f\rangle$  tiene que producir la unidad. Por ejemplo, en (11.4.4) tenemos

$$|\mathcal{T}(i \rightarrow f)|^2 = |\langle f|\hat{U}|i\rangle|^2 = \langle \hat{U}i|f\rangle \langle f|\hat{U}i\rangle$$

y ha de ser  $\sum_f |\mathcal{T}(i \rightarrow f)|^2 = 1$ , lo que es cierto si

$$\sum_f |f\rangle \langle f| = 1.$$

Así, si los  $|f\rangle$  están normalizados a  $\langle f|f'\rangle = \delta_{ff'}$ , entonces la suma es la suma ordinaria. Si los  $|f\rangle$  estuvieran normalizados a  $\langle f|f'\rangle = \delta(E_f - E_{f'})$ , tendríamos  $\sum_f \rightarrow \int dE_f$ . Finalmente, para  $F$  partículas con  $\langle \mathbf{p}|\mathbf{p}'\rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$ , con momentos constreñidos por  $\sum_n \mathbf{p}_n = 0$ ,

$$\sum_f \rightarrow \int d^3p_1 \dots d^3p_F \delta(\mathbf{p}_1 + \dots + \mathbf{p}_F).$$

## 11.5. Otros métodos de aproximación: propiedad de extremo del estado fundamental; ecuación de Schrödinger en un retículo

En esta sección describimos brevemente dos métodos de aproximación, uno basado en la propiedad de extremo de los estados estacionarios y el otro en la aproximación reticular a la mecánica cuántica que introdujimos en la sec. 3.6.

### 11.5.1. Propiedad de extremo del estado fundamental

La energía del estado fundamental de un sistema goza de una importante propiedad de mínimo, a saber, la cantidad

$$\langle \psi|\hat{H}|\psi\rangle, \quad \langle \psi|\psi\rangle = 1,$$

es mínima cuando  $\psi = \psi_0$ , el vector estado fundamental. En efecto, si desarrollamos  $\psi$  en estados propios de  $\hat{H}$  normalizados a la unidad,

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n, \quad \hat{H}\psi_n = E_n \psi_n; \quad \langle \psi_n|\psi_{n'}\rangle = \delta_{nn'},$$

se tiene

$$\langle \psi|\hat{H}|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 E_n; \quad \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = 1, \quad E_0 < E_1 < \dots < E_n < \dots$$

Utilizamos el método de multiplicadores de Lagrange. Formamos la función

$$A(\alpha) = \sum E_n \alpha_n^2 + \lambda \sum (\alpha_n^2 - 1),$$

con  $\lambda$  un multiplicador y  $\alpha \equiv |c_n|$ . Las ligaduras que hemos incluido son

$$\sum_n \alpha_n^2 = 1, \quad \alpha_n \geq 0.$$

Las condiciones de mínimo son

$$\partial\Lambda/\partial\alpha_n = 0, \quad \partial^2\Lambda/\partial\alpha_n^2 \geq 0, \quad n = 0, 1, \dots$$

La primera nos dice que  $\alpha_n(E_n - \lambda) = 0$ , cuya solución son los valores  $\alpha_n^{(k)}$ ,  $\lambda^{(k)}$  con

$$\alpha_n^{(k)} = \rho\delta_{nk}, \quad \lambda^{(k)} = E_k.$$

El valor de  $\rho$  sale de la ligadura,  $\rho = 1$ . La condición de la segunda derivada nos dice que  $E_n - \lambda^{(k)} \geq 0$ , esto es,  $E_n \geq E_k$ , lo que sólo es posible si  $k = 0$ . En definitiva, el mínimo se encuentra para

$$|c_0| = 1, \quad c_n = 0 \quad (n \neq 0)$$

esto es,  $\psi = \psi_0$ .

De esta propiedad resulta que podemos aproximar  $\psi_0$ ,  $E_0$ , utilizando un conjunto  $\psi$  de funciones prueba que dependan de uno o varios parámetros, y minimizando  $\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle$  con respecto a ellos. En secciones sucesivas veremos ejemplos del método.

### 11.5.2. Ecuación de Schrödinger en un retículo

Podemos, como vimos en la sección 3.6, reemplazar la recta real por un retículo,<sup>5</sup>

$$x_n = nu, \quad n = -N, \dots, -1, 0, 1, 2, \dots, N.$$

En este caso, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo se nos convierte en

$$\frac{-\hbar^2}{2mu^2} \left\{ \psi_E(x_{n+1}) + \psi_E(x_{n-1}) - 2\psi_E(x_n) \right\} + (V(x_n) - E) \psi_E(x_n) = 0, \quad (11.5.1)$$

esto es, en  $2N + 1$  ecuaciones lineales ordinarias, fácilmente resolubles con ordenadores incluso para muy grandes valores de  $N$ . La elección del “granulado”  $u$  y de  $N$  debe hacerse de manera que, en particular, la función de onda en el continuo sea despreciable para  $|x| \gg Nu$ . Por ejemplo, para el oscilador armónico sabemos que

$$\psi_E(x) \sim \exp \frac{-m\omega x^2}{2\hbar}$$

<sup>5</sup> Trabajamos en una dimensión para simplificar la notación. Para estados ligados, la condición de contorno  $\psi_E(x_{\pm(N+1)}) = 0$  es más conveniente que las condiciones de contorno periódicas.

de forma que el error cometido por la truncación es del orden de

$$\exp \frac{-m\omega u^2 N^2}{2\hbar}$$

que tenemos que pedir sea mucho menor que la unidad.

La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo también puede resolverse por métodos similares; basta sustituir el tiempo también por un retículo,  $t_n = n\tau$ ,  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, N_T$  y reemplazar

$$\partial_t \Psi(t) \rightarrow \frac{\Psi(t_{n+1} - t_{n-1})}{2\tau}.$$

Nótese que siempre hacemos una sustitución simétrica, por ejemplo

$$d\psi(x)/dx \rightarrow \frac{\psi(x_{n+1}) - \psi(x_{n-1}))}{2u}$$

pero *no*  $d\psi(x)/dx \rightarrow [\psi(x_{n+1}) - \psi(x_n)]/u$ . La razón es que la sustitución simétrica es necesaria para preservar el carácter autoadjunto de operadores como  $\hat{P}$ .

#### PROBLEMAS

P.11.1. Dado el potencial  $V(r) = -f^2 e^{-r/b} (b/r)$  para  $r \geq 0$  y  $V(r) = \infty$  para  $r < 0$ , con  $b = 1.5$  fm (1 fm =  $10^{-13}$  cm), hallar el valor aproximado de  $f^2$  que da para el estado ligado de una partícula, de masa reducida igual a 940 veces la del electrón, el valor  $E_0 = -2.3$  MeV.

*Indicación.* Utilícense las condiciones de contorno  $\psi(0) = 0$  y  $\psi(r) \sim e^{-kr}$ ,  $r \rightarrow \infty$  para escoger las funciones prueba

$$\psi_\beta(r) = \frac{\beta^{1/2}}{\sqrt{2}} r e^{-\beta r}, \quad r > 0; \quad \psi_\beta(r) = 0, \quad r \leq 0.$$

Minimícese con respecto a  $\beta$  y pídase que el mínimo de la energía coincida con  $E_0$ .

## CAPÍTULO 12.

### Partículas idénticas

#### 12.1. El principio de indistinguibilidad. El principio de exclusión de Pauli

Supongamos que tenemos un sistema formado por dos partículas cuyas propiedades (masa, carga eléctrica, etc.) son idénticas; las denotamos por el subíndice  $a$ ,  $a = 1, 2$ . Clásicamente, el estado del sistema viene determinado dando  $\mathbf{p}_{cl,a}(t)$ ,  $\mathbf{r}_{cl,a}(t)$  para  $a = 1, 2$ . Como en mecánica clásica las partículas tienen trayectorias bien definidas, podemos seguir su movimiento y, aunque tengan propiedades idénticas, sabemos en todo instante cuál es la partícula 1 y cuál es la partícula 2.

Cuánticamente esto no es posible. Si, en el instante  $t$ , sabemos que la partícula  $a$  a la que llamamos 1 está en  $\mathbf{r}_1$  y la que llamamos 2 está en  $\mathbf{r}_2$ , sus momentos están completamente indeterminados y no podemos saber si la partícula que llegó en el tiempo  $t' > t$  a  $\mathbf{r}'$  fue la 1 o la 2. Tenemos por tanto una peculiaridad en mecánica cuántica sin análogo clásico: las partículas idénticas son *indistinguibles*.

¿Cómo se traduce esto matemáticamente? Comencemos por el caso de dos partículas. Si la función de onda es  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t)$  y las partículas son indistinguibles, un cambio de  $\mathbf{r}_1$  por  $\mathbf{r}_2$  no debe alterar el estado del sistema. Definimos el operador transposición  $\hat{U}(1 \leftrightarrow 2)$  por

$$\hat{U}(1 \leftrightarrow 2)\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) \equiv \Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; t). \quad (12.1.1)$$

Para que  $\Psi$  y  $\hat{U}\Psi$  representen el mismo estado hace falta que sean proporcionales:

$$\hat{U}(1 \leftrightarrow 2)\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) = \lambda\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t).$$

Pero está claro que  $\hat{U}^2 = 1$ ; por tanto,  $\lambda^2 = 1$  y tiene que tenerse  $\lambda = \pm 1$ . Hemos encontrado que, para partículas idénticas,

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) = \pm\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t). \quad (12.1.2)$$

Es un hecho empírico (que puede, sin embargo, demostrarse en teoría relativista) que el signo de (12.1.2) es una propiedad intrínseca de cada partícula. Podemos, pues, clasificar las partículas en dos grupos. Si el signo en (12.1.2) es (+), decimos que las partículas obedecen la estadística de *Bose-Einstein*, o que son *bosones*; como ejemplo tenemos los fotones, las partículas alfa, los átomos de hidrógeno, etc. Si el signo en (12.1.2) es (-), decimos que las partículas

obedecen la estadística de *Fermi-Dirac*, o que son *fermiones*. De este tipo son los electrones, neutrinos, quarks o el protón.

La generalización a sistemas de varias partículas es como sigue. Sea  $\Pi$  una permutación de los índices  $1, \dots, n$ , es decir,

$$\Pi : (1, \dots, n) \rightarrow (i_1, \dots, i_n). \quad (12.1.3)$$

Es sabido que una permutación se puede descomponer en producto de transposiciones,  $T$ , que cambian sólo dos índices, digamos  $\mathbf{r}_{j_1}, \mathbf{r}_{j_2} \rightarrow \mathbf{r}_{j_2}, \mathbf{r}_{j_1}$ . Esta descomposición no es única; pero si  $\delta_\Pi$  es el número de transposiciones,  $\delta_\Pi$  es siempre par o siempre impar (para una  $\Pi$  dada). A  $\delta_\Pi$  se le llama *paridad* de  $\Pi$ . Para cualquier descomposición escribimos,

$$\Pi = T_1 \cdots T_{\delta_\Pi},$$

donde las  $T$  son transposiciones. Entonces definimos, omitiendo en adelante el tiempo por comodidad,

$$\hat{U}(\Pi)\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) \equiv \Psi(\mathbf{r}_{i_1}, \dots, \mathbf{r}_{i_n}) = \hat{U}(T_1) \cdots \hat{U}(T_{\delta_\Pi})\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n). \quad (12.1.4)$$

Pero cada transposición sólo involucra a dos partículas, a las que no afecta la presencia de las demás; por tanto, podemos aplicar (12.1.2) que nos dice que, por cada transposición, la función de onda no cambia (si las partículas son bosones) o adquiere un signo  $(-)$  (si son fermiones). Según esto, tenemos un signo  $(+)$   $\delta_\Pi$  veces, o  $(-)$  también  $\delta_\Pi$  veces, en cada caso respectivo. Es decir,

$$\hat{U}(\Pi)\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \Psi(\mathbf{r}_{i_1}, \dots, \mathbf{r}_{i_n}) = \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) \quad (12.1.5)$$

si las partículas eran bosones y

$$\hat{U}(\Pi)\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \Psi(\mathbf{r}_{i_1}, \dots, \mathbf{r}_{i_n}) = (-1)^{\delta_\Pi}\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) \quad (12.1.6)$$

si eran fermiones. Resumiendo: la función de onda de varias partículas idénticas debe ser completamente simétrica (bosones) o completamente antisimétrica (fermiones).

Por supuesto, lo análogo es válido en representación de momentos:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{p}_{i_1}, \dots, \mathbf{p}_{i_n}) = \hat{\Psi}(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n) \quad (\text{bosones}); \quad (12.1.7)$$

$$\hat{\Psi}(\mathbf{p}_{i_1}, \dots, \mathbf{p}_{i_n}) = (-1)^{\delta_\Pi}\hat{\Psi}(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n) \quad (\text{fermiones}). \quad (12.1.8)$$

En el formalismo de Dirac si, por ejemplo, especificamos un sistema por los momentos, entonces

$$|\mathbf{p}_{i_1}, \dots, \mathbf{p}_{i_n}\rangle = |\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n\rangle \quad (\text{bosones}) \quad (12.1.9)$$

$$|\mathbf{p}_{i_1}, \dots, \mathbf{p}_{i_n}\rangle = (-1)^{\delta_\Pi}|\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n\rangle \quad (\text{fermiones}). \quad (12.1.10)$$

EJERCICIO: Demostrar las ecuaciones (12.1.7) a (12.1.10) •

Cuando consideramos asambleas de bosones idénticos, las consideraciones de mecánica estadística han de modificarse debido a la indistinguibilidad, lo que produce efectos observables importantes; pero más espectacular es lo que ocurre con fermiones. En efecto, si dos fermiones están en el mismo estado, permutándolos las ecuaciones (12.1.6) nos dicen que la función de ondas  $\Psi$  cambia a  $-\Psi$ . Pero, por estar los fermiones que hemos permutado en el mismo estado, la función de ondas permutada es *idéntica* a la antigua, luego obtenemos que ha de ser  $\Psi = -\Psi$ , lo que implica que  $\Psi$  es idénticamente nula. Es decir, *dos fermiones no pueden estar nunca en el mismo estado*. Éste es el llamado *principio de exclusión de Pauli*, del que en la sección 12.3 veremos una primera aplicación.

## 12.2. Funciones de onda de $n$ partículas idénticas

Consideramos ahora una asamblea de  $n$  partículas libres. Suponemos, por simplificar, que cada una de ellas está en un estado bien definido caracterizado por una función de onda,  $\Psi_a(\mathbf{r}_a)$ , de manera que las funciones de onda de las partículas de esta asamblea son  $\Psi_1(\mathbf{r}_1), \dots, \Psi_n(\mathbf{r}_n)$  (continuamos omitiendo el tiempo). Si las partículas son distinguibles, la función de onda del sistema será, simplemente,

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \Psi_1(\mathbf{r}_1) \dots \Psi_n(\mathbf{r}_n). \quad (12.2.1)$$

Si las partículas son *indistinguibles*, (12.2.1) no tiene las propiedades de simetría apropiadas, luego no puede ser la función de onda del sistema. Para obtener una función de onda aceptable tenemos que *simetrizar* (bosones) o *antisimetrizar* (fermiones). Suponiendo todas las  $\Psi_a(\mathbf{r})$  distintas tenemos, para bosones,

$$\Psi_B(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\Pi} \Psi_1(\mathbf{r}_{i_1}) \dots \Psi_n(\mathbf{r}_{i_n}), \quad (12.2.2)$$

y la suma  $\sum_{\Pi}$  recorre las  $n!$  permutaciones

$$\Pi : (1, \dots, n) \rightarrow (i_1, \dots, i_n).$$

Si hubiese  $n_1, n_2, \dots$  funciones de onda iguales el factor de normalización  $1/\sqrt{n!}$  hay que sustituirlo por

$$\frac{\sqrt{n_1! n_2! \dots}}{\sqrt{n!}}.$$



EJERCICIO: Comprobar que si las  $\Psi_a$  están normalizadas a la unidad, es decir,  $\int d^3r |\Psi_a(\mathbf{r})|^2 = 1$ , entonces la  $\Psi_B$  dada por (12.2.2) también lo está:

$$\int d^3r_1 \dots d^3r_n |\Psi_B(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)|^2 = 1 \quad \bullet$$

Para fermiones,

$$\Psi_F(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\Pi} (-1)^{\delta_{\Pi}} \Psi_1(\mathbf{r}_{i_1}) \dots \Psi_n(\mathbf{r}_{i_n}), \quad (12.2.3)$$

y la suma sigue extendiéndose a todas las permutaciones;  $\delta_{\Pi}$  es la paridad de  $\Pi$ .

EJERCICIO: Demostrar que, también ahora,  $\|\Psi_a\| = 1$  implica  $\|\Psi_F\| = 1$   $\bullet$

La fórmula (12.2.3) también puede escribirse como un determinante (*determinante de Slater*):

$$\Psi_F(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \det \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}_1) & \dots & \Psi_1(\mathbf{r}_n) \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \Psi_n(\mathbf{r}_1) & \dots & \Psi_n(\mathbf{r}_n) \end{pmatrix}. \quad (12.2.4)$$

El principio de exclusión es evidente en esta formulación: si dos funciones de onda son iguales, el determinante de Slater tiene dos filas iguales luego se anula. Más generalmente, las  $n$  funciones de onda tienen que ser linealmente independientes.

Para dos partículas, por ejemplo, la formulación general nos dice que

$$\begin{aligned} \Psi_B(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \Psi_1(\mathbf{r}_1)\Psi_2(\mathbf{r}_2) + \Psi_1(\mathbf{r}_2)\Psi_2(\mathbf{r}_1) \right\}, \\ \Psi_F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \Psi_1(\mathbf{r}_1)\Psi_2(\mathbf{r}_2) - \Psi_1(\mathbf{r}_2)\Psi_2(\mathbf{r}_1) \right\}. \end{aligned}$$

En general la función de onda no es simplemente el producto de las de cada una de las partículas individuales, porque no siempre cada partícula está en un estado bien determinado; en general, las funciones de onda son combinaciones lineales de funciones como las de (12.2.2), (12.2.3): por ejemplo, para bosones y en general tendremos

$$\Psi_B(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{i_1, \dots, i_n} \alpha(i_1, \dots, i_n) \sum_{\Pi} \Psi_1(\mathbf{r}_{i_1}) \dots \Psi_n(\mathbf{r}_{i_n}),$$

y por las propiedades de simetría debemos suponer que los  $\alpha(i_1, \dots, i_n)$  son completamente simétricos en sus argumentos.

### 12.3. Electrones en un conductor. Nivel de Fermi

Consideremos un conductor filiforme de longitud  $L$  en el que hay  $N$  electrones que se pueden mover libremente. Si suponemos que los electrones no pueden salir del conductor, un modelo razonable es el de  $N$  partículas independientes moviéndose en una dimensión, en un pozo de potencial infinito de anchura  $L$ .

Busquemos la energía mínima posible del sistema. Recordando los resultados de la sec. 6.3 sabemos que las energías posibles de cada electrón son las  $E_n = n^2 \hbar^2 \pi^2 / 2m_e L$ , con  $m_e$  la masa del electrón y  $n = 1, 2, \dots$ . Pero los electrones son fermiones, luego sólo puede haber uno para cada energía  $E_n$ . La mínima energía posible del sistema se alcanzará, por tanto, cuando un electrón tenga energía  $E_1$ , otro  $E_2$ ,  $\dots$ , y el último  $E_N$ . A la energía  $E_N$  se la llama *nivel de Fermi*, y se la suele denotar por  $E_F$ . Tenemos pues,

$$E_F = \frac{N^2 \hbar^2 \pi^2}{2m_e L^2}. \quad (12.3.1)$$

El estado de mínima energía del sistema es aquel en que están ocupados todos los niveles de energía hasta el nivel de Fermi.

Para el caso más realista de un sólido tridimensional con volumen  $V$  se obtiene

$$E_F = \left( \frac{6\pi^2 N}{2V} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m_e}, \quad (12.3.2)$$

y el factor  $1/2$  dentro del paréntesis se debe a que los electrones tienen un grado de libertad interno (el espín, que estudiaremos en el capítulo 14) luego hay dos estados posibles para cada energía.

Calculemos el nivel de Fermi en un caso específico:  $V = 1 \text{ cm}^3$ .  $N$  será del orden del número de los electrones de valencia, digamos  $N \simeq 10^{22}$ . Entonces, de (12.3.2),

$$E_F \simeq 2.2 \times 10^{-12} \text{ erg} \simeq 1.4 \text{ eV}.$$

Es interesante comparar esto con las energías típicas de electrones en metales en equilibrio térmico. Para ello expresamos  $E_F$  en grados Kelvin utilizando la expresión  $E = k_B T$ , con  $T$  la temperatura y  $k_B$  la constante de Boltzmann. Obtenemos la *temperatura de Fermi*,

$$T_F \simeq 15\,000 \text{ }^\circ\text{K}.$$

La temperatura de Fermi es mucho más alta que las habituales y, por tanto, el nivel de Fermi es poco afectado por la temperatura a la que esté el metal.

### 12.4. Formalismo de operadores de creación-aniquilación para estados de varias partículas. Espacio de Fock

Consideremos un sistema de  $n$  partículas idénticas que, para fijar ideas, suponemos bosones; el caso fermiónico lo veremos al final. Si las partículas son libres, podemos especificar su estado dando sus momentos, y simetrizando; en el formalismo de Dirac,

$$|\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\Pi} |\mathbf{p}_{i_1}, \dots, \mathbf{p}_{i_n}\rangle. \quad (12.4.1)$$

Inspirado por el formalismo de operadores de creación-aniquilación para osciladores armónicos, podemos definir operadores que crean/aniquilan no excitaciones energéticas, sino *partículas*. Consideramos por tanto al operador  $\hat{a}^\dagger(\mathbf{p})$  (respectivamente,  $\hat{a}(\mathbf{p})$ ) como aquel que crea (resp., aniquila) una partícula con momento  $\mathbf{p}$ . Postulamos las relaciones de conmutación

$$[\hat{a}(\mathbf{p}), \hat{a}(\mathbf{p}')] = 0, \quad [\hat{a}(\mathbf{p}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}')] = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \quad (12.4.2)$$

extensión natural de las (7.4.4). Definimos el estado  $|\Omega\rangle$  como el estado sin partículas, esto es, el vacío.<sup>1</sup> Un estado de una partícula de momento  $\mathbf{p}$  vendrá dado por

$$|\mathbf{p}\rangle = \hat{a}^\dagger(\mathbf{p})|\Omega\rangle$$

y uno de  $n$  partículas, que suponemos con momentos distintos, por

$$|\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n\rangle = \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}_1) \dots \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}_n)|\Omega\rangle. \quad (12.4.3)$$

Debido a las relaciones de conmutación (12.4.2), la simetría es automática.

Postulemos, además, que

$$\langle\Omega|\Omega\rangle = 1; \quad \hat{a}(\mathbf{p})|\Omega\rangle = 0. \quad (12.4.4)$$

La normalización resulta ser la usual,  $\langle\mathbf{p}|\mathbf{p}'\rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$ . En efecto,

$$\begin{aligned} \langle\mathbf{p}|\mathbf{p}'\rangle &= \langle\hat{a}^\dagger(\mathbf{p})\Omega|\hat{a}^\dagger(\mathbf{p}')\Omega\rangle = \langle\Omega|\hat{a}(\mathbf{p})\hat{a}^\dagger(\mathbf{p}')|\Omega\rangle \\ &= \langle\Omega|\{[\hat{a}(\mathbf{p}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}')] + \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}')\hat{a}(\mathbf{p})\}|\Omega\rangle = \langle\Omega|\Omega\rangle\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \end{aligned}$$

Para fermiones definimos los operadores  $\hat{b}^\dagger(\mathbf{p})$  (resp.,  $\hat{b}(\mathbf{p})$ ) como creadores (resp., aniquiladores) de una partícula con momento  $\mathbf{p}$ . Postulamos las *relaciones de anticonmutación*

$$\{\hat{b}(\mathbf{p}), \hat{b}(\mathbf{p}')\} = 0, \quad \{\hat{b}(\mathbf{p}), \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}')\} = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \quad (12.4.5)$$

donde, para dos operadores arbitrarios  $\hat{A}, \hat{B}$  se define el *anticonmutador* por

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}.$$

Los estados se construyen por

$$|\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n\rangle_F = \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}_1) \dots \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}_n)|\Omega\rangle. \quad (12.4.6)$$

y están automáticamente antisimetrizados.

<sup>1</sup> La notación  $|0\rangle$  se utiliza también para el vacío.

EJERCICIO: Comprobar la normalización, para fermiones,

$$\langle \hat{b}^\dagger(\mathbf{p})\Omega | \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}')\Omega \rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad \bullet$$

Los estados que hemos construido forman una base, y son libres. Estados arbitrarios vienen dados por

$$\begin{aligned} |\Psi_n\rangle_B &= \int d^3p_1 \dots d^3p_n \Psi_n(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n) \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}_1) \dots \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}_n) |\Omega\rangle; \\ |\Psi_n\rangle_F &= \int d^3p_1 \dots d^3p_n \Psi_n(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n) \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}_1) \dots \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}_n) |\Omega\rangle. \end{aligned} \quad (12.4.7)$$

El formalismo de operadores de creación y aniquilación es particularmente útil en casos en que el número de partículas de un sistema no es constante en el tiempo, como ocurre en teoría de la radiación, o en teoría relativista a suficiente energía. En este caso, un estado tendrá proyección no nula sobre los  $|\Psi_n\rangle$  de (12.4.7):

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle_B &= \sum_{n=0}^{\infty} \int d^3p_1 \dots d^3p_n \Psi_n(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n) \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}_1) \dots \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}_n) |\Omega\rangle; \\ |\Psi\rangle_F &= \sum_{n=0}^{\infty} \int d^3p_1 \dots d^3p_n \Psi_n(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n) \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}_1) \dots \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}_n) |\Omega\rangle. \end{aligned} \quad (12.4.8)$$

Al espacio generado por estos vectores se le llama *espacio de Fock*.

## PROBLEMAS

P.12.1. (*Gas de Bose*). Consideremos un conjunto de bosones, cuyas interacciones despreciamos (gas perfecto). Los suponemos confinados en una región de tamaño finito, de forma que las energías pueden tomar un conjunto discreto de valores,  $E_n$ . Si el número de partículas con energía  $E_n$  es  $N_n$ , la energía total del sistema es  $E = \sum_n N_n E_n$ . El potencial termodinámico es  $\Omega = \sum_i \Omega_i$  con

$$\Omega_i = -k_B T \sum_{N_i} \left\{ \exp \frac{\mu - E_i}{k_B T} \right\}^{N_i},$$

donde  $\mu$  es una constante (conocida como el potencial químico),  $T$  es la temperatura y  $k_B$  la constante de Boltzmann. Hallar los números medios de ocupación,  $\bar{N}_i$ .

*Solución.* La suma en  $N_i$  se extiende de 0 al número total de partículas,  $N$ . Por tanto,

$$\Omega_i = -k_B T \log \left\{ 1 - \exp \frac{\mu - E_i}{k_B T} \right\};$$

los números medios de ocupación son

$$\bar{N}_i = \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{(E_i - \mu)/k_B T} - 1}.$$

P.12.2. (*Gas de Fermi*). Hallar  $\Omega_i$ ,  $\bar{N}_i$  para un gas perfecto de fermiones.

*Solución.* La única diferencia con el problema anterior es que ahora los valores posibles de  $N_i$  son sólo 0 y 1, debido al principio de exclusión de Pauli. Entonces,

$$\Omega_{i,F} = -k_B T \log \left\{ 1 + \exp \frac{\mu - E_i}{k_B T} \right\}, \quad \bar{N}_{i,F} = \frac{1}{e^{(E_i - \mu)/k_B T} + 1}$$

Como es lógico,  $\bar{N}_{i,F} < 1$ .

P.12.3. Si la temperatura de los electrones de un conductor es tan elevada, miles de grados, ¿por qué no se quema uno al tocarlo?

*Solución.* No basta que el electrón de más alta energía esté caliente, tiene que poder ceder calor, cayéndose a un estado de energía inferior. Pero no puede, porque los estados con menor energía están ocupados.

## CAPÍTULO 13.

### Rotaciones. Momento angular

#### 13.1. Rotaciones en mecánica cuántica. Parámetros normales. Operadores del momento angular

Podemos describir una rotación,  $R(\boldsymbol{\theta})$ , en el espacio de tres dimensiones por medio del vector  $\boldsymbol{\theta}$ , de tal manera que el eje de la rotación sea la línea a lo largo del vector  $\boldsymbol{\theta}$ , el ángulo de la rotación sea  $\theta = |\boldsymbol{\theta}|$ , y la dirección de la rotación sea la de giro de un sacacorchos que avanza a lo largo de  $\boldsymbol{\theta}$ ; ver la figura 13.1.1. Si denotamos por  $\mathbf{r}' = R(\boldsymbol{\theta})\mathbf{r}$  al girado de un vector arbitrario,  $\mathbf{r}$ , por dicha rotación, entonces

$$\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = R(\boldsymbol{\theta})\mathbf{r} = (\cos \theta)\mathbf{r} + (1 - \cos \theta)\frac{\boldsymbol{\theta}\mathbf{r}}{\theta^2} + \frac{\sin \theta}{\theta}\boldsymbol{\theta} \times \mathbf{r}. \quad (13.1.1)$$

Para  $\boldsymbol{\theta}$  infinitesimal,

$$R(\boldsymbol{\theta})\mathbf{r} = \mathbf{r} + \boldsymbol{\theta} \times \mathbf{r} + O(\theta^2). \quad (13.1.2)$$

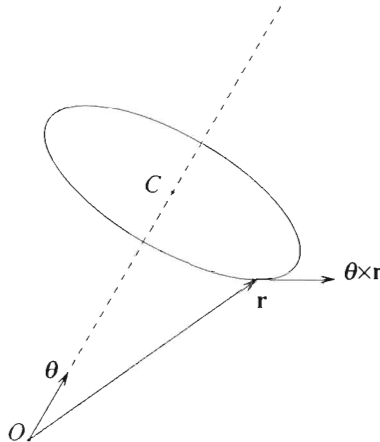


FIGURA 13.1.1. Representación gráfica de la rotación  $R(\boldsymbol{\theta})$ , para  $\boldsymbol{\theta}$  infinitesimal.

En lugar de la caracterización que hemos presentado, podríamos utilizar también la dada por los *ángulos de Euler*. Si denotamos a estos ángulos por  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$ , escribimos  $R_{\alpha\beta\gamma}$  para la correspondiente rotación. En términos de la definición anterior de rotaciones,  $R_{\alpha\beta\gamma}$  se puede descomponer como sigue: sea  $R_j(\phi)$  una rotación alrededor del eje  $Oj$  por el ángulo  $\phi$ , en la dirección dada por un sacacorchos que avanza a lo largo del eje  $Oj$ , en la dirección positiva. Entonces,

$$R_{\alpha\beta\gamma} = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma).$$

Pocas veces utilizaremos los ángulos de Euler. La ventaja de la parametrización  $R(\boldsymbol{\theta})$  es que los parámetros  $\boldsymbol{\theta}$  son *parámetros normales*.<sup>1</sup>

Nótese que la inversa de  $R(\boldsymbol{\theta})$  es  $R(-\boldsymbol{\theta}) = R^{-1}(\boldsymbol{\theta})$  y que si  $\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2$  son paralelos

$$R(\boldsymbol{\theta}_1)R(\boldsymbol{\theta}_2) = R(\boldsymbol{\theta}_1 + \boldsymbol{\theta}_2).$$

Definimos la acción de una rotación  $R$  sobre un sistema cuántico con función de onda  $\Psi$  haciendo que los ejes de coordenadas giren por  $R$ . Por tanto, los radios vectores girarán por la inversa,  $\mathbf{r} \rightarrow R^{-1}\mathbf{r}$  y, sobre  $\Psi$ ,

$$R: \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t) \equiv \Psi_R(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t) = \Psi(R^{-1}\mathbf{r}_1, \dots, R^{-1}\mathbf{r}_n; t). \quad (13.1.3a)$$

Claramente, esta correspondencia es lineal, y podemos definir el operador lineal  $\hat{U}(R)$  que corresponde a la rotación  $R$  por

$$\hat{U}(R)\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t) = \Psi_R(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t) = \Psi(R^{-1}\mathbf{r}_1, \dots, R^{-1}\mathbf{r}_n; t). \quad (13.1.3b)$$

Con esta definición se tiene, para cualquier par de rotaciones  $R, R'$ ,

$$\hat{U}(R)\hat{U}(R') = \hat{U}(RR'); \quad \hat{U}(R^{-1}) = \hat{U}^{-1}(R) = \hat{U}(R)^\dagger.$$

<sup>1</sup> En general, dado un grupo de transformaciones con elementos  $g(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ , especificados por los parámetros  $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ , decimos que estos parámetros son *normales* si, siempre que los vectores  $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}$  sean paralelos se tiene

$$g(\alpha_1, \dots, \alpha_n)g(\beta_1, \dots, \beta_n) = g(\alpha_1 + \beta_1, \dots, \alpha_n + \beta_n).$$

Éste es ciertamente el caso para los  $\boldsymbol{\theta}$  en  $R(\boldsymbol{\theta})$ , pero no para los ángulos de Euler. La utilidad de los parámetros normales, en especial en mecánica cuántica, es que permiten reducir transformaciones finitas a transformaciones *infinitesimales*. En efecto, si escribimos, para transformaciones lineales,

$$g(\boldsymbol{\epsilon}) = 1 + \boldsymbol{\epsilon}\mathbf{T} + O(\boldsymbol{\epsilon}^2),$$

entonces podemos escribir una transformación finita como

$$g(\boldsymbol{\alpha}) = [g(\boldsymbol{\alpha}/n)]^n = [1 + \boldsymbol{\alpha}\mathbf{T}/n + O(\boldsymbol{\alpha}/n^2)]^n \underset{n \rightarrow \infty}{=} e^{\boldsymbol{\alpha}\mathbf{T}}.$$

EJERCICIO: Comprobar estas relaciones. Utilícese que la diferencial de volumen no cambia bajo rotaciones (el jacobiano de una rotación es la unidad) •

Si  $\epsilon$  es infinitesimal podemos desarrollar en potencias de  $\epsilon$  y quedarnos al primer orden. Suprimiendo la variable tiempo para aligerar la notación,

$$\begin{aligned}\hat{U}(R(\epsilon))\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) &= \Psi(\mathbf{r}_1 - \epsilon \times \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n - \epsilon \times \mathbf{r}_n) \\ &= \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) - \sum_{a=1}^n (\epsilon \times \mathbf{r}_a) \nabla_a \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) + O(\epsilon^2).\end{aligned}$$

Escribiendo  $(\epsilon \times \mathbf{r}_a) \nabla_a = \epsilon(\mathbf{r}_a \times \nabla_a)$  y expresando  $\nabla_a$  en función del operador momento para la partícula  $a$ -ésima,  $\mathbf{P}_a$ , nos queda

$$\begin{aligned}\hat{U}(R(\epsilon))\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) &= \left(1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon \sum_{a=1}^n \mathbf{r}_a \times \mathbf{P}_a\right) \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) \\ &+ O(\epsilon^2).\end{aligned}\tag{13.1.4}$$

Podemos utilizar el principio de correspondencia para identificar el operador  $\mathbf{r}_a \times \mathbf{P}_a$  como el *momento angular* de la partícula  $a$ -ésima,  $\hat{\mathbf{L}}_a$ , y a la suma  $\sum_a \hat{\mathbf{L}}_a$  como el *momento angular total* del sistema:

$$\hat{\mathbf{L}}_a = \mathbf{r}_a \times \mathbf{P}_a, \quad \hat{\mathbf{L}} = \sum_a \hat{\mathbf{L}}_a.\tag{13.1.5}$$

La ecuación (13.1.4) nos dice, pues, que

$$\hat{U}(R(\epsilon)) = 1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{\mathbf{L}} + O(\epsilon^2).\tag{13.1.6}$$

EJERCICIO: En general, podemos escribir  $\hat{\mathbf{L}}_a = \hat{\mathbf{Q}}_a \times \mathbf{P}_a$ . Hallar la fórmula explícita para  $\hat{\mathbf{L}}_a$  en representación de momentos •

Consideremos ahora una rotación finita,  $R(\boldsymbol{\theta})$ . Escribimos

$$R(\boldsymbol{\theta}) = \left\{ R\left(\frac{\boldsymbol{\theta}}{N}\right) \right\}^N;$$

cuando  $N \rightarrow \infty$ ,  $\boldsymbol{\theta}/N$  es infinitesimal; (13.1.6) se aplica y encontramos que

$$\hat{U}(R(\boldsymbol{\theta})) = \left\{ 1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\boldsymbol{\theta}}{N} \hat{\mathbf{L}} \right\}^N + O(1/N)$$

que, en el límite  $N \rightarrow \infty$  nos da

$$\hat{U}(R(\boldsymbol{\theta})) = \exp \frac{-i}{\hbar} \boldsymbol{\theta} \hat{\mathbf{L}}.\tag{13.1.7}$$

En lo que queda de esta sección trabajaremos con una sola partícula; la generalización a un número arbitrario de éstas no presenta dificultades.



Las relaciones de conmutación de las componentes de  $\hat{\mathbf{L}}$ ,  $\hat{L}_j$ , con las componentes  $\hat{Q}_k$ ,  $\hat{P}_l$  de los operadores posición y momento se pueden obtener fácilmente de las de Heisenberg y de la fórmula explícita (13.1.5) que escribimos también en componentes como

$$\hat{L}_j = \sum_{k,l=1}^3 \epsilon_{jkl} \hat{Q}_k \hat{P}_l.$$

Aquí,  $\epsilon_{jkl}$  es el tensor completamente antisimétrico de Levi-Civita. Después de un sencillo cálculo encontramos

$$\begin{aligned} [\hat{L}_j, \hat{Q}_k] &= i\hbar \sum_s \epsilon_{jks} \hat{Q}_s; \\ [\hat{L}_j, \hat{P}_k] &= i\hbar \sum_s \epsilon_{jks} \hat{P}_s \end{aligned} \quad (13.1.8)$$

y, además, se tiene

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \sum_s \epsilon_{jks} \hat{L}_s. \quad (13.1.9)$$

EJERCICIO: Demostrar que las  $\hat{L}_j$  son autoadjuntas:  $\hat{L}_j^\dagger = \hat{L}_j$  •

Finalmente, damos la expresión de los  $\hat{U}(R)$  en el formalismo de Dirac:

$$\begin{aligned} \hat{U}(R)|\mathbf{r}\rangle &= |R\mathbf{r}\rangle, \\ \hat{U}(R)|\mathbf{p}\rangle &= |R\mathbf{p}\rangle. \end{aligned} \quad (13.1.10)$$

EJERCICIO: Demostrar (13.1.10).

*Indicación.* Para cualquier  $|\Psi\rangle$ ,  $\Psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|\Psi\rangle$ . Pero,  $\Psi_R(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|\hat{U}(R)|\Psi\rangle = \Psi(R^{-1}\mathbf{r})$ , y hemos utilizado (13.1.3). Basta ahora tener en cuenta que  $\hat{U}$  es unitario para hacerle actuar sobre  $\langle \mathbf{r}|$  •

El cuadrado del momento angular se define como

$$\hat{L}^2 \equiv \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \sum_{j=1}^3 \hat{L}_j^2,$$

y es fácil comprobar que conmuta con todas las componentes:

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_j] = 0.$$

### 13.2. Sistemas invariantes bajo rotaciones

Sea  $\hat{H}$  el hamiltoniano de un sistema de partículas,  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ , donde  $\hat{H}_0$  es la parte libre,

$$\hat{H}_0 = \sum_{n=1}^n \frac{1}{2m_n} \hat{\mathbf{P}}_n^2.$$

Utilizando las relaciones de conmutación (13.1.8) es fácil ver que  $\hat{H}_0$  y los  $\hat{L}_j$  conmutan,<sup>2</sup> y lo mismo ocurre para una rotación finita:

$$[\hat{H}_0, \hat{L}_j] = 0; \quad [\hat{H}_0, \hat{U}(R)] = 0.$$

Consideremos ahora que el sistema es invariante bajo rotaciones. Esto quiere decir que si  $\Psi$  es solución de la ecuación de Schrödinger,

$$i\hbar\partial_t\Psi = \hat{H}\Psi,$$

también lo es, para cualquier  $\boldsymbol{\theta}$ , la función de onda  $\Psi_R$ , con  $\Psi_R = \hat{U}(R(\boldsymbol{\theta}))\Psi$ . Por tanto,

$$i\hbar\partial_t\Psi_R = \hat{H}\Psi_R.$$

Pero  $\hat{U}$  no depende explícitamente del tiempo, luego

$$\hat{H}\hat{U}\Psi = \hat{H}\Psi_R = i\hbar\partial_t\Psi_R = i\hbar\partial_t\hat{U}(R(\boldsymbol{\theta}))\Psi = \hat{U}i\hbar\partial_t\Psi = \hat{U}\hat{H}\Psi.$$

Como esto vale para cualquier  $\Psi$ , hemos obtenido que  $\hat{U}(R(\boldsymbol{\theta}))$  y  $\hat{H}$  conmutan y, diferenciando con respecto a las componentes  $\theta_j$ , vemos que también los  $\hat{L}_j$  y  $\hat{H}$  conmutan:

$$[\hat{H}, \hat{U}(R(\boldsymbol{\theta}))] = [\hat{H}, \hat{L}_j] = 0 : \quad (13.2.1)$$

en un sistema invariante bajo rotaciones el momento angular total es conservado.

Veamos qué restricciones impone (13.2.1) sobre  $\hat{H}$ . Ya sabemos que  $\hat{H}_0$  y  $\hat{U}(R)$  conmutan; por tanto ha de ser

$$[\hat{U}(R), \hat{V}] = 0.$$

Consideremos el caso de una partícula. Aplicando el conmutador de arriba a una  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  arbitraria,

$$V(\mathbf{r})\hat{U}(R)\Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{U}(R)(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}, t),$$

y por tanto

$$V(\mathbf{r})\Psi(R^{-1}\mathbf{r}, t) = V(R^{-1}\mathbf{r})\Psi(R^{-1}\mathbf{r}, t).$$

Como esto ha de ser cierto para todo  $\Psi$ , nos resulta que  $V(\mathbf{r}) = V(R^{-1}\mathbf{r})$ , para cualquier rotación  $R$ . Por tanto,  $V$  sólo puede depender del módulo del vector  $\mathbf{r}$ :

$$V = V(|\mathbf{r}|). \quad (13.2.2)$$

Para el caso de varias partículas aisladas, y aplicando también invariancia bajo traslaciones (sec. 4.2) nos resulta que el potencial sólo puede depender de las distancias relativas entre las partículas:

$$V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = V(|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|). \quad (13.2.3)$$

<sup>2</sup> Aquí  $\hat{\mathbf{L}}$  representa el operador momento angular total del sistema

### 13.3. Momento angular: expresión de los $\hat{L}$ en coordenadas polares. Espectro de $\hat{L}_z$

#### 13.3.1. Operadores momento angular en polares; relación con la energía cinética

La expresión de los  $\hat{L}$  en coordenadas polares es útil. Después de un cálculo sencillo, pero latoso, encontramos que

$$\begin{aligned}\hat{L}_1 &= \frac{\hbar}{2} \left\{ e^{i\phi} \left( \frac{\partial}{\partial\theta} + i(\cot\theta) \frac{\partial}{\partial\phi} \right) + e^{-i\phi} \left( -\frac{\partial}{\partial\theta} + i(\cot\theta) \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \right\}; \\ \hat{L}_2 &= \frac{\hbar}{2i} \left\{ e^{i\phi} \left( \frac{\partial}{\partial\theta} + i(\cot\theta) \frac{\partial}{\partial\phi} \right) - e^{-i\phi} \left( -\frac{\partial}{\partial\theta} + i(\cot\theta) \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \right\}; \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi}.\end{aligned}\quad (13.3.1)$$

Además,

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) \right\}. \quad (13.3.2)$$

Existe una importante relación entre  $\hat{L}^2$  y la parte cinética del hamiltoniano para una partícula,  $\hat{\mathbf{P}}^2/2m$ . Si escribimos ésta en polares, tenemos

$$\begin{aligned}\frac{1}{2m} \hat{\mathbf{P}}^2 &= -\frac{\hbar}{2m} \Delta = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{r^2} \left[ \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) \right] \right\}.\end{aligned}\quad (13.3.3a)$$

Comparando con (13.3.2) vemos que

$$\frac{1}{2m} \hat{\mathbf{P}}^2 = \hat{P}_{\text{rad}}^2 + \frac{1}{r^2} \hat{L}^2, \quad (13.3.3b)$$

donde hemos definido la *componente radial* de  $\hat{\mathbf{P}}$ ,  $\hat{P}_{\text{rad}}$ , por

$$\hat{P}_{\text{rad}} \equiv -i\hbar \frac{1}{r} \left( \frac{\partial}{\partial r} r \right). \quad (13.3.3c)$$

Nótese la analogía con la correspondiente expresión clásica:

$$m\mathbf{r}_{\text{cl}}^2 = \mathbf{p}_{\text{cl}}^2 = p_{\text{cl},\text{rad}}^2 + \frac{1}{r_{\text{cl}}^2} l_{\text{cl}}^2, \quad p_{\text{cl},\text{rad}} = m\dot{r}_{\text{cl}}; \quad r_{\text{cl}} = +\sqrt{\mathbf{r}_{\text{cl}}^2}.$$

### 13.3.2. Valores propios de las componentes del momento angular

Como una primera aplicación, vamos a considerar las funciones y valores propios de un  $\hat{L}_j$ . Siempre podemos escoger el sistema de coordenadas de forma que el eje  $OZ$  coincida con la dirección  $j$ , es decir, para encontrar el espectro basta estudiar el caso  $j = 3 = z$ . La ecuación de valores propios que queremos resolver es pues,

$$\hat{L}_z \Psi_M = \hbar M \Psi_M, \quad (13.3.4)$$

y hemos separado explícitamente  $\hbar$  del valor propio para que  $M$  no tenga dimensiones. En polares, (13.3.4) es

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \Psi_M(r, \theta, \phi; t) = \hbar M \Psi_M(r, \theta, \phi; t)$$

cuya solución general es

$$\Psi_M(r, \theta, \phi; t) = C(r, \theta, t) e^{iM\phi}. \quad (13.3.5a)$$

Ahora bien: un cambio de  $\pi$  en  $\phi + 2n\pi$  para cualquier  $n$  entero dejando fijos  $r$  y  $\theta$  nos deja en el mismo punto del espacio; por tanto,<sup>3</sup> para cualquier  $\Psi$  (en particular  $\Psi_M$ ),

$$\Psi(r, \theta, \phi + 2n\pi; t) = \Psi(r, \theta, \phi; t).$$

Dada la forma de  $\Psi_M$ , ec. (13.3.5a), esto implica  $\exp iM\phi = \exp iM(\phi + 2n\pi)$  para todo  $n$ , luego tiene que ser

$$M = \text{entero} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots : \quad (13.3.5b)$$

los valores posibles de  $\hat{L}_z$  (y, por tanto, de cualquier  $\hat{L}_j$ ) están cuantizados en unidades de  $\hbar$ .

A  $M$  se le llama a veces *número cuántico magnético* porque, si la partícula tiene carga eléctrica  $q$ , el momento angular induce un momento magnético de valor  $q\hbar M$ .

<sup>3</sup> Este argumento no es muy convincente. La demostración rigurosa de que  $M = \text{entero}$  puede verse en el problema P.14.4.

### 13.4. Componentes de Cartan; valores y vectores propios del momento angular

Dado un vector arbitrario,  $\mathbf{v}$ , lo podemos describir por sus *componentes cartesianas*,  $v_j$ , o por las llamadas *componentes esféricas* o *componentes de Cartan*,  $v_0, v_{\pm}$  con

$$v_0 = v_3, \quad v_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (v_1 \pm iv_2).$$

La matriz que pasa de componentes cartesianas a componentes de Cartan es

$$C \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_+ \\ v_- \\ v_0 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

y es una matriz unitaria. Podemos, por tanto, considerar las componentes de Cartan como proyecciones a lo largo de tres ejes ortogonales, pero complejos.<sup>4</sup>

Para el momento angular definimos las componentes de Cartan como

$$\hat{L}_0 = \hat{L}_3, \quad \hat{L}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{L}_1 \pm i\hat{L}_2). \quad (13.4.1)$$

Puesto que las componentes cartesianas son autoadjuntas, las de Cartan satisfacen

$$\hat{L}_0^{\dagger} = \hat{L}_0, \quad \hat{L}_{\pm}^{\dagger} = \hat{L}_{\mp}. \quad (13.4.2)$$

La utilidad de las componentes de Cartan radica en que sus relaciones de conmutación,

$$[\hat{L}_0, \hat{L}_{\pm}] = \pm \hbar \hat{L}_{\pm}; \quad [\hat{L}_+, \hat{L}_-] = \hbar \hat{L}_0, \quad (13.4.3)$$

son particularmente cómodas de utilizar. También es útil la expresión de  $\hat{L}^2$  en términos de esta base:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 &= 2\hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_0^2 - \hbar \hat{L}_0 \\ &= 2\hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_0^2 + \hbar \hat{L}_0. \end{aligned} \quad (13.4.4)$$

Buscamos ahora estados que diagonalicen a la vez a  $\hat{L}^2$  y  $\hat{L}_0$ ; utilizaremos el formalismo de Dirac:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 |\lambda, M\rangle &= \hbar^2 \lambda |\lambda, M\rangle, \\ \hat{L}_0 |\lambda, M\rangle &= \hbar M |\lambda, M\rangle \end{aligned} \quad (13.4.5)$$

y recordamos que  $M$  es entero. Tomamos  $\lambda$  fijo, y vamos a determinar sus posibles valores, y los de  $M$ . En primer lugar, como  $\hat{L}^2 - \hat{L}_0^2 = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2$  es definido positivo, tenemos que  $\lambda \geq M^2$ . Denotemos por  $l$  al máximo de  $|M|$ ; tenemos por tanto que  $\lambda \geq l^2$ . Supondremos que este máximo de  $|M|$  ocurre

<sup>4</sup> A veces se definen las componentes de Cartan como  $v_{\pm} = \mp 2^{-1/2}(v_1 \pm iv_2)$ ,  $v_0 = v_3$ , esto es, con un signo (-) extra en la componente  $v_+$ . A esta convención se la conoce como *convención de Condon y Shortley*.

para  $M$  positivo; si fuese negativo, basta con cambiar el eje  $OZ$  en  $-OZ$ ; el resultado final es el mismo.

Lo siguiente que vamos a demostrar es que los operadores  $\hat{L}_\pm$  actúan como operadores escalera para la tercera componente del momento angular, análogamente a como los  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^\dagger$  de la sec. 7.3 lo hacían para la energía. En efecto; considerando por ejemplo  $\hat{L}_+$  y utilizando las reglas de conmutación (13.4.3),

$$\hat{L}_0 \left( \hat{L}_+ |\lambda, M\rangle \right) = \left( \hbar \hat{L}_+ + \hat{L}_+ \hat{L}_0 \right) |\lambda, M\rangle = \hbar(M+1) \hat{L}_+ |\lambda, M\rangle.$$

Por tanto,  $\hat{L}_+ |\lambda, M\rangle$  corresponde al valor propio  $\hbar(M+1)$  de  $\hat{L}_0$ . Si aplicamos ahora  $\hat{L}_+$  al estado con mayor  $M$  nos encontramos con que

$$\hat{L}_+ |\lambda, l\rangle = \hbar(l+1) \left( \hat{L}_+ |\lambda, l\rangle \right)$$

lo que contradice la hipótesis de que  $l$  era el valor máximo de  $M$ . Por tanto, ha de tenerse que

$$\hat{L}_+ |\lambda, l\rangle = 0. \quad (13.4.6)$$

Apliquemos ahora  $\hat{L}^2$  a este estado; utilizando (13.4.4) obtenemos que

$$\hbar^2 \lambda |\lambda, l\rangle = \hat{L}^2 |\lambda, l\rangle = \left( 2\hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_0^2 + \hbar \hat{L}_0 \right) |\lambda, l\rangle = \hbar^2 l(l+1) |\lambda, l\rangle.$$

Hemos encontrado que el valor de  $\lambda$  es precisamente  $\lambda = l(l+1)$ . Esto sugiere cambiar la notación y utilizar  $l$  en vez de  $\lambda$  como etiqueta:

$$|\lambda, M\rangle \rightarrow |l, M\rangle$$

con lo que (13.4.5) se escribe como

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 |l, M\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |l, M\rangle, \\ \hat{L}_0 |l, M\rangle &= \hbar M |l, M\rangle. \end{aligned} \quad (13.4.7)$$

A  $l$  se le llama *momento angular total*, aunque esta nomenclatura no es muy exacta. En efecto, tenemos aquí una peculiaridad cuántica. Clásicamente, el máximo de  $l_{clz}$  es  $|l_{cl}|$ . Cuánticamente acabamos de ver que, sin embargo, y salvo cuando  $l = 0$ ,

$$l = \max |M| < \sqrt{l(l+1)}.$$

Esto se debe a que, al no conmutar  $\hat{L}_x$  y  $\hat{L}_y$  con  $\hat{L}_z$ , siempre hay un “residuo” de momento angular en las direcciones  $OX$  y  $OZ$ . En el límite clásico,  $l \gg 1$ ,

$$\sqrt{l(l+1)} \simeq l \left( 1 + \frac{1}{2l} \right)$$

y el residuo es despreciable, como era de esperar.

Procedemos ahora como en la sección 7.3, y construimos los estados

$$|\bar{l}, \bar{M}\rangle \equiv \left(\hat{L}_-\right)^{l-M} |l, l\rangle, \quad (13.4.8)$$

y es fácil de comprobar que  $\hat{L}_z |\bar{l}, \bar{M}\rangle = \hbar M |\bar{l}, \bar{M}\rangle$ .

Los estados  $|\bar{l}, \bar{M}\rangle$  son diferentes de cero para  $M = l, l-1, \dots, -M$ . En efecto: si para un  $M_0 + 1$  dado se tuviera  $|\bar{l}, \bar{M}_0 + 1\rangle = 0$  sería  $\hat{L}_- |\bar{l}, \bar{M}_0\rangle = 0$ . Utilizando (13.4.4) vemos que

$$\hat{L}_-^2 |\bar{l}, \bar{M}_0\rangle = \hbar(-M_0)(-M_0 + 1) |\bar{l}, \bar{M}_0\rangle;$$

comparando con (13.4.7) resulta que se debería tener

$$-M_0(-M_0 + 1) = l(l + 1) :$$

es decir,  $M_0 = -l$ . Por tanto,  $\hat{L}_- |\bar{l}, \bar{M}_0\rangle$  sólo puede ser cero si  $M_0 = -l$ . Hemos construido todos los vectores propios; son los de (13.4.8), y acabamos de ver que  $M$  puede tomar los valores

$$M = l, l-1, \dots, -l.$$

Hay un total de  $2l + 1$  valores posibles de  $M$  (para  $l$  fijo).

Normalicemos ahora la base. Escribimos

$$|\bar{l}, \bar{M}\rangle = C_{lM} |l, M\rangle \quad (13.4.9a)$$

con  $|l, M\rangle$  ortonormal:

$$\langle l', M' | l, M \rangle = \delta_{l'l'} \delta_{M M'}. \quad (13.4.9b)$$

Seguimos tomando  $l$  fijo, y suponemos que

$$\langle l, l | l, l \rangle = 1.$$

Para encontrar las  $C_{lM}$  utilizamos que  $\hat{L}_\pm^\dagger = \hat{L}_\mp$ . Se tiene,

$$\begin{aligned} 1 &= \langle l, M | l, M \rangle = \frac{1}{|C_{lM}|^2} \langle \bar{l}, \bar{M} | \bar{l}, \bar{M} \rangle = \frac{1}{|C_{lM}|^2} \langle \hat{L}_-^{l-M}(l, l) | \hat{L}_-^{l-M}(l, l) \rangle \\ &= \frac{1}{|C_{lM}|^2} \langle \hat{L}_-^{l-M-1}(l, l) | \hat{L}_+ \hat{L}_- | \hat{L}_-^{l-M-1}(l, l) \rangle \\ &= \frac{|C_{l, M+1}|^2}{|C_{lM}|^2} \langle l, M+1 | \hat{L}_+ \hat{L}_- | l, M+1 \rangle \\ &= \frac{|C_{l, M+1}|^2}{|C_{lM}|^2} \hbar^2 \frac{l(l+1) - M(M+1)}{2} \end{aligned}$$

y en el último paso hemos utilizado (13.4.4) para reemplazar  $\hat{L}_+ \hat{L}_-$  en términos de  $\hat{L}^2, \hat{L}_0$ .

Las fases de las  $C_{lM}$  son arbitrarias. Si las fijamos de manera que sean positivas obtenemos la relación de recurrencia

$$C_{lM} = \hbar \sqrt{\frac{l(l+1) - M(M+1)}{2}} C_{l, M+1}, \quad (13.4.9b)$$

que, junto con  $C_{ll} = 1$  nos da todas las  $C$ . Hemos encontrado de paso que, en esta base ortonormal,

$$\begin{aligned} \hat{L}_- |l, M\rangle &= \hbar \sqrt{\frac{l(l+1) - M(M-1)}{2}} |l, M-1\rangle, \\ \hat{L}_+ |l, M\rangle &= \hbar \sqrt{\frac{l(l+1) - M(M+1)}{2}} |l, M+1\rangle. \end{aligned} \quad (13.4.10)$$

### 13.5. Funciones propias de $\hat{L}^2$ , $\hat{L}_z$ . Armónicos esféricos

Buscamos ahora las funciones de onda que corresponden a sistemas de una sola partícula en los estados  $|l, M\rangle$ . Puesto que las  $\hat{L}$  no involucran  $r$  o el tiempo, estas funciones serán de la forma

$$\Psi^{(l, M)}(r, \theta, \phi; t) = f(r, t) Y_M^l(\theta, \phi), \quad (13.5.1)$$

donde las  $Y_M^l$  satisfacen las ecuaciones diferenciales

$$\begin{aligned} \hat{L}_z Y_M^l(\theta, \phi) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} Y_M^l(\theta, \phi) = \hbar M Y_M^l(\theta, \phi), \\ \hat{L}^2 Y_M^l(\theta, \phi) &= -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right\} Y_M^l(\theta, \phi) \\ &= \hbar^2 l(l+1) Y_M^l(\theta, \phi). \end{aligned}$$

Como sabemos, la primera nos dice que  $Y_M^l(\theta, \phi) = y_{lM}(\theta) e^{iM\phi}$ , con lo que la segunda se nos convierte en

$$(M^2 - l(l+1)\sin^2 \theta) y_{lM}(\theta) = \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) y_{lM}(\theta).$$

Ésta es una ecuación estándar<sup>5</sup> cuya solución regular es proporcional a las *funciones de Legendre asociadas*,  $P_l^M$ : por tanto,

$$Y_M^l(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iM\phi} P_M^l(\cos \theta) \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-M)!}{(l+M)!}}. \quad (13.5.2)$$

<sup>5</sup> Ver, por ejemplo, Wigner (1959); Courant y Hilbert (1953); Oberhettinger, Magnus y Soni (1966), y el Apéndice IV en este texto donde, en particular, se pueden encontrar fórmulas explícitas para las  $P_l^M$ .



Las fases las hemos escogido de acuerdo con la convención<sup>6</sup> de Condon y Shortley (1951), y los factores están ajustados para que las funciones  $Y_M^l$ , que se conocen por motivos históricos como *armónicos esféricos*, estén normalizadas:

$$\int d\Omega Y_M^l(\theta, \phi)^* Y_{M'}^{l'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{MM'}; \quad \int d\Omega = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} d\cos\theta, \quad (13.5.3)$$

lo que se sigue efectivamente de las propiedades de normalización de las funciones de Legendre,

$$\int_{-1}^{+1} dx P_l^M(x) P_{l'}^{M'}(x) = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+M)!}{(l-M)!} \delta_{ll'} \delta_{MM'}. \quad (13.5.4)$$

Consideremos ahora las propiedades de transformación de una función de onda con valores bien definidos de  $\hat{L}^2$ ,  $\hat{L}_z$ ,  $\Psi^{(l,M)}$ ; por ejemplo,  $\Psi^{(l,M)}$  puede ser el armónico esférico  $Y_M^l$ . Para este cálculo es conveniente utilizar la notación

$$Y_M^l(\theta, \phi) \equiv Y_M^l(\mathbf{r}),$$

donde  $\theta$  y  $\phi$  son las coordenadas polares del vector  $\mathbf{r}$ , cuya longitud es irrelevante. Dada una rotación  $R$ , denotamos a los elementos de matriz del correspondiente operador por  $D_{MM'}^l(R)$ :

$$D_{MM'}^l(R) \equiv \langle l, M | \hat{U}(R) | l, M' \rangle. \quad (13.5.5)$$

Las  $D_{MM'}^l(R)$  pueden obtenerse exponenciando (13.4.10); su forma explícita la veremos en la sec. 13.8.

La ecuación (13.1.3) nos dice que

$$\hat{U}(R) \Psi^{(l,M)}(\mathbf{r}) = \Psi^{(l,M)}(R^{-1}\mathbf{r}) \quad (13.5.6a)$$

y, por otra parte (salvo una función de  $r$ ,  $t$ , que no juegan ningún papel) tenemos

$$\Psi^{(l,M)}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | l, M \rangle. \quad (13.5.6b)$$

Para  $l$  fijo las  $|l, M\rangle$  forman una base:

$$\sum_{M=-l}^{+l} |l, M\rangle \langle l, M| = 1.$$

<sup>6</sup> Hay una cierta confusión al respecto en ciertos textos; por ejemplo, Gottfried (1966) escoge  $\phi$  variando entre  $-\pi$  y  $\pi$ , debido a lo que el miembro de la derecha en (13.5.2) aparece, en su texto, multiplicado por el factor  $(-1)^M$ .

De (13.5.6) obtenemos

$$\begin{aligned}\Psi^{(l,M)}(R^{-1}\mathbf{r}) &= \langle \mathbf{r} | \hat{U}(R) | l, M \rangle = \sum_{M'=-l}^{+l} \langle \mathbf{r} | l, M' \rangle \langle l, M' | \hat{U}(R) | l, M \rangle \\ &= \sum_{M'=-l}^{+l} \Psi^{(l,M')}(\mathbf{r}) D_{M'M}^l(R),\end{aligned}$$

y por tanto las propiedades de transformación buscadas:

$$\Psi^{(l,M)}(R^{-1}\mathbf{r}) = \sum_{M'=-l}^{+l} \Psi^{(l,M')}(\mathbf{r}) D_{M'M}^l(R). \quad (13.5.7)$$

EJERCICIO: Demostrar que la matriz con elementos  $D_{M'M}^l$  es unitaria •

Existe una relación sencilla, pero muy útil, entre el armónico esférico  $Y_M^l(\theta, \phi)$  y el vector  $\mathbf{r}$  de coordenadas polares  $\theta$  y  $\phi$ :

$$r_M = r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_M^l(\theta, \phi), \quad (13.5.8a)$$

donde las  $r_M$  son las componentes de Cartan de  $\mathbf{r}$ , con la elección de signos de Condon y Shortley:

$$r_0 = r_3, \quad r_{\pm} = \mp \frac{r_1 \pm ir_2}{\sqrt{2}}. \quad (13.5.8b)$$

### 13.6. Composición de momentos angulares. Coeficientes de Clebsch–Gordan

Consideremos un sistema de dos partículas con función de onda  $\Psi(\mathbf{r}', \mathbf{r}'')$ ; omitimos el tiempo. Repitiendo el desarrollo de la sección 13.1 encontramos que los operadores momento angular son los  $\hat{\mathbf{L}}$  con

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}} &= \hat{\mathbf{L}}' + \hat{\mathbf{L}}''; \\ \hat{\mathbf{L}}'\Psi(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') &= \mathbf{r}' \times (-i\hbar\nabla')\Psi(\mathbf{r}', \mathbf{r}''), \\ \hat{\mathbf{L}}''\Psi(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') &= \mathbf{r}'' \times (-i\hbar\nabla'')\Psi(\mathbf{r}', \mathbf{r}'')\end{aligned} \quad (13.6.1)$$

y hemos utilizado la notación  $\nabla'_j\Psi(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') = (\partial/\partial r'_j)\Psi(\mathbf{r}', \mathbf{r}'')$ , etc. Vemos que  $\hat{\mathbf{L}}'$  actúa sobre las variables de la primera partícula, y  $\hat{\mathbf{L}}''$  sobre las de la segunda.

Una situación muy común es una en la que tenemos un sistema formado por dos partículas, las cuales están en estados propios del momento angular total y de su tercera componente; es decir, los estados de los subsistemas están caracterizados por  $l', M'$  y  $l'', M''$ . Son, pues, los estados  $|l', M'\rangle$  y  $|l'', M''\rangle$ . El estado de todo el sistema lo podemos escribir, con notación evidente, como

$$|l', M'; l'', M''\rangle = |l', M'\rangle |l'', M''\rangle \quad (13.6.2)$$

y  $\hat{\mathbf{L}}'$  actúa sobre  $|l', M'\rangle$ ,  $\hat{\mathbf{L}}''$  sobre  $|l'', M''\rangle$ .

El espacio de los estados del sistema total puede describirse por la base (16.6.2); pero también podríamos haber diagonalizado el momento angular suma,  $\hat{\mathbf{L}}^2 = (\hat{\mathbf{L}}' + \hat{\mathbf{L}}'')^2$  y su tercera componente,  $\hat{\mathbf{L}}_z = \hat{\mathbf{L}}'_z + \hat{\mathbf{L}}''_z$ . Tendríamos entonces una base  $|l, M\rangle$  con

$$\hat{\mathbf{L}}^2|l, M\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l, M\rangle; \quad \hat{\mathbf{L}}_z|l, M\rangle = \hbar M|l, M\rangle. \quad (13.6.3)$$

En mecánica clásica,  $|l| = |l' + l''|$  y  $l_z = l'_z + l''_z$ ; en mecánica cuántica, si fijamos  $l'$  y  $l''$ ,  $M'$  y  $M''$  como en (13.6.2),  $l$  no está unívocamente determinado. Esto se debe a que, como los operadores de momento angular no conmutan, los valores de las demás componentes ( $x$ ,  $y$ ) están indeterminados. El encontrar los posibles valores de  $\hat{\mathbf{L}}^2$  en la base (13.6.3) no es inmediato.

Algunas relaciones sí son obvias; claramente,

$$M = M' + M'' \quad (13.6.4)$$

y con poco más trabajo se obtiene también

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}'\hat{\mathbf{L}}'' &= \frac{\hbar^2}{2} \left\{ l(l+1) - l'(l'+1) - l''(l''+1) \right\} \\ \hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}' &= \frac{\hbar^2}{2} \left\{ l(l+1) + l'(l'+1) - l''(l''+1) \right\}. \end{aligned} \quad (13.6.5)$$

Pasamos ahora a calcular los valores posibles de  $l$ , y el paso de la base (13.6.2) a la (13.6.3). Puesto que ambas son ortogonales, la matriz  $C$  que efectúa este cambio deberá ser unitaria. Después veremos que, además, se la puede escoger real, luego resulta que podemos suponer  $C$  ortogonal: en particular, su inversa coincidirá con su transpuesta,  $C^{-1} = C^T$ . A los elementos de la matriz  $C$  se les conoce como *coeficientes de Clebsch–Gordan* (o simplemente C-G, por abreviar) y se les denota por  $(l', M'; l'', M''|l)$ . No es necesario especificar  $M$  ya que  $M = M' + M''$ , pero puede incluirse escribiendo también

$$(l', M'; l'', M''|l) \equiv (l', M'; l'', M''|l, M).$$

Nosotros utilizaremos ambas notaciones indistintamente.

Por su definición tenemos

$$|l, M\rangle = \sum_{\substack{M', M'' \\ M' + M'' = M}} (l', M'; l'', M''|l) |l', M'\rangle |l'', M''\rangle. \quad (13.6.6)$$

Procedemos ahora como sigue. Consideramos el estado con máximo valor de ambas terceras componentes del momento angular,  $M' = l'$ ,  $M'' = l''$ . Puesto que el valor del momento angular total del sistema coincide con el máximo de su tercera componente, resulta que tiene que ser  $l_{\max} = l' + l''$ :

$$|l' + l'', l' + l''\rangle = |l', l'\rangle |l'', l''\rangle. \quad (13.6.7a)$$

Aplicamos ahora  $\hat{L}_- = \hat{L}'_- + \hat{L}''_-$  a este estado. Por una parte,

$$\hat{L}_- |l' + l'', l' + l''\rangle = \hbar\sqrt{l' + l''} |l' + l'', l' + l'' - 1\rangle,$$

y, por otra,

$$\begin{aligned} \hat{L}_- |l' + l'', l' + l''\rangle &= \hat{L}'_- |l', l'\rangle |l'', l''\rangle + |l', l'\rangle \hat{L}''_- |l'', l''\rangle \\ &= \hbar\sqrt{l'} |l', l' - 1\rangle |l'', l''\rangle + \hbar\sqrt{l''} |l', l'\rangle |l'', l'' - 1\rangle \end{aligned}$$

y hemos utilizado (13.4.10). Igualando,

$$|l' + l'', l' + l'' - 1\rangle = \sqrt{\frac{l'}{l' + l''}} |l', l' - 1\rangle |l'', l''\rangle + \sqrt{\frac{l''}{l' + l''}} |l', l'\rangle |l'', l'' - 1\rangle. \quad (13.6.7b)$$

Iterando el procedimiento obtendríamos todos los estados

$$|l' + l'', M\rangle, \quad M = l' + l'', l' + l'' - 1, \dots, -(l' + l''),$$

y sus expresiones en la base (13.6.2).

Volvamos a (13.6.7b). El vector  $|l' + l'', l' + l'' - 1\rangle$  no es el único con tercera componente  $M = l' + l'' - 1$ . En efecto, este valor puede obtenerse sumando  $l'$  y  $l'' - 1$ , o sumando  $l' - 1$  y  $l''$ . Por tanto, además de la combinación de la derecha de (13.6.7b) tenemos la ortogonal que podemos escribir

$$|l' + l'', l' + l'' - 1\rangle_{\perp} = \sqrt{\frac{l''}{l' + l''}} |l', l' - 1\rangle |l'', l''\rangle - \sqrt{\frac{l'}{l' + l''}} |l', l'\rangle |l'', l'' - 1\rangle.$$

Hemos escogido las fases arbitrarias de forma que los coeficientes sean reales. Esto no las determina completamente; tenemos un factor  $\pm 1$  global arbitrario. Lo hemos fijado de acuerdo con las convenciones usuales (Condon y Shortley, 1951).

Si aplicamos ahora  $\hat{L}_+$  a  $|l' + l'', l' + l'' - 1\rangle_{\perp}$  obtenemos cero:

$$\hat{L}_+ |l' + l'', l' + l'' - 1\rangle_{\perp} = 0$$

lo que indica, por un argumento como el utilizado con (13.4.6), que para este estado el momento angular total coincide con la tercera componente. Hemos obtenido que  $l$  puede tomar un nuevo valor,  $l = l' + l'' - 1$  y podemos por tanto identificar el estado  $|l' + l'', l' + l'' - 1\rangle_{\perp}$  con el  $|l' + l'' - 1, l' + l'' - 1\rangle$ :

$$|l' + l'' - 1, l' + l'' - 1\rangle = \sqrt{\frac{l''}{l' + l''}} |l', l' - 1\rangle |l'', l''\rangle - \sqrt{\frac{l'}{l' + l''}} |l', l'\rangle |l'', l'' - 1\rangle. \quad (13.6.7c)$$

Aplicando reiteradamente  $\hat{L}_-$  a este estado encontraríamos la nueva serie

$$|l' + l'' - 1, M\rangle, \quad M = l' + l'' - 1, \dots, -(l' + l'' - 1).$$

Pasamos al siguiente valor de  $M$ ,  $M = l' + l'' - 2$ . Lo podemos obtener de tres maneras: componiendo  $l', l'' - 2$ ; componiendo  $l' - 1, l'' - 1$ ; o con  $l' - 2, l''$ . Dos

de estos estados los hemos obtenido ya; nos queda la combinación ortogonal a ambos.

Podemos continuar el proceso, y preguntarnos, cuándo acabará. El número de estados, en la base (13.6.2) es  $(2l' + 1)(2l'' + 1)$ . En la nueva base tenemos  $2(l' + l'') + 1$ ,  $2(l' + l'' - 1) + 1$ ,  $2(l' + l'' - 2) + 1$ , ... En total, si el proceso acaba en  $l = \lambda$ ,

$$\sum_{l=\lambda}^{l'+l''} (2l + 1).$$

Para que esto sea igual a  $(2l' + 1)(2l'' + 1)$  hace falta que (ver fig. 13.6.1)  $\lambda = |l' - l''|$ . En efecto,

$$\sum_{l=|l'-l''|}^{l'+l''} (2l + 1) = (2l' + 1)(2l'' + 1).$$

Los valores posibles del momento angular total son, por tanto,

$$l = |l' - l''|, \dots, l' + l''. \quad (13.6.8)$$

Otra conclusión que podemos sacar del análisis anterior es que se pueden escoger todos los C-G reales, como ya habíamos anunciado. Las ecuaciones (13.6.7) nos dan los primeros valores de los C-G:

$$(l', l'; l'', l'' | l' + l'') = 1, \quad (l', l' - 1; l'', l'' | l' + l'') = \sqrt{\frac{l'}{l' + l''}},$$

$$(l', l' - 1; l'', l'' | l' + l'' - 1) = \sqrt{\frac{l''}{l' + l''}}, \quad \text{etc.}$$

Iterando el procedimiento obtendríamos tantos como fuese necesario; en el Apéndice III hemos recogido algunas fórmulas útiles.

El cambio inverso al (13.6.6) es muy sencillo; puesto que la inversa de la matriz de los C-G es su transpuesta tenemos, simplemente,

$$|l', M'\rangle |l'', M''\rangle = \sum_{l=|l'-l''|}^{l'+l''} (l', M'; l'', M'' | l) |l, M = M' + M''\rangle. \quad (13.6.9)$$

Utilizando los valores de los C-G podemos deducir algunas fórmulas de composición de funciones correspondientes a valores dados del momento angular total y su tercera componente; por ejemplo, la fórmula de composición de armónicos esféricos

$$Y_{M_1}^{l_1}(\theta, \phi) Y_{M_2}^{l_2}(\theta, \phi) = \sum_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}} \times (l_1, M_1; l_2, M_2 | l) (l_1, 0; l_2, 0 | l) Y_{M_1+M_2}^l(\theta, \phi). \quad (13.6.10)$$

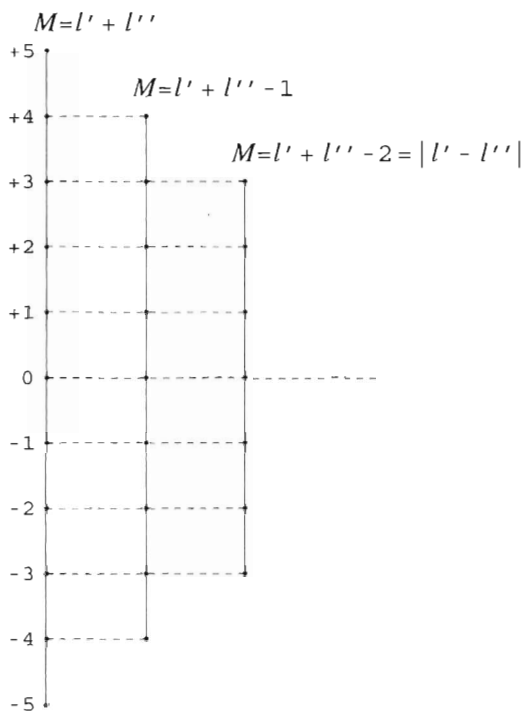


FIGURA 13.6.1. Composición de momentos angulares:  $l' = 4$ ,  $l'' = 1$ .

EJERCICIO: Demostrarlo.

*Indicación.* Por propiedades generales sabemos que

$$Y_{M_1}^{l_1} Y_{M_2}^{l_2} = \sum_l A(l_1, l_2, l) (l_1, M_1; l_2, M_2 | l) Y_{M_1 + M_2}^l.$$

Para hallar las constantes  $A$ , escójase  $M_1 = M_2 = 0$  y utilícense propiedades de los polinomios de Legendre. Si no sale, véase por ejemplo Gottfried (1966) o Wigner (1959) •

### 13.7. Propiedades de transformación de operadores vectoriales. Teorema de Wigner–Eckart

Se dice que el conjunto de operadores  $\hat{F}_j$ ,  $j = 1, 2, 3$  forman un vector  $\hat{\mathbf{F}}$  o que es un  $\hat{\mathbf{F}}$  operador vectorial si se satisfacen las siguientes relaciones de conmutación entre las componentes de  $\hat{\mathbf{F}}$  y las del momento angular:

$$[\hat{L}_j, \hat{F}_k] = i\hbar \sum_s \epsilon_{jks} \hat{F}_s. \quad (13.7.1)$$

Ejemplos de operadores vectoriales son los  $\hat{\mathbf{Q}}$ ,  $\hat{\mathbf{P}}$ , los propios  $\hat{\mathbf{L}}$  y los operadores de espín (que estudiaremos en el próximo capítulo). Vamos ahora a ver que (13.7.1) implica que, bajo una rotación finita  $R(\boldsymbol{\theta})$ , se tienen las leyes de transformación

$$\hat{U}(R(\boldsymbol{\theta}))\hat{F}_j\hat{U}^{-1}(R(\boldsymbol{\theta})) = \sum_{j'} R^{-1}(\boldsymbol{\theta})_{jj'}\hat{F}_{j'}. \quad (13.7.2)$$

En efecto; comencemos por considerar el caso infinitesimal,  $|\boldsymbol{\alpha}| \ll 1$ . Utilizando (13.1.2) obtenemos fácilmente

$$R^{-1}(\boldsymbol{\alpha})_{jj'} = \delta_{jj'} + \sum_s \alpha_s \epsilon_{sjj'} + O(\alpha^2).$$

Además,

$$\hat{U}(R(\boldsymbol{\alpha})) = 1 - \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\alpha} \hat{\mathbf{L}} + O(\alpha^2).$$

Por tanto,

$$\begin{aligned} \hat{U}(R(\boldsymbol{\alpha}))\hat{F}_j\hat{U}^{-1}(R(\boldsymbol{\alpha})) &= \left(1 - \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\alpha} \hat{\mathbf{L}}\right) \hat{F}_j \left(1 - \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\alpha} \hat{\mathbf{L}}\right) + O(\alpha^2) \\ &= \hat{F}_j - \frac{i}{\hbar} \sum_s \alpha_s [\hat{L}_s, \hat{F}_j] + O(\alpha^2) \end{aligned}$$

y, utilizando (13.7.1),

$$\begin{aligned} \hat{U}(R(\boldsymbol{\alpha}))\hat{F}_j\hat{U}^{-1}(R(\boldsymbol{\alpha})) &= \hat{F}_j + \sum_s \alpha_s \epsilon_{sjj'} \hat{F}_{j'} + O(\alpha^2) \\ &= \sum_{j'} R^{-1}(\boldsymbol{\alpha})_{jj'} \hat{F}_{j'} + O(\alpha^2). \end{aligned} \quad (13.7.3)$$

para  $\boldsymbol{\theta}$  finito escribimos

$$R(\boldsymbol{\theta}) = (R(\boldsymbol{\theta}/n))^n, \quad \hat{U}(R(\boldsymbol{\theta})) = \left[\hat{U}(R(\boldsymbol{\theta}/n))\right]^n;$$

para gran  $n$ , el ángulo  $\boldsymbol{\theta}/n$  es infinitesimal. Aplicando reiteradamente (13.7.3),

$$\hat{U}(R(\boldsymbol{\theta}))\hat{F}_j\hat{U}^{-1}(R(\boldsymbol{\theta})) = \sum_{j'} R^{-1}(\boldsymbol{\theta})_{jj'} \hat{F}_{j'} + nO((\boldsymbol{\theta}/n)^2)$$

que, en el límite  $n \rightarrow \infty$ , nos produce (13.7.2), como queríamos demostrar.

EJERCICIO: Demuéstrese el recíproco, esto es, que (13.7.2) implica (13.7.1).

*Indicación.* Considérense rotaciones infinitesimales •

EJERCICIO: Demostrar que

$$[\hat{L}^2, \hat{F}_j] = 2i\hbar \sum_s \epsilon_{kjs} \hat{F}_s \hat{L}_k + 2\hbar^2 \hat{F}_j \quad \bullet$$

Podemos sustituir las coordenadas cartesianas de  $\hat{\mathbf{F}}$ ,  $\hat{F}_j$  por las esféricas,  $\hat{F}_\lambda$ ; con la convención de fases de Condon y Shortley,<sup>7</sup>

$$\hat{F}_0 = \hat{F}_3, \quad \hat{F}_\pm = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{F}_1 \pm i\hat{F}_2 \right).$$

Entonces, (13.7.1) nos dice que

$$[\hat{L}_z, \hat{F}_\lambda] = \hbar\lambda \hat{F}_\lambda. \quad (13.7.4)$$

Si  $|l, M\rangle$ ,  $|l', M'\rangle$  son estados con valores bien definidos del momento angular total y de su tercera componente, consideremos el elemento de matriz

$$\langle l', M' | \hat{F}_\lambda | l, M \rangle.$$

Usando (13.7.4) se sigue que

$$\hat{L}_z \hat{F}_\lambda | l, M \rangle = \hbar(M + \lambda) \hat{F}_\lambda | l, M \rangle$$

luego los vectores  $\hat{F}_\lambda | l, M \rangle$  corresponden a tercera componente del momento angular igual a  $\hbar(M + \lambda)$ . Tampoco es complicado, utilizando las relaciones de conmutación de las  $\hat{F}$  con el momento angular total, comprobar que, si  $l = M = 0$ ,

$$\hat{L}^2 \hat{F}_\lambda | 0, 0 \rangle = 2\hbar^2 \hat{F}_\lambda | 0, 0 \rangle$$

es decir, el estado  $\hat{F}_\lambda | 0, 0 \rangle$  corresponde a momento angular total 1 y tercera componente  $\lambda$ , luego será proporcional a  $|1, \lambda\rangle$ . Podemos por tanto escribir

$$\hat{F}_\lambda | 0, 0 \rangle = C | 1, \lambda \rangle$$

y tenemos

$$\langle l', M' | \hat{F}_\lambda | l, M \rangle = C \langle l', M' | 1, \lambda \rangle | l, M \rangle.$$

Finalmente, utilizando los coeficientes de Clebsch–Gordan hemos demostrado la fórmula

$$\langle l', M' | \hat{F}_\lambda | l, M \rangle = (1, \lambda; l, M | l') \delta_{M', M+\lambda} C(l, l', \hat{\mathbf{F}}). \quad (13.7.5)$$

<sup>7</sup> Utilizamos esta convención por consistencia ya que es la que tomamos para los estados  $|l, M\rangle$ .



La constante  $C$  puede depender de  $l$ ,  $l'$  y, ciertamente, de  $\hat{\mathbf{F}}$ ; pero no de  $M$ ,  $M'$  o  $\lambda$ . Éste es el *teorema de Wigner-Eckart*. A las  $C(l, l', \hat{\mathbf{F}})$  se les llama *elementos de matriz reducidos*, y se les denota a veces por

$$C(l, l', \hat{\mathbf{F}}) \equiv \langle l' \| F \| l \rangle.$$

La generalización a *operadores tensoriales* puede verse en los textos de Wigner (1959) o Galindo y Pascual (1978), por ejemplo.

### PROBLEMAS

P.13.1. Hallar el conmutador de las proyecciones del momento angular a lo largo de dos direcciones arbitrarias  $\mathbf{u}$ ,  $\mathbf{v}$ , que definimos por  $\hat{L}_u = \mathbf{u}\hat{\mathbf{L}}$ ,  $\hat{L}_v = \mathbf{v}\hat{\mathbf{L}}$ .

*Solución.*  $[\hat{L}_u, \hat{L}_v] = i\hbar(\mathbf{u} \times \mathbf{v})\hat{\mathbf{L}}$ .

P.13.2. Demostrar la fórmula

$$P_l(\cos \theta) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{-M}^{+M} Y_M^l(\theta_1, \phi_1) Y_M^l(\theta_2, \phi_2)^*$$

donde  $\theta$  es el ángulo entre los dos vectores de componentes angulares  $(\theta_1, \phi_1)$  y  $(\theta_2, \phi_2)$ .

*Solución.* Denotemos por  $\mathbf{r}_a$  a los vectores de componentes angulares  $(\theta_a, \phi_a)$ ,  $a = 1, 2$ . El ángulo  $\theta = \angle(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  es invariante bajo rotaciones simultáneas de los dos  $\mathbf{r}_a$ . La suma de armónicos esféricos también lo es; cf. (13.5.7). Podemos pues escoger el sistema de referencia que queramos; y lo hacemos de forma que  $\theta_1 = \phi_1 = \phi_2 = 0$ ,  $\theta_2 = \theta$ . Utilizando entonces (13.5.2,4) tenemos

$$Y_M^l(0, 0) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{M0}, \quad Y_0^l(\theta, 0) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta)$$

y el resto es trivial.

P.13.3. Calcular  $D_{M0}^l(R)$  sin trabajar en exceso.

*Solución.* Sea  $\mathbf{z}$  un vector unitario a lo largo del eje  $OZ$  y sea  $\mathbf{r}_R = R^{-1}\mathbf{z}$ . De (13.5.7),

$$Y_M^l(\mathbf{r}_R) = \sum_{M'} D_{MM'}^l(R) Y_{M'}^l(\mathbf{z}).$$

Por el problema anterior sabemos que  $Y_{M'}^l(\mathbf{z}) = \delta_{M'0} \sqrt{(2l+1)/4\pi}$ , luego

$$D_{M0}^l(R) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_M^l(R^{-1}\mathbf{z}).$$

P.13.4. Calcular explícitamente los operadores del momento angular para  $l = 1$ .

*Solución.* Representamos los estados como matrices:

$$|1, +1\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1, 0\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1, -1\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

$\hat{L}_0$  es diagonal y tenemos inmediatamente

$$\hat{L}_0 = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Aplicando las relaciones (13.6.7) obtenemos

$$\hat{L}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{L}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

o, para las componentes cartesianas,

$$\hat{L}_1 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{L}_2 = \frac{-\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$



## CAPÍTULO 14.

# El espín

### 14.1. Funciones de onda y operadores de espín

Es un hecho experimental que existen sistemas de una partícula que no están completamente determinados por el valor de una función de onda  $\Psi(\mathbf{r}; t)$ . El ejemplo más conocido es el del fotón, para el que hay que dar, además, su polarización. En la sección 12.3 vimos que también hay que admitir que los electrones tienen un grado de libertad interno, que toma dos valores, para poner en acuerdo el valor teórico y el experimental para la energía de Fermi de un gas de electrones. Aunque no vamos a comenzar por el fotón, lo que sí vamos a tomar de su grado de libertad extra, la polarización, es la propiedad de que cambia al hacer rotaciones en el espacio.

Inspirados por esto, postulamos la existencia, para algunas partículas, de un grado interno de libertad (al que llamaremos *espín*<sup>1</sup>). Al estado de una de estas partículas lo tenemos que especificar, por tanto, por una función con varias componentes,  $\Psi_\lambda(\mathbf{r}; t)$  donde  $\lambda$  describe, precisamente, el grado de libertad de espín. Puesto que sabemos empíricamente que, para todas las partículas conocidas, el número de estados de espín es finito, postulamos que la variable  $\lambda$  es una variable discreta.

Investiguemos ahora cómo se transforman las funciones de onda de una partícula con espín al realizar rotaciones; debido a nuestra hipótesis de que las rotaciones afectan al espín, no sólo el radio vector  $\mathbf{r}$  girará, sino que las  $\lambda$  se mezclarán entre sí. Escribimos pues, omitiendo la variable tiempo,

$$\hat{U}(R(\boldsymbol{\theta}))\Psi_\lambda(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda'} D_{\lambda\lambda'}(R(\boldsymbol{\theta}))\Psi_{\lambda'}(R^{-1}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{r}). \quad (14.1.1)$$

Los números  $D_{\lambda\lambda'}(R(\boldsymbol{\theta}))$  pueden considerarse como los elementos de una matriz cuadrada,<sup>2</sup>  $\underline{D}$ . Igualmente podemos representar a la función de ondas por una matriz vertical de componentes las  $\Psi_\lambda$ , de manera que (14.1.1) puede reescribirse como

$$\hat{U}(R(\boldsymbol{\theta}))\underline{\Psi}(\mathbf{r}) = \underline{D}(R(\boldsymbol{\theta}))\underline{\Psi}(R^{-1}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{r}). \quad (14.1.2a)$$

<sup>1</sup> La palabra *espín* es la castellanización del inglés *spin*, que quiere decir giro; en efecto, una imagen clásica (pero equivocada) del espín lo atribuiría a una rotación intrínseca de las partículas. El espín fue introducido para electrones por Uhlenbeck y Goudsmit, y su teoría desarrollada por Pauli.

<sup>2</sup> Por facilidad de identificación etiquetamos a las matrices en espacio de espín con una tilde por debajo.

El producto escalar lo definimos por

$$\langle \underline{\Phi} | \underline{\Psi} \rangle \equiv \sum_{\lambda} \int d^3r \Phi_{\lambda}^*(\mathbf{r}) \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) = \int d^3r \underline{\Phi}^{\dagger}(\mathbf{r}) \underline{\Psi}(\mathbf{r}). \quad (14.1.2b)$$

La unitariedad de  $\hat{U}$  implica que las matrices  $\underline{D}$  son unitarias. En efecto:

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda} \int d^3r \Phi_{\lambda}^*(\mathbf{r}) \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) &= \langle \underline{\Phi} | \underline{\Psi} \rangle = \langle \hat{U} \underline{\Phi} | \hat{U} \underline{\Psi} \rangle \\ &= \sum_{\lambda} \int d^3r \left\{ \sum_{\lambda'} D_{\lambda\lambda'}(R(\boldsymbol{\theta})) \Phi_{\lambda'}(R^{-1}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{r}) \right\}^* \\ &\quad \times \left\{ \sum_{\lambda''} D_{\lambda\lambda''}(R(\boldsymbol{\theta})) \Psi_{\lambda''}(R^{-1}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{r}) \right\}. \end{aligned}$$

Cambiando de variable de integración por  $\mathbf{r} \rightarrow R^{-1}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{r}$ , y llamando de nuevo  $\mathbf{r}$  a la variable después del cambio, obtenemos que

$$\sum_{\lambda} \int d^3r \Phi_{\lambda}^*(\mathbf{r}) \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda''\lambda'} \int d^3r \Phi_{\lambda'}^*(\mathbf{r}) \left\{ \sum_{\lambda} D_{\lambda\lambda'}^*(R) D_{\lambda\lambda''}(R) \right\} \Psi_{\lambda''}(\mathbf{r}).$$

Puesto que esto ha de ser cierto para cualquier  $\Phi, \Psi$  se sigue que

$$\sum_{\lambda} D_{\lambda\lambda'}^*(R) D_{\lambda\lambda''}(R) = \delta_{\lambda'\lambda''}$$

o, lo que es lo mismo,  $\underline{D}^{\dagger} \underline{D} = 1$ , como queríamos demostrar. De manera similar demostraríamos que las  $\underline{D}$  satisfacen las leyes de grupo:

$$\underline{D}(R)\underline{D}(R') = \underline{D}(RR'), \quad \underline{D}(R^{-1}) = [\underline{D}(R)]^{-1}.$$

Consideremos ahora rotaciones infinitesimales,  $\alpha \ll 1$ . Definimos  $\underline{\mathbf{S}}$  por<sup>3</sup>

$$\underline{D}(R(\boldsymbol{\alpha})) = 1 - \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\alpha} \underline{\mathbf{S}} + O(\alpha^2),$$

y utilizando (13.1.4), la ecuación (14.1.2a) nos dice que

$$\hat{U}(R(\boldsymbol{\alpha})) \underline{\Psi}(\mathbf{r}) = \left( 1 - \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\alpha} \hat{\mathbf{L}} - \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\alpha} \underline{\mathbf{S}} \right) \underline{\Psi}(\mathbf{r}) + O(\alpha^2) \quad (14.1.3a)$$

donde  $\hat{\mathbf{L}}$  es el operador momento angular,

$$\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times (-i\hbar\nabla).$$

<sup>3</sup>  $\underline{\mathbf{S}}$  es un operador, pero no le colocamos un circunflejo porque la tilde ya indica este carácter

(Cuando es necesario precisar, a  $\hat{\mathbf{L}}$  se le llama *momento angular orbital*; como veremos, la presencia del espín implica un momento angular intrínseco, además del orbital). En componentes,

$$\hat{U}(R(\boldsymbol{\theta}))\Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) = \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) - \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\alpha} \hat{\mathbf{L}} \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) - \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\alpha} \sum_{\lambda'} \mathbf{S}_{\lambda\lambda'} \Psi_{\lambda'}(\mathbf{r}) + O(\alpha^2). \quad (14.1.3b)$$

Las relaciones de conmutación de  $\hat{L}_j$  y  $\underline{S}$  son muy sencillas: puesto que actúan en variables distintas conmutan,

$$[\hat{L}_j, \underline{S}_k] = 0; \quad (14.1.4)$$

pero las reglas de conmutación de las  $\underline{S}_k$  entre sí no son triviales de hallar. Para encontrarlas comenzamos por considerar rotaciones finitas. Definimos el *momento angular total*,  $\hat{\mathbf{J}}$  por

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \underline{\mathbf{S}} \quad (14.1.5)$$

y escribimos, para  $\boldsymbol{\theta}$  finito,

$$\hat{U}(R(\boldsymbol{\theta})) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[ \hat{U} \left( R \left( \frac{\boldsymbol{\theta}}{n} \right) \right) \right]^n$$

vemos que (14.1.3a) nos implica que

$$\hat{U}(R(\boldsymbol{\theta})) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\boldsymbol{\theta}}{n} \hat{\mathbf{J}} + O(1/n^2) \right]^n = e^{-i\boldsymbol{\theta} \hat{\mathbf{J}}/\hbar}. \quad (14.1.6a)$$

Puesto que  $\hat{\mathbf{L}}$  y  $\underline{\mathbf{S}}$  conmutan podemos escribir esto también como

$$\hat{U}(R(\boldsymbol{\theta})) = e^{-i\boldsymbol{\theta} \hat{\mathbf{L}}/\hbar} e^{-i\boldsymbol{\theta} \underline{\mathbf{S}}/\hbar}. \quad (14.1.6b)$$

A segundo orden,

$$\hat{U}(R(\boldsymbol{\theta})) = 1 - \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\theta} \hat{\mathbf{J}} + \frac{i^2}{2! \hbar^2} (\boldsymbol{\theta} \hat{\mathbf{J}})^2 + O(\theta^3). \quad (14.1.7)$$

Si consideramos las rotaciones  $R_x(\alpha)$ ,  $R_y(\beta)$  alrededor de los ejes  $OX$ ,  $OY$  respectivamente, un cálculo sencillo (utilizando, por ejemplo, las fórmulas del Apéndice III) nos dice que

$$R_x(\alpha) R_y(\beta) R_x^{-1}(\alpha) R_y^{-1}(\beta) = R_z(\alpha\beta) + O((\alpha\beta)^2),$$

donde  $R_z(\alpha\beta)$  es la correspondiente rotación alrededor del eje  $OZ$ . Por tanto, también para los  $\hat{U}$ ,

$$\hat{U}(R_x(\alpha)) \hat{U}(R_y(\beta)) \hat{U}^{-1}(R_x(\alpha)) \hat{U}^{-1}(R_y(\beta)) = \hat{U}(R_z(\alpha\beta)) + O((\alpha\beta)^2).$$

Desarrollando como en (14.1.7) y reagrupando, esto nos da

$$\hat{U}(R_x(\alpha)) \hat{U}(R_y(\beta)) \hat{U}^{-1}(R_x(\alpha)) \hat{U}^{-1}(R_y(\beta)) = 1 - \frac{\alpha\beta}{\hbar^2} [\hat{J}_x, \hat{J}_y] + O(\alpha^3, \beta^3)$$

(de hecho, la primera corrección no nula resulta ser de orden más alto,  $O(\alpha^2\beta^2)$ ).

Por otra parte, desarrollando directamente,

$$\hat{U}(R_z(\alpha\beta)) = 1 - \frac{i}{\hbar} \alpha\beta \hat{J}_z + O((\alpha\beta)^2);$$

igualando resulta que se tiene

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar \hat{J}_z$$

y, permutando cíclicamente,

$$[\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i\hbar \sum_l \epsilon_{jkl} \hat{J}_l. \quad (14.1.8)$$

Pero  $\hat{J}_j = \hat{L}_j + \hat{S}_j$ ; las  $\hat{L}_j$  satisfacen relaciones de conmutación como las (14.1.8), y las  $\hat{L}_j$  conmutan con las  $\hat{S}_k$ : luego (14.1.8) implica que

$$[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar \sum_l \epsilon_{jkl} \hat{S}_l, \quad (14.1.9)$$

es decir, las  $\hat{S}$  satisfacen relaciones de conmutación idénticas a las del momento angular. Esto acaba por identificar a las  $\hat{S}$  como operadores correspondientes a un momento angular *intrínseco* a las partículas (*espín*).

## 14.2. Valores propios del espín. Momento angular total

A diferencia del momento angular orbital, donde la representación  $\hat{L}_z = -i\hbar\partial/\partial\phi$  nos permitía concluir que los valores propios de  $\hat{L}_z$  tenían que ser múltiplos enteros de  $\hbar$ , no hay razón para que ocurra lo mismo para los valores propios de las  $\hat{S}_j$ . Sin embargo, como las relaciones de conmutación de las  $\hat{L}_j$  y  $\hat{S}_j$  son las mismas, podemos repetir buena parte de la discusión del capítulo 13. Si denotamos por  $\hbar s_3$  a los valores propios de  $\hat{S}_z$  y diagonalizamos simultáneamente  $\hat{S}^2$  y  $\hat{S}_z$  encontramos que

$$\hat{S}^2 \underline{\Psi}^{(s, s_3)} = \hbar^2 s(s+1) \underline{\Psi}^{(s, s_3)}$$

donde  $s = \max |s_3|$ . Además, los valores posibles de  $s_3$  son

$$s_3 = -s, -s+1, \dots, s,$$

en total  $2s+1$  valores. Desde luego, este número  $2s+1$  ha de ser un entero, lo que sólo es posible si

$$s = \frac{\text{entero}}{2} \geq 0 :$$

los valores de  $s$ , al que llamaremos *espín total* (o, simplemente, *espín*) son los enteros o semienteros<sup>4</sup> positivos.  $1/2, 1, 3/2, \dots$ , o cero, si la partícula no tiene espín. Los valores posibles de  $s_3$  son también enteros o semienteros, positivos y negativos. Dos propiedades que, al nivel que estamos trabajando, son empíricas (aunque pueden demostrarse en una teoría completamente relativista) son que el espín total es una propiedad intrínseca de la partícula, y que todos los bosones tienen espín entero, y todos los fermiones semientero.

Nótese que el espín es un efecto puramente cuántico; al ser proporcional a  $\hbar$ , con una constante de proporcionalidad menor o igual en módulo que  $s$ , su efecto desaparece en el límite clásico. Por otra parte, partículas sin dimensiones y elementales, como electrones, neutrinos o quarks, tienen espín, algo que no tiene análogo clásico.

Una consecuencia interesante de que  $s_3$  no tenga que ser entero es que, cuánticamente, una rotación por  $2\pi$  no siempre es la unidad. En efecto: en la base  $\underline{\Psi}^{(s,s_3)}$  con

$$\mathbf{S}^2 \underline{\Psi}^{(s,s_3)} = \hbar^2 s(s+1) \underline{\Psi}^{(s,s_3)}, \quad \underline{S}_z \underline{\Psi}^{(s,s_3)} = \hbar s_3 \underline{\Psi}^{(s,s_3)} \quad (14.2.1)$$

la matriz  $\underline{S}_z$  es diagonal:

$$\underline{S}_z = \hbar \begin{pmatrix} s & & & 0 \\ & s-1 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & -s \end{pmatrix} \quad (14.2.2)$$

luego

$$D(R_z(2\pi)) = e^{-i2\pi s_3} = \begin{cases} 1, & \text{si } s = \text{entero} \\ -1, & \text{si } s = \text{semientero.} \end{cases}$$

Por tanto, una rotación por  $2\pi$  cambia el *signo* de la función de onda de partículas con espín semientero. Este cambio de signo puede observarse por medio de experimentos de interferencia y, de hecho, ha sido observado.

Consideramos ahora un estado con tercera componente de espín bien definida, ec. (14.2.1), y, además, momento angular total y tercera componente bien definidos.

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \underline{\Psi}^{(s,s_3;l,M)} = \hbar l(l+1) \underline{\Psi}^{(s,s_3;l,M)} \quad \hat{L}_z \underline{\Psi}^{(s,s_3;l,M)} = \hbar M \underline{\Psi}^{(s,s_3;l,M)}.$$

El operador momento angular total es  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ . Para hallar sus valores propios tenemos que componer  $\hat{\mathbf{L}}$  y  $\hat{\mathbf{S}}$  como momentos angulares que son. La discusión de la sección 13.6 puede repetirse sin cambios: si denotamos por  $\hbar j(j+1)$  a los valores propios de  $\hat{\mathbf{J}}^2$  y por  $\hbar j_3$  a los de  $\hat{J}_z$  tenemos que

$$j = l + s, l + s - 1, \dots, |l - s|; \quad j_3 = s_3 + M. \quad (14.2.3)$$

<sup>4</sup> Utilizamos la nomenclatura usual de llamar "semienteros" a los números de la forma (impar)/2.



Puesto que  $\underline{\mathbf{S}}$  conmuta con todas las variables espaciales (y el tiempo) se sigue que una base de las funciones de onda la forman aquellas en las que el espín y las variables espacio-temporales se factorizan, esto es, de la forma

$$\underline{\Psi}(\mathbf{r}; t) = \underline{\chi}^{(s, s_3)} \underline{\Psi}(\mathbf{r}; t) \quad (14.2.4)$$

y  $\underline{\chi}^{(s, s_3)}$ , conocida como la *función de onda de espín*, no depende<sup>5</sup> de  $\mathbf{r}$ ,  $t$ . Una función general será combinación lineal de las (14.2.4).

Un tipo de expresiones muy comunes, en especial al tratar interacciones dependientes del espín, son sumas sobre espines como

$$\sum_{s_3, s'_3} \left| \underline{\chi}^{(s, s_3)\dagger} \underline{M} \underline{\chi}^{(s, s'_3)} \right|^2$$

donde  $\underline{M}$  es una matriz en el espacio de espín. Si normalizamos las funciones de onda de espín a

$$\underline{\chi}^{(s, s_3)\dagger} \underline{\chi}^{(s, s'_3)} = \delta_{s_3 s'_3}$$

entonces es inmediato comprobar que se tiene

$$\sum_{s_3, s'_3} \left| \underline{\chi}^{(s, s_3)\dagger} \underline{M} \underline{\chi}^{(s, s'_3)} \right|^2 = \text{Tr} \underline{M} \underline{M}^\dagger.$$

Una última observación: recordamos que, puesto que las  $\hat{\underline{\mathbf{J}}}$  y  $\underline{\mathbf{S}}$  satisfacen las mismas relaciones de conmutación que las  $\hat{\underline{\mathbf{L}}}$ , resulta que *todas las relaciones algebraicas* obtenidas para el momento angular orbital son válidas para las  $\hat{\underline{\mathbf{J}}}$  y  $\underline{\mathbf{S}}$  con los cambios obvios:  $l$  por  $j$  o por  $s$ ,  $M$  por  $j_3$  o por  $s_3$ . En particular, esto es cierto para las ecuaciones (13.4.10), (13.6.9), (13.6.10), (13.7.5) y (13.8.2).

<sup>5</sup> Esto no es cierto en teoría relativista; un ejemplo lo veremos en el caso del fotón, cuya función de onda de espín depende del momento.

### 14.3. Partículas de espín 1/2. Matrices de Pauli

Un caso particularmente importante de partículas con espín son las de espín  $1/2$ , que incluye a electrones, protones, neutrones y quarks. Vamos a determinar en este caso la forma explícita de los  $\underline{S}$  y  $\underline{D}$ .

Puesto que, para  $s = 1/2$ , los valores posibles de  $s_3$  son  $\pm 1/2$ ,  $\underline{S}$  y  $\underline{D}$  serán representados por matrices  $2 \times 2$ . Escogemos la base  $\chi_{\pm}$  con

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \underline{S}_z \chi_{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2} \chi_{\pm}. \quad (14.3.1)$$

A los  $\chi_{\pm}$  se les conoce como *espinores de Pauli*. En esta base, obviamente,

$$\underline{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Para encontrar los demás operadores de espín, consideramos las combinaciones

$$\underline{S}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\underline{S}_1 \pm i\underline{S}_2)$$

y aplicamos lo equivalente a las ecuaciones (13.4.8), (13.4.10), con los cambios apropiados. Después de un cálculo elemental obtenemos (escribiendo las tres componentes a la vez)

$$\underline{S}_j = \frac{\hbar}{2} \underline{\sigma}_j, \quad (14.3.2a)$$

donde las  $\underline{\sigma}_j$  son las llamadas *matrices de Pauli*,

$$\underline{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (14.3.2b)$$

Estas matrices pueden considerarse como las componentes de un vector matricial,  $\underline{\sigma}$ . Algunas propiedades útiles de las matrices de Pauli, que se obtienen por cálculo directo, son las siguientes:

$$\begin{aligned} \underline{\sigma}_j^\dagger &= \underline{\sigma}_j, & [\underline{\sigma}_j, \underline{\sigma}_k] &= 2i \sum_l \epsilon_{jkl} \underline{\sigma}_l, & \{\underline{\sigma}_j, \underline{\sigma}_k\} &= 2\delta_{jk}; \\ \underline{\sigma}_2 \underline{\sigma}_j \underline{\sigma}_2 &= -\underline{\sigma}_j^*, & \text{Tr } \underline{\sigma}_j &= 0, & \text{Tr } \underline{\sigma}_j \underline{\sigma}_k &= 2\delta_{jk}. \end{aligned} \quad (14.3.3a)$$

El conjunto de las  $\underline{\sigma}_j$  y la matriz unidad es completo en el conjunto de todas las matrices  $2 \times 2$ , es decir, cualquier matriz  $2 \times 2$ ,  $\underline{A}$ , se puede escribir como combinación de ellas:

$$\underline{A} = a_0 + \sum_{j=1}^3 a_j \underline{\sigma}_j; \quad a_0 = \frac{1}{2} \text{Tr } \underline{A}, \quad a_j = \frac{1}{2} \text{Tr } \underline{A} \underline{\sigma}_j. \quad (14.3.3b)$$

Una rotación finita por el ángulo  $\theta$  viene dada por

$$\underline{D}(R(\theta)) = e^{-i\theta \underline{\sigma}} = \cos \frac{\theta}{2} - \frac{i}{\theta} (\theta \underline{\sigma}) \text{sen } \frac{\theta}{2}. \quad (14.3.4)$$

Para demostrarlo, basta darse cuenta de que, gracias las relaciones (14.3.3), se tiene

$$(\mathbf{v}\boldsymbol{\sigma})^2 = \mathbf{v}^2$$

para cualquier vector  $\mathbf{v}$ . Si  $\mathbf{v}$  es paralelo a  $OZ$ , (14.3.4) se simplifica a

$$D = \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{pmatrix}.$$

Los coeficientes de Clebsch–Gordan para composición de espín 1/2 y cualquier momento angular se pueden encontrar en el Apéndice III.

#### 14.4. Función de onda del fotón. Espín del fotón

En esta sección vamos a estudiar la función de onda de un fotón libre; las interacciones de fotones requieren un formalismo que no desarrollaremos hasta el capítulo 20. Comenzamos por recordar las ecuaciones de Maxwell para el campo electromagnético en el vacío,

$$\nabla\boldsymbol{\mathcal{E}} = \nabla\boldsymbol{\mathcal{B}} = 0; \quad \nabla \times \boldsymbol{\mathcal{E}} = -\frac{1}{c} \partial_t \boldsymbol{\mathcal{B}}, \quad \nabla \times \boldsymbol{\mathcal{B}} = \frac{1}{c} \partial_t \boldsymbol{\mathcal{E}}. \quad (14.4.1)$$

$\boldsymbol{\mathcal{E}}$  es el campo eléctrico,  $\boldsymbol{\mathcal{B}}$  el magnético y  $c$  la velocidad de la luz. Podemos expresar  $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ ,  $\boldsymbol{\mathcal{B}}$  en términos del *potencial vector*  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  y el escalar  $\phi(\mathbf{r}, t)$ , de forma que

$$\boldsymbol{\mathcal{E}} = -\frac{1}{c} \partial_t \mathbf{A} - \nabla\phi, \quad \boldsymbol{\mathcal{B}} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (14.4.2)$$

Las ecuaciones de Maxwell nos dan, para  $\mathbf{A}$  y  $\phi$  las condiciones

$$\begin{aligned} \frac{1}{c^2} \partial_t^2 \mathbf{A} - \Delta \mathbf{A} &= -\frac{1}{c} \partial_t \nabla\phi - \nabla(\text{div } \mathbf{A}), \\ -\frac{1}{c} \partial_t(\text{div } \mathbf{A}) &= \Delta\phi. \end{aligned} \quad (14.4.3)$$

Dados  $\mathbf{A}$  y  $\phi$ , tanto  $\boldsymbol{\mathcal{E}}$  como  $\boldsymbol{\mathcal{B}}$  vienen fijados unívocamente por (14.4.2); pero ni  $\mathbf{A}$  ni  $\phi$  están unívocamente definidos. En efecto, una *transformación de gauge*

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) &\rightarrow \mathbf{A}_f(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla f(\mathbf{r}, t), \\ \phi(\mathbf{r}, t) &\rightarrow \phi_f(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c} \partial_t f(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (14.4.4)$$

cambia  $\mathbf{A}$  y  $\phi$  dejando invariantes a  $\boldsymbol{\mathcal{E}}$  y  $\boldsymbol{\mathcal{B}}$  (que son las cantidades medibles). Para eliminar esta arbitrariedad tenemos que imponer condiciones suplementarias (*fijar el gauge*). Nosotros vamos a requerir la condición de que, en ausencia de cargas eléctricas, el potencial escalar se anule;

$$\phi(\mathbf{r}, t) \equiv 0. \quad (14.4.5a)$$

Esto no fija totalmente el gauge, ya que aún podemos hacer transformaciones

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \mathbf{A}_{f_0}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla f_0(\mathbf{r})$$

con  $f_0(\mathbf{r})$  independiente del tiempo. Debido a la segunda ecuación de Maxwell (14.4.3) resulta que, para  $\phi(\mathbf{r}, t) = 0$ ,  $\text{div } \mathbf{A}$  es independiente del tiempo; por tanto, podemos ajustar  $f_0$  de manera que

$$\text{div } \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \equiv 0. \quad (14.4.5b)$$

Dados  $\mathbf{A}$ ,  $\phi$ , la función que nos elimina  $\phi$  es

$$f(\mathbf{r}, t) = c \int_{t_0}^t dt' \phi(\mathbf{r}, t')$$

y la que elimina  $\text{div } \mathbf{A}$  es

$$f_0(\mathbf{r}) = \int d^3r' \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \text{div } \mathbf{A}(\mathbf{r}', t).$$

El gauge en que se satisfacen las condiciones (14.4.5) es conocido como *gauge de Coulomb*, o *de la radiación*. En él las ecuaciones de Maxwell se escriben

$$\begin{aligned} \frac{1}{c^2} \partial_t^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \Delta \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) &= 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) &= 0. \end{aligned} \quad (14.4.6)$$

Estas ecuaciones describen el desarrollo en el tiempo de una onda transversa; debido a la dualidad onda-partícula vamos a interpretar a  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  como la función de onda de un fotón libre.<sup>6</sup>

Las ecuaciones (14.4.6) nos proporcionan la base para escribir una ecuación de tipo Schrödinger. Para ello definimos el hamiltoniano libre de un fotón,  $\hat{H}$ , por

$$\hat{H} = \hbar c \sqrt{-\Delta}; \quad (14.4.7a)$$

cambiando la notación de  $\mathbf{A}$  a  $\Psi$  postulamos la ecuación

$$i\hbar \partial_t \Psi(\mathbf{r}; t) = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}; t) \quad (14.4.7b)$$

y la condición suplementaria

$$\text{div } \Psi(\mathbf{r}; t) = 0. \quad (14.4.7c)$$

<sup>6</sup> En realidad, el formalismo de función de ondas no es apropiado para fotones; la cantidad  $|\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)|^2$  sólo puede considerarse de una forma aproximada como la probabilidad de encontrar un fotón en el punto  $\mathbf{r}$ . Debido a esto algunos autores (por ejemplo, Akhiezer y Berestetskii, 1963) consideran como más apropiado representar la función de onda por el par  $\mathcal{E}$ ,  $\mathcal{B}$  ya que la cantidad  $|\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)|^2 + |\mathcal{B}(\mathbf{r}, t)|^2$  corresponde a la densidad de energía en el punto  $\mathbf{r}$ . Sin embargo, esta solución tampoco es satisfactoria, ya que puede demostrarse que no es posible *localizar* un fotón. De hecho, una descripción satisfactoria de estados de fotones sólo es posible con el formalismo de campos cuánticos que veremos en el capítulo 20. Nosotros, sin embargo, continuamos con la descripción en términos de  $\mathbf{A}$  ya que proporciona una buena introducción al formalismo correcto.

efectivamente, reiterando (14.4.7a) obtenemos que  $\Psi$  satisface una ecuación como (14.4.6),

$$\partial_t^2 \Psi(\mathbf{r}, t) = c^2 \Delta \Psi(\mathbf{r}, t).$$

El operador  $(-\Delta)^{-1/2}$  tiene que definirse como un operador integral,

$$(-\Delta)^{-1/2} f(\mathbf{r}) = \int d^3 r' K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') f(\mathbf{r}'), \quad K(\boldsymbol{\rho}) \equiv \frac{1}{\hbar(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p |\mathbf{p}| e^{i\mathbf{p}\boldsymbol{\rho}} \quad (14.4.8)$$

a través de la transformada de Fourier de la ecuación (14.4.7a), que pasamos a considerar.

En espacio de momentos, (14.4.7a,b) se convierten en

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \Psi(\mathbf{p}, t) &= c|\mathbf{p}| \Psi(\mathbf{p}, t), \\ \mathbf{p} \Psi(\mathbf{p}, t) &= 0. \end{aligned} \quad (14.4.9)$$

(ecuación de Schrödinger en espacio de momentos).

Busquemos ahora estados con momento bien definido,

$$\hat{P}_j \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_j} \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = p_j \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t). \quad (14.4.10)$$

Esto implica

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{C}(\mathbf{p}, t) e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} \quad (14.4.11)$$

y, pidiendo además que se satisfagan las ecuaciones (14.4.7),

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) &= \epsilon(\mathbf{p}) e^{-iE(p)t/\hbar} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}, \\ \mathbf{p}\epsilon(\mathbf{p}) &= 0, \quad E(p) = c|\mathbf{p}|. \end{aligned} \quad (14.4.12)$$

Reconocemos la conexión entre momento y energía para una partícula de masa cero, y tenemos también las relaciones de Einstein y de de Broglie  $E = \hbar\omega$ ,  $p = \hbar\nu/c$ ,  $\omega = 2\pi\nu$ .

Veamos ahora el momento angular y el espín del fotón, lo que hacemos en espacio de momentos. Puesto que  $\Psi(\mathbf{p}, t)$  es un vector, la acción de una rotación sobre  $\Psi$  vendrá dada por

$$R : \Psi_j(\mathbf{p}, t) \rightarrow \hat{U} \Psi_j(\mathbf{p}, t) = \sum_{j'} R_{jj'} \Psi_{j'}(R^{-1}\mathbf{p}, t).$$

Para un ángulo infinitesimal,  $\boldsymbol{\alpha}$ ,

$$\begin{aligned} &\hat{U}(R(\boldsymbol{\alpha})) \Psi_j(\mathbf{p}, t) \\ &= \Psi_j(\mathbf{p}, t) - \sum_{j'l} \epsilon_{jlj'} \Psi_{j'}(\mathbf{p}, t) - (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}) \nabla_{\mathbf{p}} \Psi_j(\mathbf{p}, t) + O(\alpha^2) \\ &= \Psi_j(\mathbf{p}, t) - \sum_l \alpha_l \sum_{j'} \epsilon_{jlj'} \Psi_{j'}(\mathbf{p}, t) - \frac{i}{\hbar} \sum_l \alpha_l \hat{L}_{p,l} \Psi_j(\mathbf{p}, t) + O(\alpha^2) \end{aligned} \quad (14.4.13a)$$

donde

$$\hat{\mathbf{L}}_p = (i\hbar\nabla_p) \times \mathbf{p} \quad (14.4.13b)$$

es el operador momento angular en representación de momentos. Comparando con (14.1.3) obtenemos que el operador de espín para el fotón es  $\underline{\mathbf{S}}$  con

$$\underline{\mathbf{S}}\Psi_j = \sum_{j'} \mathbf{S}_{jj'}\Psi_{j'} \quad (14.4.14a)$$

y las componentes de  $\mathbf{S}_{jj'}$ ,  $(S_a)_{jj'}$  vienen dadas por

$$(S_a)_{jj'} = -i\hbar\epsilon_{ajj'}, \quad a = 1, 2, 3. \quad (14.4.14b)$$

Busquemos ahora los valores y vectores propios de una de las componentes de  $\underline{\mathbf{S}}$ , digamos  $\underline{S}_z = \underline{S}_3$ :

$$\underline{S}_z \Psi^{(\eta)} = \hbar\eta \Psi^{(\eta)}. \quad (14.4.15)$$

Utilizando (14.4.14), tenemos las condiciones

$$-i\hbar\underline{\Psi}_2^{(\eta)} = \hbar\eta\underline{\Psi}_1^{(\eta)}, \quad i\hbar\underline{\Psi}_1^{(\eta)} = \hbar\eta\underline{\Psi}_2^{(\eta)}. \quad (14.4.16a)$$

Combinándolas resulta que  $\eta^2\underline{\Psi}_i^{(\eta)} = \underline{\Psi}_i^{(\eta)}$ ,  $i = 1, 2$ , lo que sólo es posible si  $\eta = \pm 1$ . La tercera componente no viene dada por (14.4.16a), pero está fijada por la condición de transversalidad en términos de las otras dos:

$$\mathbf{p}\Psi^{(\eta)} = p_1\underline{\Psi}_1^{(\eta)} + p_2\underline{\Psi}_2^{(\eta)} + p_3\underline{\Psi}_3^{(\eta)} = 0. \quad (14.4.16b)$$

El valor  $\eta = 0$  no es posible para la tercera componente del espín ya que requeriría  $\underline{\Psi}_1 = \underline{\Psi}_2 = 0$  y, de (14.4.16b), también<sup>7</sup>  $\underline{\Psi}_3 = 0$  es decir,  $\Psi$  sería idénticamente cero. Esta propiedad de que sólo los valores  $\pm s$  ( $\pm 1$ , para el fotón) de la tercera componente del espín sean posibles es característica de partículas sin masa, y se debe a la relación entre espín y variables espaciotemporales característica de este tipo de partículas.

El análisis que hemos hecho es poco riguroso. Un estudio completo de estados de partículas sin masa se debe a Wigner y puede encontrarse, por ejemplo, en el libro del autor (Ynduráin, 1966).

Construyamos, para terminar, la función de onda de un fotón con momento y una componente del espín bien definidos. Para ello consideramos la componente del espín a lo largo del momento, a lo que se llama *helicidad*. El correspondiente operador es

$$\underline{S}_p = \frac{1}{|\mathbf{p}|} \mathbf{p}\underline{\mathbf{S}}. \quad (14.4.17)$$

<sup>7</sup> Suponemos  $p_3 \neq 0$ ; el caso  $p_3 = 0$  hay que tomarlo como un límite de  $p_3 \neq 0$ ,  $p_3 \rightarrow 0$ .

Requerimos pues

$$\begin{aligned}\hat{P}_j \Psi_{\mathbf{p}}^{(\eta)}(\mathbf{r}, t) &= p_j \Psi_{\mathbf{p}}^{(\eta)}(\mathbf{r}, t), \\ \hat{S}_p \Psi_{\mathbf{p}}^{(\eta)}(\mathbf{r}, t) &= \hbar \eta \Psi_{\mathbf{p}}^{(\eta)}(\mathbf{r}, t).\end{aligned}\quad (14.4.18)$$

Como sabemos, la primera condición nos dice que (cf. (14.4.2))

$$\Psi_{\mathbf{p}}^{(\eta)}(\mathbf{r}, t) = \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{p}, \eta) e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - c|\mathbf{p}|t)/\hbar}; \quad (14.4.19a)$$

la segunda nos permite encontrar los  $\boldsymbol{\epsilon}$ , llamados *vectores de polarización* que son, obviamente, la parte de espín de la función de onda del fotón. Para hallarlos comenzamos por escoger el eje  $OZ$  a lo largo de  $\mathbf{p}$  de manera que  $\hat{S}_p$  coincide con  $\hat{S}_z$ . (14.4.16) nos dice que en este sistema de coordenadas (que denotamos por el superíndice 0),

$$\epsilon_2^{(0)}(\mathbf{p}, \eta) = i\eta \epsilon_1^{(0)}(\mathbf{p}, \eta); \quad \epsilon_3^{(0)}(\mathbf{p}, \eta) = 0.$$

Podemos tomar como solución los siguientes valores de los  $\boldsymbol{\epsilon}^{(0)}$ :

$$\epsilon_1^{(0)}(\mathbf{p}, \eta) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \epsilon_2^{(0)}(\mathbf{p}, \eta) = \frac{i}{\sqrt{2}}, \quad \epsilon_3^{(0)}(\mathbf{p}, \eta) = 0. \quad (14.4.19b)$$

Las  $\boldsymbol{\epsilon}$  satisfacen la normalización

$$\boldsymbol{\epsilon}^{(0)}(\mathbf{p}, \eta)^* \boldsymbol{\epsilon}^{(0)}(\mathbf{p}, \eta') = \delta_{\eta\eta'}.$$

Para un sistema de coordenadas arbitrario obtenemos las  $\boldsymbol{\epsilon}$  correspondientes realizando un giro  $R(\mathbf{z} \rightarrow \mathbf{p}/p)$  alrededor del eje  $\mathbf{z} \times \mathbf{p}$ , que nos lleva el eje  $OZ$  sobre  $\mathbf{p}$  ( $\mathbf{z}$  es un vector unitario a lo largo de  $OZ$ ). Este giro podemos caracterizarlo por el vector  $\boldsymbol{\alpha}$ ,

$$\boldsymbol{\alpha} = \frac{\alpha}{p \sin \alpha} (\mathbf{z} \times \mathbf{p}), \quad \cos \alpha = p_3/p.$$

Al realizar el giro, pasamos de  $\boldsymbol{\epsilon}^{(0)}$  a  $\boldsymbol{\epsilon} = R\boldsymbol{\epsilon}^{(0)}$ . Un sencillo cálculo, utilizando (13.1.1), nos da

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{p}, \eta) &= (\cos \alpha) \boldsymbol{\epsilon}^{(0)}(\mathbf{p}, \eta) + \frac{1 - \cos \alpha}{p^2 \sin^2 \alpha} \left[ p_1 \epsilon_2^{(0)}(\mathbf{p}, \eta) - p_2 \epsilon_1^{(0)}(\mathbf{p}, \eta) \right] (\mathbf{z} \times \mathbf{p}) \\ &\quad - \frac{\mathbf{z} \boldsymbol{\epsilon}^{(0)}(\mathbf{p}, \eta)}{p} \mathbf{z} \\ &= \frac{p_3}{p} \boldsymbol{\epsilon}^{(0)}(\mathbf{p}, \eta) + \frac{i\eta p_1 - p_2}{\sqrt{2} p(p + p_3)} (\mathbf{z} \times \mathbf{p}) - \frac{p_1 - i\eta p_2}{\sqrt{2} p} \mathbf{z};\end{aligned}\quad (14.4.19c)$$

$$\cos \alpha = \frac{p_3}{p}, \quad \frac{1 - \cos \alpha}{p^2 \sin^2 \alpha} = \frac{1}{p(p + p_3)}.$$

Puesto que  $R$  es ortogonal seguiremos teniendo

$$\mathbf{p}\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{p}, \eta) = 0, \quad \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{p}, \eta)^* \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{p}, \eta') = \delta_{\eta\eta'}; \quad (14.4.19d)$$

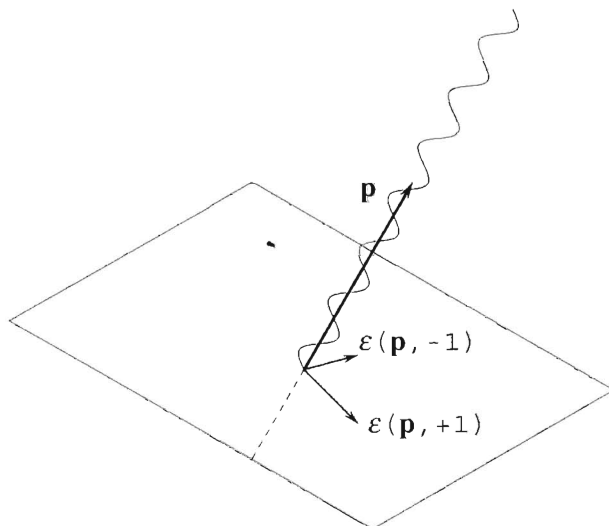


FIGURA 14.4.1. El plano subtendido por  $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{p}, +1)$  y  $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{p}, -1)$  es ortogonal a la dirección de avance del fotón.

las  $\boldsymbol{\epsilon}$  son dos vectores ortogonales entre sí, y situados en el plano perpendicular a  $\mathbf{p}$  (fig. 14.4.1).

Las fases de los  $\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{p}, \eta)$  no son las que se siguen de las convenciones de Condon y Shortley; unos vectores polarización con fases de Condon y Shortley son los  $\boldsymbol{\chi}$  con

$$\boldsymbol{\chi}(\mathbf{p}, \eta) = -\eta \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{p}, \eta). \quad (14.4.19e)$$

La normalización de las  $\Psi$  es, con cualquier elección ( $\boldsymbol{\epsilon}$  o  $\boldsymbol{\chi}$ )

$$\int d^3r \Psi_{\mathbf{p}}^{(\eta)}(\mathbf{r}, t)^* \Psi_{\mathbf{p}'}^{(\eta')}(\mathbf{r}, t) = (2\pi\hbar)^3 \delta_{\eta\eta'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \quad (14.4.19f)$$

En lugar de los  $\boldsymbol{\epsilon}$  se utilizan a veces los *vectores de polarización cartesianos*  $\mathbf{e}$ ; cuando  $OZ$  es paralelo a  $\mathbf{p}$ ,

$$\begin{aligned} e_1^{(0)}(\eta = +1) &= 1, & e_j^{(0)}(\eta = +1), & j = 2, 3; \\ e_2^{(0)}(\eta = -1) &= 1, & e_k^{(0)}(\eta = -1), & j = 1, 3. \end{aligned}$$



Los  $\mathbf{e}$  vienen dados en función de los  $\mathbf{e}^{(0)}$  por una fórmula idéntica a la que pasa de  $\mathbf{e}^{(0)}$  a  $\boldsymbol{\epsilon}$ , (14.4.19c) Nótese que los  $\mathbf{e}$  no son vectores propios del operador de espín, pero corresponden, en electromagnetismo clásico, a una orientación paralela a  $\mathbf{e}$  del campo eléctrico,  $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ .

EJERCICIO: Escribir los  $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ ,  $\boldsymbol{\mathcal{B}}$  que corresponden al  $\Psi$  de (14.4.19). Comparar con las ondas electromagnéticas en la teoría de Maxwell •

EJERCICIO: Comprobar que se tiene

$$\sum_{\eta=\pm 1} \epsilon_i(\mathbf{p}, \eta) \epsilon_j^*(\mathbf{p}, \eta) = \delta_{ij} - \frac{p_i p_j}{p^2}. \quad \bullet \quad (14.4.20)$$

### PROBLEMAS

P.14.1. Calcular los estados propios de  $n\mathbf{S}$  para una partícula de espín  $1/2$ ;  $\mathbf{n}^2 = 1$ .

Solución. Con  $C$  una constante arbitraria,

$$\chi_{\pm}^n = C \begin{pmatrix} n_z \pm 1 \\ n_x + i n_y \end{pmatrix}, \quad n\mathbf{S}\chi_{\pm}^n = \frac{\pm \hbar}{2} \chi_{\pm}^n.$$

P.14.2. Dado un  $\underline{S}_i$ , componente  $i$  del operador de espín para una partícula de espín  $s$ , encontrar las potencias independientes de  $\underline{S}_i$ .

Solución. Puesto que los valores propios de  $\underline{S}_i$  son  $-\hbar s, \dots, +\hbar s$ , se tiene

$$(\underline{S}_i - \hbar(-s))(\underline{S}_i - \hbar(-s+1)) \cdots (\underline{S}_i - \hbar s) = 0$$

(para verlo, basta diagonalizar  $\underline{S}_i$ ). Por tanto,  $\underline{S}_i^{2s+1}$  se puede expresar en términos de potencias inferiores,  $\underline{S}_i^n$ ,  $n < 2s + 1$ .

P.14.3. A) Utilizar la expresión explícita de  $\underline{S}_p$  para un fotón para demostrar que

$$\underline{S}_p \mathbf{v} = \frac{i\hbar}{p} \mathbf{p} \times \mathbf{v}$$

para cualquier vector  $\mathbf{v}$ .

B) De aquí, comprobar que

$$\underline{S}_p \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{p}, \eta) = \frac{i\hbar}{p} \mathbf{p} \times \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{p}, \eta) = \hbar \eta \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{p}, \eta).$$

C) Comprobar la expresión explícita

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{p}, \eta) = \frac{1}{p\sqrt{2}} \begin{pmatrix} p_3 + p_2^2/(p + p_3) - i\eta p_1 p_2/(p + p_3) \\ -p_1 p_2/(p + p_3) + i\eta(p_3 + p_1^2/(p + p_3)) \\ -p_1 - i\eta p_2 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\epsilon}^*(\mathbf{p}, \eta) \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{p}, \eta') = \delta_{\eta, \eta'}.$$

P.14.4. Demostrar rigurosamente que un valor semientero de  $\hat{J}_z$  implica que la función de onda tiene que tener más de una componente.

*Solución.* En la sección 13.3 argüimos que si  $\hat{L}_z \Psi^{(l,M)}(\theta, \phi) = \hbar M \Psi^{(l,M)}(\theta, \phi)$ , y, por tanto,  $\Psi^{(l,M)}(\theta, \phi) = e^{iM\phi} \psi(\theta)$ ,  $M$  debía ser entero para que se tenga

$$\Psi^{(l,M)}(\theta, \phi) = \Psi^{(l,M)}(\theta, \phi + 2n\pi).$$

Pero esto no es cierto; sólo podemos requerir que  $\Psi^{(l,M)}(\theta, \phi + 2n\pi)$  y  $\Psi^{(l,M)}(\theta, \phi)$  difieran en una fase, como ocurre para las funciones de espín semientero. La demostración rigurosa de que  $M = \text{entero}$  es algo más complicada. Consideremos que  $M$  pudiese ser semientero, digamos,  $M = 1/2$  para fijar ideas; la extensión al caso general será evidente. Podemos escribir, aún,

$$\Psi^{(l,M)}(\theta, \phi) = e^{iM\phi} \psi_{1/2}(\theta)$$

y  $\psi_{1/2}(\theta)$  satisface la ecuación diferencial

$$(M^2 - \frac{3}{4} \sin^2 \theta) \psi_{1/2}(\theta) = \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \psi_{1/2}(\theta),$$

con solución proporcional a  $\sqrt{\sin \theta}$ . La solución global es, pues

$$\Psi^{(1/2, 1/2)}(\theta, \phi) = C e^{i\phi/2} \sqrt{\sin \theta}.$$

Aplicando  $\hat{L}_-$ ,  $\hat{L}_- \Psi^{(1/2, 1/2)}(\theta, \phi)$ , las relaciones de conmutación de los operadores del momento angular nos dicen que  $\hat{L}_- \Psi^{(1/2, 1/2)}(\theta, \phi)$  debería ser proporcional a  $\Psi^{(1/2, -1/2)}(\theta, \phi)$ . Pero esto no es cierto ya que

$$\hat{L}_- \Psi^{(1/2, 1/2)}(\theta, \phi) = C e^{-i\phi/2} \frac{\cos \theta}{\sqrt{\sin \theta}}.$$

Las funciones correspondientes a  $l = 1/2$  no son compatibles con las relaciones de conmutación de las  $\hat{L}_j$ . Las funciones de onda para valores semienteros del momento angular *tienen* que tener varias componentes.

P.14.5. Comprobar que los vectores de polarización lineal, en unos ejes arbitrarios, son

$$\mathbf{e}(\mathbf{p}, \eta) = \frac{p_3}{p} \mathbf{e}^{(0)}(\eta) + \frac{p_1 \delta_{-1, \eta} - p_2 \delta_{1, \eta}}{p(p + p_3)} \mathbf{z} \times \mathbf{p} - \frac{p \mathbf{e}^{(0)}(\eta)}{p} \mathbf{z}$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1^{(0)}(1) &= 1, \quad \mathbf{e}_2^{(0)}(1) = \mathbf{e}_3^{(0)}(1) = 0, \\ \mathbf{e}_2^{(0)}(-1) &= 1, \quad \mathbf{e}_1^{(0)}(-1) = \mathbf{e}_3^{(0)}(-1) = 0. \end{aligned}$$

P.14.6. Si  $\chi_1(\lambda)$ ,  $\chi_2(\lambda)$  son las funciones de onda de espín, normalizadas a la unidad, de las partículas 1, 2, ambas con espín  $1/2$  y con  $\lambda$  el valor de la tercera componente del espín, comprobar que las  $\chi_1^{(s)}(\mu)$  con espín total  $s$ ,  $s = 0, 1$ , con tercera componente  $\mu$ , y también normalizadas a la unidad, son

$$\chi_1^{(0)}(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \chi_1\left(\frac{1}{2}\right) \chi_2\left(-\frac{1}{2}\right) - \chi_1\left(-\frac{1}{2}\right) \chi_2\left(\frac{1}{2}\right) \right]$$

y

$$\begin{aligned} \chi_1^{(1)}(\pm 1) &= \chi_1\left(\pm \frac{1}{2}\right) \chi_2\left(\pm \frac{1}{2}\right); \\ \chi_1^{(1)}(0) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \chi_1\left(\frac{1}{2}\right) \chi_2\left(-\frac{1}{2}\right) + \chi_1\left(-\frac{1}{2}\right) \chi_2\left(\frac{1}{2}\right) \right]. \end{aligned}$$

CAPÍTULO 15.

## Simetrías discretas: paridad e inversión temporal. Fases y reglas de superselección

### 15.1. Paridad

La operación de *inversión espacial*,

$$I_s \mathbf{r} = -\mathbf{r}$$

dejando el sentido del tiempo fijo es una simetría de la mecánica clásica. Cuánticamente a esta transformación le hacemos corresponder un operador, el *operador paridad*  $\hat{P}$  definido por

$$\hat{P}\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t) \equiv \eta_P \Psi(-\mathbf{r}_1, \dots, -\mathbf{r}_n; t). \quad (15.1.1)$$

Puesto que  $I_s(I_s \mathbf{r}) = \mathbf{r}$ , pedimos que

$$\hat{P}^2 = 1 \quad (15.1.2)$$

lo que implica

$$\eta_P = \pm 1. \quad (15.1.3)$$

Al número  $\eta_P$  se le llama *paridad* del sistema.

La transformación de operadores bajo paridad se halla fácilmente de su forma explícita y (15.1.1); tenemos

$$\begin{aligned} \hat{P}\hat{Q}\hat{P}^{-1} &= -\hat{Q} \\ \hat{P}\hat{P}\hat{P}^{-1} &= -\hat{P} \\ \hat{P}\hat{L}\hat{P}^{-1} &= \hat{L}. \end{aligned} \quad (15.1.4a)$$

La ley de transformación de  $\mathfrak{S}$  no puede obtenerse de esta manera, pero recordando que  $\mathfrak{S}$  y  $\hat{L}$  son aditivos podemos definir

$$\hat{P}\mathfrak{S}\hat{P}^{-1} = \mathfrak{S}. \quad (15.1.4b)$$

Si el hamiltoniano tiene la forma

$$\hat{H} = \sum_a \frac{1}{2m_a} \hat{P}_a^2 + \sum_{ab} V(|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|)$$

uso de (15.1a) demuestra inmediatamente que

$$\hat{P}\hat{H}\hat{P}^{-1} = \hat{H} \quad (15.1.5)$$

esto es,  $\hat{H}$  y  $\hat{P}$  conmutan y, por tanto, la paridad del sistema es conservada en el tiempo.<sup>1</sup>

Consideramos ahora la transformación bajo paridad de los armónicos esféricos. La transformación  $\mathbf{r} \rightarrow I_s \mathbf{r} = -\mathbf{r}$  es tal que, bajo ella, las coordenadas polares cambian como sigue:

$$I_s : r \rightarrow r; \quad \theta \rightarrow \pi - \theta; \quad \phi \rightarrow \pi + \phi.$$

Utilizando la forma explícita de los armónicos esféricos, ec. (13.5.2) y siguientes, tenemos

$$\hat{P}Y_M^l(\theta, \phi) = Y_M^l(\pi - \theta, \pi + \phi) = (-1)^l Y_M^l(\theta, \phi). \quad (15.1.6)$$

Para una función de onda arbitraria, con

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{M=-l}^{+l} C_{lM}(r, t) Y_M^l(\theta, \phi)$$

tenemos

$$\hat{P}\Psi(\mathbf{r}, t) = \eta_P \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{M=-l}^{+l} C_{lM}(r, t) (-1)^l Y_M^l(\theta, \phi) :$$

las paridades relativas de estados con momento angular total par/impar son opuestas y, por tanto, una función de onda con paridad bien definida sólo puede contener valores de  $l$  pares o impares.

## 15.2. Inversión temporal

Clásicamente, si una trayectoria  $\mathbf{p}_{cl}, \mathbf{r}_{cl}$  es posible, la misma trayectoria recorrida en sentido inverso también lo es. Formalmente, podemos obtener esta trayectoria cambiando  $t \rightarrow -t$  pero dejando  $\mathbf{r}$  sin cambiar (*inversión temporal*, o *inversión del movimiento*). Bajo esta transformación,

$$\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}; \quad \mathbf{p}_{cl} = m \frac{d\mathbf{r}_{cl}}{dt} \rightarrow -m \frac{d\mathbf{r}_{cl}}{dt} = -\mathbf{p}_{cl}. \quad (15.2.1)$$

En mecánica cuántica no podemos definir un operador *lineal* que corresponda a esta transformación ya que es incompatible con la ecuación de Schrödinger. En efecto, al cambiar  $t \rightarrow -t$ ,  $\hat{H} = (1/2m)\hat{\mathbf{P}}^2 + V(r)$  no cambia, pero  $i\hbar\partial_t$  se convierte en  $-i\hbar\partial_t$ . Para definir una transformación cuántica que corresponda a la simetría clásica (15.2.1), tenemos que considerar un operador  $\hat{T}$  que cambie  $t \rightarrow -t$  y, además, cambie a los números complejos en sus conjugados. Si pedimos que deje los módulos de los productos escalares invariantes

<sup>1</sup> Sin embargo, existen en la naturaleza interacciones que violan la conservación de la paridad (interacciones débiles). Necesariamente involucran acoplamiento del espín y las variables espacio-temporales.

tenemos lo que se llama una *transformación antiunitaria*.<sup>2</sup> De esta manera, y considerando de momento partículas sin espín, definimos

$$\hat{T}\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t) \equiv \eta_T \Psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; -t); \quad \hat{T}^2 = 1. \quad (15.2.2)$$

Aplicando  $\hat{T}$  a los dos miembros de la ecuación de Schrödinger tenemos

$$\hat{T}(i\hbar\partial_t\Psi(\mathbf{r}, t)) = -i\hbar\hat{T}(\partial_t\Psi(\mathbf{r}, t)) = \eta_T i\hbar\partial_t\Psi^*(\mathbf{r}, -t) = \hat{T}\hat{H}\Psi(\mathbf{r}, -t),$$

donde por  $\mathbf{r}$  representamos al conjunto de los  $\mathbf{r}_a$ .

Ahora bien: bajo  $\hat{T}$ , el operador  $\hat{Q}$  no cambia, pero, debido a que  $\hat{P} = -i\hbar\partial/\partial\mathbf{r}$ , tenemos que admitir que  $\hat{P}$  cambia de signo:

$$\hat{T}\hat{Q}\hat{T}^{-1} = \hat{Q}, \quad \hat{T}\hat{P}\hat{T}^{-1} = -\hat{P}.$$

Sin embargo, como en el hamiltoniano  $\hat{P}$  sólo aparece cuadráticamente, resulta que

$$\hat{T}\hat{H}\hat{T}^{-1} = \hat{H}$$

y por tanto

$$\hat{T}\hat{H}\Psi = \hat{H}\hat{T}\Psi = \eta_T \hat{H}\Psi^*(\mathbf{r}, -t).$$

Hemos obtenido la transformada de la ecuación de Schrödinger bajo inversión temporal:

$$i\hbar\partial_t\Psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; -t) = \hat{H}\Psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; -t). \quad (15.2.3)$$

Si  $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t)$  es solución de la ecuación de Schrödinger,  $\Psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; -t)$  también lo es: la definición (15.2.1) de inversión temporal (que, repetimos, no es lineal) sí es compatible con la ecuación de Schrödinger.<sup>3</sup>

Las propiedades de transformación del momento angular y espín bajo  $\hat{T}$  son

$$\hat{T}\hat{L}\hat{T}^{-1} = -\hat{L}; \quad \hat{T}\hat{S}\hat{T}^{-1} = -\hat{S}. \quad (15.2.4)$$

Para estados con momento y tercera componente de espín bien definidos,  $|\mathbf{p}, \lambda\rangle$ , escribimos

$$\hat{T}|\mathbf{p}, \lambda\rangle = \eta(\lambda)|-\mathbf{p}, -\lambda\rangle \quad (15.2.5a)$$

y, por coherencia con nuestra elección de fases para estados de espín hay que tomar

$$\eta(\lambda) = (-i)^{2\lambda} e^{i\delta} \quad (15.2.5b)$$

y ahora  $\delta$  es independiente de  $\lambda$ .

<sup>2</sup> Wigner (1959). La invariancia bajo  $\hat{T}$  de las relaciones de conmutación  $[\hat{Q}, \hat{P}]$  también obliga a que  $\hat{T}$  sea antiunitaria.

<sup>3</sup> Algunas aplicaciones de la invariancia bajo inversión temporal pueden encontrarse en Wigner (1959), Galindo y Pascual (1978); nosotros veremos una en la sec. 22.5. Existen interacciones en la naturaleza que violan invariancia bajo inversión temporal, aunque son muy débiles.

EJERCICIO: Comprobarlo •

Un último punto. Para operadores antilineales, esto es, tales que  $\hat{T}(\alpha\Psi) = \alpha^*\hat{T}\Psi$  hay que definir el adjunto, por consistencia, como

$$\langle\Phi|\hat{T}\Psi\rangle \equiv \langle\hat{T}^\dagger\Phi|\Psi\rangle = \langle\Psi|\hat{T}^\dagger\Phi\rangle^*.$$

EJERCICIO: Teniendo en cuenta esta definición, demostrar que  $\hat{T}^\dagger = \hat{T}^{-1}$  •

### 15.3. Simetrías y fases. Reglas de superselección

En repetidas ocasiones hemos utilizado el argumento de que, si una transformación  $I$  es equivalente a la identidad, el operador que la representa  $\hat{I}$  debe ser la unidad. Sin embargo, este argumento no es muy riguroso; en realidad, sólo podemos pedir que  $\hat{U}(I)$  equivalga a multiplicar las funciones de onda por una fase global (esto es, la misma para todas). En principio, por tanto, tenemos que generalizar muchas de nuestras relaciones. Por ejemplo, si  $R, R'$  son rotaciones, la condición

$$\hat{U}(RR') = \hat{U}(R)\hat{U}(R') \quad (15.3.1)$$

se debe generalizar a

$$\hat{U}(RR') = e^{i\varphi(R,R')}\hat{U}(R)\hat{U}(R'); \quad (15.3.2)$$

para la paridad hay que admitir que  $\hat{\mathcal{P}}^2 = 1$  ha de sustituirse por  $\hat{\mathcal{P}}^2 = e^{i\varphi(\mathcal{P})}$  y para la inversión temporal tendremos, en principio,  $\hat{\mathcal{T}}^2 = e^{i\varphi(\mathcal{T})}$ . Finalmente, hay que admitir que una rotación por  $2\pi$ ,  $R(2\pi)$ , puede ser tal que  $\hat{U}(R(2\pi)) = e^{i\varphi(2\pi)}$  (todas las  $\varphi$  reales).

Dada una operación (digamos de simetría para fijar ideas),  $T$ , si  $\hat{U}(T)$  es el operador que la representa, el operador  $\hat{U}(T)e^{i\varphi(T)}$  es también una representación aceptable. En la mayoría de los casos, podemos ajustar estas fases arbitrarias de manera que se tenga  $\hat{U}(I) = 1$  para una transformación equivalente a la identidad; así, en el texto hemos presentado formas explícitas de  $\hat{U}(R)$  para las que (15.3.1) vale, y de  $\hat{\mathcal{P}}$  para la que  $\hat{\mathcal{P}}^2 = 1$ . Pero existen situaciones en las que esto no es posible. En la sección 14.2 vimos que, para una partícula de espín  $s$ ,

$$\hat{U}(R(2\pi)) = (-1)^{2s}. \quad (15.3.3)$$

Para la inversión temporal, la definición (15.2.5) nos muestra que

$$\hat{\mathcal{T}}^2 = (-1)^{2s}, \quad (15.3.4)$$

como se comprueba fácilmente. Si cambiamos  $\hat{\mathcal{T}}$  en una fase,  $\hat{\mathcal{T}}' = \hat{\mathcal{T}}e^{i\alpha}$ , el carácter antilineal de  $\hat{\mathcal{T}}$  implica

$$\hat{\mathcal{T}}'^2 = \hat{\mathcal{T}}e^{i\alpha}\hat{\mathcal{T}}e^{i\alpha} = \hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{T}}e^{i\alpha}e^{-i\alpha} = \hat{\mathcal{T}}^2$$

luego el resultado (15.3.4) tiene validez general.

Cuando  $\hat{U}(I) \neq 1$  tenemos lo que se llama una *regla de superselección*;<sup>4</sup> el operador  $\hat{U}(I)$  tiene que conmutar con todos los observables ya que, de lo contrario,  $I$  no podría ser equivalente a la identidad. Todos los estados físicos tienen que ser estados propios de  $\hat{U}(I)$ , y no puede haber estados físicos superposición de estados correspondientes a valores propios de  $\hat{U}(I)$  distintos. El espacio de los estados se descompone, de hecho, en espacios disconexos correspondientes a los distintos autovalores de  $\hat{U}(I)$ . Acabamos de ver un ejemplo: debido a (15.3.3), (15.3.4), el valor del número  $(-1)^{2s}$  (más generalmente,  $(-1)^{2j}$  con  $j$  el momento angular total) nos proporciona una regla de superselección: no se pueden superponer estados con momento angular total entero y semientero.

Otro ejemplo es el de invariancia gauge que, como veremos en la sec. 18.1, implica que la *carga eléctrica* conmuta con todos los operadores y proporciona, por tanto, una nueva regla de superselección.

### PROBLEMAS

P.15.1 Utilizar la invariancia bajo paridad para simplificar la solución del pozo finito que vimos en la sec. 6.5. (Escójase el origen de coordenadas de forma que el potencial sea

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -L/2 \leq x \leq L/2 \\ a, & x < -L/2, x > L/2, \end{cases}$$

por tanto invariante bajo paridad).

*Solución.* Como el hamiltoniano conmuta ahora con  $\hat{\mathcal{P}}$ , podemos buscar soluciones simultáneas de

$$\hat{H}\psi_{n\eta} = E\psi_{n\eta}, \quad \hat{\mathcal{P}}\psi_{n\eta} = \eta\psi_{n\eta},$$

$\eta = \pm 1$ . Debido a la simetría sólo tenemos que ocuparnos de la zona  $x \geq 0$ . Tenemos

$$\begin{aligned} \psi_{n,+1} &= C_+ \cos kx, & |x| \leq L/2, \\ \psi_{n,-1} &= C_- \sin kx, & |x| \leq L/2; \end{aligned}$$

para  $x \geq L/2$ ,  $\psi_{n\eta} = \bar{C}_\eta e^{-\kappa_\alpha x}$ . Aquí,  $k = \hbar^{-1} \sqrt{2mE}$ ,  $\kappa_\alpha = \hbar^{-1} \sqrt{2m(a-E)}$ .

Las condiciones de empalme nos dan

$$\begin{aligned} C_+ \cos kL/2 &= \bar{C}_+ e^{-\kappa_\alpha L/2}, & kC_+ \sin kL/2 &= \kappa_\alpha \bar{C}_+ e^{-\kappa_\alpha L/2}, & \eta &= +1; \\ C_+ \sin kL/2 &= \bar{C}_+ e^{-\kappa_\alpha L/2}, & kC_- \cos kL/2 &= -\kappa_\alpha \bar{C}_- e^{-\kappa_\alpha L/2}, & \eta &= -1. \end{aligned}$$

De aquí obtenemos las soluciones y las condiciones de consistencia (cuantización)

$$\begin{aligned} \tan kL/2 &= \kappa_\alpha/k, & \eta &= +1, \\ \tan kL/2 &= -\kappa_\alpha/k, & \eta &= -1 \end{aligned}$$

La primera siempre tiene al menos una solución.

<sup>4</sup> Discutidas por primera vez de forma general por Wick, Wightman y Wigner. Más detalles sobre esta cuestión pueden encontrarse en el libro de Galindo y Pascual (1978).

P.15.2. Hallar la paridad de los estados  $\psi_n$  en un pozo simétrico infinito.

P.15.3. Hallar las propiedades de transformación bajo paridad de operadores y funciones de onda del oscilador armónico, en una y tres dimensiones.

*Solución.* Consideramos el formalismo de operadores de creación y aniquilación. Dadas (15.1.4a) es claro que

$$\hat{\mathcal{P}}\hat{a}\hat{\mathcal{P}}^{-1} = -\hat{a}.$$

Escogemos la fase global arbitraria de  $\hat{\mathcal{P}}$  de forma que  $\hat{\mathcal{P}}|\psi_0\rangle = |\psi_0\rangle$ . En una dimensión, dado que  $|\psi_n\rangle \sim (\hat{a}^\dagger)^n|\psi_0\rangle$ ,

$$\hat{\mathcal{P}}|\psi_n\rangle = (-1)^n|\psi_n\rangle.$$

En tres dimensiones,  $\hat{\mathcal{P}}\hat{a}_j\hat{\mathcal{P}}^{-1} = -\hat{a}_j$ ,  $j = 1, 2, 3$  y

$$|n_1, n_2, n_3\rangle \sim (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1}(\hat{a}_2^\dagger)^{n_2}(\hat{a}_3^\dagger)^{n_3}|000\rangle$$

con notación obvia. Por tanto,

$$\hat{\mathcal{P}}|n_1, n_2, n_3\rangle = (-1)^{n_1+n_2+n_3}|n_1, n_2, n_3\rangle.$$

P 15.4. Hallar las propiedades de transformación bajo inversión temporal de los operadores de creación-aniquilación en el oscilador armónico.



## CAPÍTULO 16.

# El problema de dos partículas. Potencial central

### 16.1. Sistema de dos cuerpos aislados

Consideremos un sistema aislado compuesto de dos partículas, que denotaremos con los índices 1, 2. Suponemos que son distinguibles; si fuesen idénticas bastaría con simetrizar o antisimetrizar su función de onda. Tampoco tendremos en cuenta el espín, de momento. Escribimos el hamiltoniano del sistema como

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|), \quad \nabla_a = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_a}, \quad a = 1, 2 \quad (16.1.1)$$

y hemos utilizado invariancia bajo traslaciones y rotaciones para considerar que  $V$  sólo depende de  $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ .

Al igual que se hace en mecánica clásica, puede separarse el movimiento relativo del del centro de masa. Para ello, introducimos el *radio vector relativo*,  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ , la coordenada del *centro de masas*,

$$\mathbf{r}_{\text{c.m.}} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2},$$

y la *masa reducida*,  $m$ ,

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

En términos de momentos, tenemos el *momento total*

$$\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{P}}_1 + \hat{\mathbf{P}}_2, \quad \hat{\mathbf{P}} = -i\hbar \nabla_{\mathbf{r}_{\text{c.m.}}} = -i\hbar (\nabla_1 + \nabla_2)$$

y el *momento relativo*,

$$\hat{\mathbf{P}}_r = -i\hbar \nabla_{\mathbf{r}} = \frac{-i\hbar}{m_1 + m_2} (m_2 \nabla_1 - m_1 \nabla_2).$$

El operador momento angular también se separa:

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{L}}_1 + \hat{\mathbf{L}}_2 = \mathbf{r}_{\text{c.m.}} \times \hat{\mathbf{P}} + \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{P}}_r.$$

En términos de estas cantidades el hamiltoniano se puede reescribir como

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \nabla_{\mathbf{r}_{\text{c.m.}}}^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(|\mathbf{r}|), \quad (16.1.2)$$

esto es, como la suma de dos términos independientes: el hamiltoniano del centro de masas,

$$\hat{H}_{c.m.} = -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \nabla_{\mathbf{r}_{c.m.}}^2 \quad (16.1.3a)$$

y el que describe el movimiento relativo,

$$\hat{H}_{rel} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(|\mathbf{r}|). \quad (16.1.3b)$$

Se tiene

$$\hat{H} = \hat{H}_{c.m.} + \hat{H}_{rel}. \quad (16.1.3c)$$

Podemos buscar, por tanto, soluciones de la ecuación de Schrödinger del sistema de la forma

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \psi_{c.m.}(\mathbf{r}_{c.m.})\psi_{rel}(\mathbf{r}), \\ \hat{H}_{c.m.}\psi_{c.m.}(\mathbf{r}_{c.m.}) &= E_{c.m.}\psi_{c.m.}(\mathbf{r}_{c.m.}), \\ \hat{H}_{rel}\psi_{rel}(\mathbf{r}) &= E_{rel}\psi_{rel}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (16.1.4a)$$

de manera que

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (E_{c.m.} + E_{rel})\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (16.1.4b)$$

Es decir: las variables del c.m. y relativas se separan; el problema se descompone en el de una “partícula” con masa igual a la masa total del sistema,  $m_1 + m_2$ , cuya función de onda evoluciona libremente; y el del movimiento relativo, descrito por  $\hat{H}_{rel}$ ,  $\psi_{rel}(\mathbf{r})$ , que es idéntico al de una única partícula en el potencial  $V(|\mathbf{r}|)$  pero con masa igual a la masa reducida del sistema,  $m$ .

Pasamos en este capítulo a estudiar este problema; para aligerar la notación, suprimimos los subíndices “rel” y escribimos, simplemente, la ecuación del movimiento relativo como

$$\hat{H}\psi_E(\mathbf{r}) = \left( \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(|\mathbf{r}|) \right) \psi_E(\mathbf{r}) = E\psi_E(\mathbf{r}). \quad (16.1.5)$$

## 16.2. Potencial central. Ecuación radial. Comportamiento en el origen

### 16.2.1. Ecuación radial; función de onda radial

Nuestro punto de partida es la ecuación (16.1.5). Comenzamos por introducir coordenadas polares,  $\mathbf{r} \rightarrow (r, \theta, \phi)$ . En términos de ellas

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \\ &+ \frac{1}{r^2} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\hbar^2 r^2} \hat{L}^2 \end{aligned}$$

(cf. sec. 13.2). Por tanto, (16.1.5) se convierte en

$$-\frac{1}{2m} \left\{ \frac{\hbar^2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \hat{L}^2 \right\} \psi_E + V(r)\psi_E = E\psi_E \quad (16.2.1)$$

las variables angulares y la radial se separan. Podemos continuar simplificando el problema buscando soluciones de (16.2.1) que sean a la vez funciones propias del momento angular y de su tercera componente, ya que  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$  y  $\hat{L}_z$  conmutan entre sí:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 \psi^{(l,M)}(r, \theta, \phi) &= \hbar^2 l(l+1) \psi^{(l,M)}(r, \theta, \phi), \\ \hat{L}_z \psi^{(l,M)}(r, \theta, \phi) &= \hbar M \psi^{(l,M)}(r, \theta, \phi). \end{aligned} \quad (16.2.2)$$

Como sabemos, estas funciones de onda son de la forma  $\psi^{(l,M)}(r, \theta, \phi) = Y_M^l(\theta, \phi) R_{El}(r)$ . A  $R_{El}(r)$  se la conoce como *función de onda radial*. Nótese que puede depender de  $l$ , pero no de  $M$ , como se sigue de la ecuación que satisface. En efecto, sustituyendo  $\psi^{(l,M)}(r, \theta, \phi) = Y_M^l(\theta, \phi) R_{El}(r)$  en (16.2.1), y utilizando (16.2.2), obtenemos la ecuación (conocida como *ecuación radial*)

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) R_{El}(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{El}(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \{E - V(r)\} R_{El}(r) = 0. \quad (16.2.3)$$

La condición de normalización viene dada por el producto escalar en polares:

$$\begin{aligned} &\langle \psi^{(l,M)} | \psi^{(l',M')} \rangle \\ &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} d \cos \theta Y_M^l(\theta, \phi) Y_{M'}^{l'}(\theta, \phi) \int_0^\infty dr r^2 R_{El}^*(r) R_{E'l'}(r) \quad (16.2.4a) \\ &= A \delta_{ll'} \delta_{MM'} \delta_{EE'}, \end{aligned}$$

con  $A = 1$  si las funciones están normalizadas a la unidad. Por tanto, el producto escalar de funciones radiales debe tomarse como<sup>1</sup>

$$(R|R') \equiv \int_0^\infty dr r^2 R^*(r) R'(r). \quad (16.2.4b)$$

Nótese también que los niveles energéticos son degenerados: como (16.2.3) no depende de  $M$ , resulta que las  $2l + 1$  funciones de onda

$$R_{El} Y_M^l, \quad M = -l, -l + 1, \dots, l$$

corresponden todas al mismo valor de la energía.

La ecuación radial puede hacerse aún más parecida a la de una partícula en una dimensión si definimos  $f_{El}$  por

$$f_{El}(r) \equiv r R_{El}(r). \quad (16.2.5)$$

En términos de  $f_{El}$  el producto escalar es, simplemente,

$$\langle f_{El} | f_{E'l'} \rangle = \int_0^\infty dr f_{El}^*(r) f_{E'l'}(r), \quad (16.2.6)$$

y la ecuación (16.2.3) se convierte en

$$f_{El}''(r) + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} f_{El}(r) = 0. \quad (16.2.7)$$

Esta ecuación es idéntica a la que obedece una partícula en una dimensión con dos salvedades. En primer lugar,  $r$  es necesariamente  $\geq 0$ ; en segundo lugar tenemos, incluso en ausencia de interacción, un término tipo potencial, el  $l(l+1)/r^2$ . Ambos efectos podemos tenerlos en cuenta utilizando un *potencial efectivo*,  $V_l$ , con

$$V_l(r) = \begin{cases} V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}, & r > 0, \\ \infty, & r \leq 0. \end{cases} \quad (16.2.8)$$

Al término  $(\hbar^2/2m)l(l+1)/r^2$  se le conoce como *barrera centrífuga*, porque tiende a apartar la partícula del origen. La condición  $f_{El}(r) = 0$  para  $r \leq 0$  viene impuesta por ser  $V_l(r) = \infty$  para  $r \leq 0$ . En particular, de la condición  $f_{El}(0) = 0$  se sigue (cf. sec. 6.1, final) que, salvo una fase global,  $f_{El}(r)$  (y, por tanto,  $R_{El}$ ) es real y, además, única para cada  $E$ ,  $l$ .

El que  $f_{El}$  satisfaga una ecuación y normalización idénticas a las de una función de ondas en una dimensión no nos tiene que hacer olvidar que esto es un artificio matemático; la función de onda física es  $R_{El}$ . Así, por ejemplo, la probabilidad de encontrar la partícula a distancia  $r$  del origen es  $|R_{El}(r)|^2$ .

Tradicionalmente, los distintos valores de  $l$  tienen unas ciertas denominaciones. Así, a los estados con  $l = 0$  se los conoce como *estados en onda S*, a los de  $l = 1$  *onda P*, a los de  $l = 2$  *onda D*, la de  $l = 3$  *F* y a partir de aquí en orden alfabético.

<sup>1</sup> Escribimos este producto escalar con paréntesis redondos para recordar que es distinto del ordinario.

## 16.2.2. Comportamiento de las funciones de onda en el origen

Consideramos ahora el comportamiento de la función de onda en el origen. Suponemos (lo que es cierto en todos los casos de interés) que

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) = 0.$$

Entonces, en el límite  $r \rightarrow 0$  el término de la barrera centrífuga domina y (16.2.7) se convierte en

$$f''_{El}(r) \underset{r \rightarrow 0}{\simeq} \frac{l(l+1)}{r^2} f_{El}(r),$$

con solución

$$f_{El}(r) \underset{r \rightarrow 0}{\simeq} Cr^{l+1} + C'r^{-l}.$$

La condición de contorno  $f_{El}(0) = 0$  sólo se cumple si  $C' = 0$ , luego hemos obtenido el comportamiento en el origen de la función de onda radial:

$$f_{El}(r) \underset{r \rightarrow 0}{\simeq} Cr^{l+1}; \quad R_{El}(r) \underset{r \rightarrow 0}{\simeq} Cr^l. \quad (16.2.9)$$

Clásicamente, una partícula con  $l \neq 0$  pasa a una distancia finita del origen. En efecto, se puede escribir

$$l_{cl} = p_0 r_0$$

donde  $r_0$  es el radio vector en el punto de máxima aproximación al origen, y  $p_0$  el momento en este mismo punto (ver fig. 16.2.1). Cuánticamente, (16.2.9) nos dice que, si  $l \neq 0$ , la probabilidad de encontrar la partícula en el origen es cero, ya que entonces  $R_{El}(0) = 0$ ; aunque hay probabilidad no nula de encontrarla tan cerca como queramos de él.

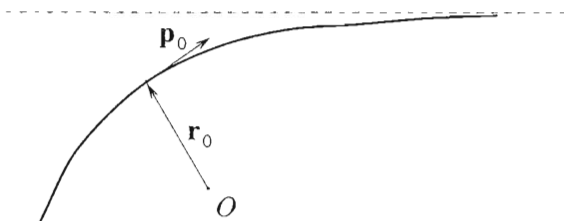


FIGURA 16.2.1. Trayectoria clásica.

### 16.3. Partícula libre. Comportamiento en el infinito de funciones de onda; desfases

#### 16.3.1. Partícula libre; cambio de base

Para estudiar los estados de una partícula libre podemos diagonalizar simultáneamente  $\hat{H}_0$  y  $\hat{\mathbf{P}}$ ,

$$\begin{aligned}\hat{H}_0\Psi_{E\mathbf{p}}(\mathbf{r};t) &= E\Psi_{E\mathbf{p}}(\mathbf{r};t), \\ \hat{\mathbf{P}}\Psi_{E\mathbf{p}}(\mathbf{r};t) &= \mathbf{p}\Psi_{E\mathbf{p}}(\mathbf{r};t)\end{aligned}\quad (16.3.1)$$

ecuaciones cuya solución son las *ondas planas*,

$$\begin{aligned}\Psi_{E\mathbf{p}}(\mathbf{r};t) &= e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r}-Et)/\hbar}, \quad E = \mathbf{p}^2/2m, \\ \langle\Psi_{E\mathbf{p}}|\Psi_{E'\mathbf{p}'}\rangle &= (2\pi\hbar)^3\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}').\end{aligned}\quad (16.3.2)$$

Alternativamente, podemos buscar soluciones comunes a  $\hat{H}_0$ ,  $\hat{L}^2$  y  $\hat{L}_z$ :

$$\begin{aligned}\hat{H}_0\Psi_E^{(l,M)} &= E\Psi_E^{(l,M)}, \\ \hat{L}^2\Psi_E^{(l,M)} &= \hbar^2 l(l+1)\Psi_E^{(l,M)}, \quad \hat{L}_z\Psi_E^{(l,M)} = \hbar M\Psi_E^{(l,M)}.\end{aligned}\quad (16.3.3)$$

Como vimos en la sección anterior, esto implica

$$\Psi_E^{(l,M)} = e^{-iEt/\hbar} Y_M^l(\theta, \phi) R_{El}^{(0)}(r) \quad (16.3.4)$$

donde  $R_{El}^{(0)}$  es solución de la ecuación libre, (16.2.3) con  $V = 0$ , que escribimos como

$$R_{El}^{(0)''} + \frac{2}{r} R_{El}^{(0)'} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) R_{El}^{(0)} = 0, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (16.3.5)$$

El comportamiento para  $r \rightarrow 0$  de  $R_{El}^{(0)}(r)$  nos sugiere escribir

$$R_{El}^{(0)}(r) = r^l g_{El}(r)$$

con lo que esta última satisface la ecuación

$$g_{El}'' + \frac{2(l+1)}{r} g_{El}' + k^2 g_{El} = 0.$$

De ella es fácil deducir la relación de recurrencia

$$g_{E,l+1}(r) = -\frac{1}{r} g_{El}'(r).$$

Para  $l = 0$ , (16.3.5) tiene como solución<sup>2</sup>

$$R_{E0}^{(0)}(r) = C \frac{\text{sen } kr}{r}$$

<sup>2</sup> La otra solución posible,  $C'(\cos kr)/r$ , no es aceptable porque es singular en el origen.

y, utilizando la relación de recurrencia, obtenemos la solución general

$$R_{El}^{(0)}(r) = C j_l(kr), \quad j_l(kr) = (-1)^l \left(\frac{r}{k}\right) \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^l \frac{\text{sen } kr}{kr}. \quad (16.3.6a)$$

Las funciones  $j_l(kr)$  se conocen como *funciones esféricas de Bessel*; están relacionadas con las *funciones de Bessel de primera especie*,  $J_\nu$ , por

$$j_l(kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+1/2}(kr), \quad (16.3.6b)$$

y están normalizadas por<sup>3</sup>

$$\int_0^\infty dr r^2 j_l(kr) j_l(k'r) = \frac{\pi}{2k^2} \delta(k - k'). \quad (16.3.6c)$$

En el infinito,

$$j_l(kr) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{\text{sen}(kr - \pi l/2)}{kr}. \quad (16.3.6d)$$

Ambas bases,  $\Psi_{E\mathbf{p}}$  y  $\Psi_E^{(l,M)}$  son completas; vamos ahora a encontrar los coeficientes que nos pasan de una a la otra. Comenzamos escogiendo el eje  $OZ$  a lo largo de  $\mathbf{p}$ . Entonces, y definiendo  $\mathbf{k} = \hbar\mathbf{p}$ ,

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = e^{ikr \cos \theta}.$$

Desarrollando en polinomios de Legendre (problema P.16.3), obtenemos

$$\begin{aligned} e^{ikr \cos \theta} &= \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) J_{l+1/2}(kr) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) j_l(kr). \end{aligned} \quad (16.3.7a)$$

A gran  $r$  tenemos

$$e^{ikr \cos \theta} \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) \text{sen}(kr - \pi l/2). \quad (16.3.7b)$$

En el caso en que  $\mathbf{p}$  está orientado arbitrariamente, sean  $\theta_k, \phi_k$  y  $\theta_r, \phi_r$  los ángulos polares de  $\mathbf{k}, \mathbf{r}$ , respectivamente. Utilizamos la fórmula

$$P_l(\cos \theta) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{M=-l}^{+l} Y_M^l(\theta_k, \phi_k)^* Y_M^l(\theta_r, \phi_r), \quad \theta = \angle(\mathbf{k}, \mathbf{r})$$

<sup>3</sup> Esta normalización se sigue de la fórmula de Hänkel,

$$\int_0^\infty dx x J_\nu(kx) J_\nu(k'x) = \frac{1}{k} \delta(k - k').$$

para más detalles sobre funciones de Bessel, ver el Apéndice IV.

(ver Problema P.13.2) para concluir que

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sum_{M=-l}^{+l} Y_M^l(\theta_k, \phi_k) Y_M^l(\theta_r, \phi_r) j_l(kr). \quad (16.3.7c)$$

### 16.3.2. Partícula en interacción: comportamiento en el infinito; desfases

Pasemos ahora al caso general, en que el potencial es distinto de cero. Suponemos, sin embargo, que el potencial es de corto alcance; es decir, que se satisface

$$rV(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0.$$

(Esta condición no se verifica en el importante caso del potencial coulombiano, que estudiaremos específicamente en el próximo capítulo). Podemos tomar entonces la partícula como libre, a grandes distancias. En este límite, (16.2.7) se convierte en

$$f_{El}''(r) + k^2 f_{El}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} 0$$

con solución  $f_{El}(r) \simeq (\text{constante}) \sin(kr + \Delta_l)$ , o sea

$$R_{El}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} C \frac{\sin(kr + \Delta_l)}{kr}.$$

Puesto que las  $R_{El}(r)$  se anulan para  $r = 0$ , el argumento del final de la sec. 6.1 vale y  $\Delta_l$  tiene que ser real.

En la subsección anterior hemos visto que, incluso para  $V = 0$ , la presencia de la barrera centrífuga implica un valor no nulo para las  $\Delta_l$ : (16.3.6d) nos dice que

$$\Delta_l = -\pi l/2, \quad \text{si } V = 0.$$

Es, por tanto, conveniente separar  $\Delta_l$  en dos trozos escribiendo  $\Delta_l = \delta_l - \pi l/2$ , con lo que tenemos, escogiendo la constante  $C$  de módulo unidad,

$$R_{El}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} e^{i\alpha_l} \frac{\sin(kr + \delta_l - \pi l/2)}{kr}. \quad (16.3.8)$$

La cantidad  $\delta_l$ , conocida como *desfase*, es la que incorpora la dinámica ya que, si  $V = 0$ ,  $\delta_l$  se anula. La fase  $\alpha_l$  depende de las condiciones de contorno; para estados de dispersión veremos en la sec. 21.5 que coincide con el desfase,  $\alpha_l = \delta_l$ .

En el análisis precedente hemos supuesto implícitamente que la energía es positiva; de lo contrario, el movimiento a  $r \rightarrow \infty$  no es posible clásicamente,  $k$  se convierte en imaginario y la solución

$$f_{El} \sim \sin(i|k|r + \Delta_l)$$



no es aceptable físicamente; hay que tomar

$$f_{El}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} C e^{-\kappa r}, \quad \kappa = + \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}.$$

En este caso, el análisis es totalmente análogo al realizado en la sección 6.5 y no insistimos en él.

De (16.3.8) podemos encontrar la generalización de (16.3.7c) al caso en el que hay interacción. Si  $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  es una función de onda que, a gran  $r$ , se comporta como una onda plana,

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (16.3.9a)$$

y  $R_{El}(r)$  lo hace como (16.3.8), entonces

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sum_{M=-l}^{+l} Y_M^l(\theta_k, \phi_k)^* Y_M^l(\theta_l, \phi_r) R_{El}(r) \\ &\underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sum_{M=-l}^{+l} Y_M^l(\theta_k, \phi_k)^* Y_M^l(\theta_l, \phi_r) e^{i\alpha} \sin(kr + \delta_l - \pi l/2). \end{aligned} \quad (16.3.10a)$$

En particular, si  $OZ$  es paralelo a  $\mathbf{k}$ ,

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l P_l(\cos \theta) R_{El}(r). \quad (16.3.10b)$$

#### 16.4. Pozo esférico tridimensional

En el próximo capítulo vamos a estudiar una serie de sistemas de dos partículas con interacciones realistas (átomo de hidrógeno, quarkonio y el deuterón); en ésta vamos a mostrar una primera aplicación de las técnicas desarrolladas para calcular estados ligados y estados del continuo para dos partículas interactuando por medio de un potencial correspondiente a un pozo esférico constante. Aunque este potencial es, claramente, irreal, el modelo produce una buena primera aproximación para muchos sistemas, en especial en física nuclear.

Separando el centro de masa, y por tanto reduciendo el movimiento al relativo, tenemos el problema de una partícula en el potencial

$$V(\mathbf{r}) = V(r) = \begin{cases} -a, & |\mathbf{r}| \leq L; \\ 0, & |\mathbf{r}| > L. \end{cases} \quad (16.4.1)$$

Tomamos el potencial atractivo  $a > 0$  en vista a aplicaciones en física nuclear. Distinguimos las regiones

$$\text{I : } |\mathbf{r}| \leq L; \quad \text{II : } |\mathbf{r}| > L.$$

Vamos a diagonalizar simultáneamente la energía, el momento angular total y su tercera componente. La función de onda será pues

$$\Psi(\mathbf{r}; t) = e^{-iEt/\hbar} Y_{\lambda l}^l(\theta, \phi) R_{El}(r), \quad R_{El}(r) = r^{-1} f_{El}(r) \quad (16.4.2)$$

y  $f_{El}(r)$  satisface las ecuaciones

$$\begin{aligned} f''_{El}(r) + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} (E + a) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} f_{El}(r) &= 0 \quad \text{(I),} \\ f''_{El}(r) + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} (E) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} f_{El}(r) &= 0 \quad \text{(II).} \end{aligned} \quad (16.4.3)$$

Ambas son idénticas a la de una partícula libre reemplazando, en la primera,  $E$  por  $E + a$ .

#### 16.4.1. Estados ligados

Consideramos para comenzar el caso  $-a < E < 0$  (estados ligados). En la región I, definimos  $k_a = \hbar^{-1} \sqrt{2m(E+a)}$  y tenemos como única solución que se anula en el origen la dada por

$$f_{El}^I(r) = C_I r j_l(k_a r). \quad (16.4.4a)$$

En la región II, la solución con el comportamiento asintótico apropiado viene dada por la función de Bessel esférica de segunda clase (Apéndice IV),

$$f_{El}^{II}(r) = C_{II} r k_l(\kappa r), \quad \kappa = \sqrt{2m|E|}. \quad (16.4.4b)$$

Las igualdades de las funciones y sus derivadas en  $r = L$  nos dan el valor de  $C_{II}$  en función de  $C_I$ ,

$$C_{II} = \frac{j_l(k_a L)}{k_l(\kappa L)} C_I, \quad (16.4.5a)$$

y la condición (implícita) de cuantización:

$$\frac{k'_l(\kappa L)}{k_l(\kappa L)} = \frac{j'_l(k_a L)}{j_l(k_a L)}. \quad (16.4.5b)$$

Estas ecuaciones no siempre tienen solución; en el caso más favorable ( $l = 0$ ) tenemos una situación idéntica a la estudiada en la subsección 6.5.2, y las mismas conclusiones valen.

## 16.4.2. Estados del continuo. Desfases

Para  $E > 0$ , tenemos la misma solución, en la región I:

$$R_{El}^I(r) = C_1 j_l(k_a r); \quad (16.4.6a)$$

en la región II, hay que admitir una combinación de las dos soluciones de la ecuación diferencial,  $j_l$  y  $y_l$ , ya que esta región no contiene el origen:

$$R_{El}^{II}(r) = C_1 j_l(kr) + C_2 y_l(kr), \quad k = \hbar^{-1} \sqrt{2mE}. \quad (16.4.6a)$$

Empalmando en  $r = L$  los valores de las funciones y sus derivadas, y utilizando el comportamiento asintótico de las  $j_l$ ,  $y_l$ , obtenemos los desfases,

$$\cot \delta_l(k) = \frac{k_a j_{l-1}(k_a L) y_l(kL) - k j_l(k_a L) y_{l-1}(kL)}{k_a j_{l-1}(k_a L) j_l(kL) - k j_l(k_a L) j_{l-1}(kL)}. \quad (16.4.7)$$

La expresión explícita de la función de Bessel esférica  $y_l$  puede verse en el Apéndice IV.

## PROBLEMAS

P.16.1. Considérese el sistema formado por dos partículas idénticas. Encontrar los valores posibles de  $l$ , y el espín total, cuando son bosones de espín cero y cuando son fermiones de espín  $1/2$ .

*Solución.* A) Bosones. La función de onda ha de ser simétrica bajo el intercambio de las dos partículas. El c.m. no viene afectado por este intercambio; basta considerar el movimiento relativo. Para éste, intercambiar las partículas es equivalente a hacer  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ . Pero entonces (recuérdese sec. 15.1),

$$Y_M^l(\theta, \phi) \rightarrow Y_M^l(\pi - \theta, \pi + \phi) = (-1)^l Y_M^l(\theta, \phi).$$

Si escribimos la función de onda relativa como

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{l, M} R_{lM}(r, t) Y_M^l(\theta, \phi)$$

la condición de simetría implica  $R_{lM}(r, t) = 0$  para todo  $l$  impar: la función de onda sólo contiene momentos angulares pares.

B) Fermiones. Sean  $\lambda_a$ ,  $a = 1, 2$  las terceras componentes del espín y  $\underline{\Psi}_{\lambda_1 \lambda_2}(\mathbf{r}, t)$  la función de onda del movimiento relativo. Se ha de tener

$$\underline{\Psi}_{\lambda_1 \lambda_2}(\mathbf{r}, t) = -\underline{\Psi}_{\lambda_2 \lambda_1}(-\mathbf{r}, t).$$

Componiendo los espines,

$$\underline{\Psi}_{\lambda_1 \lambda_2} = \sum_{s=0}^1 (1/2, \lambda_1; 1/2, \lambda_2 | s) \underline{\Psi}_{\lambda_1 + \lambda_2}^{(s)}.$$

Utilizando los valores explícitos de los Clebsch–Gordan (ver P.14.5) resulta que la parte de espín es *simétrica*, para  $s = 1$ , y *antisimétrica* para  $s = 0$ , bajo el intercambio de espines. Por tanto, si escribimos

$$\Psi_{\lambda_1, \lambda_2}(\mathbf{r}, t) = \sum_{l, M} R_{lM}^{(s)}(r, t) Y_M^l(\theta, \phi),$$

nos resulta

$$\begin{aligned} R_{lM}^{(1)}(r, t) &= 0, & l &= \text{par}, \\ R_{lM}^{(0)}(r, t) &= 0, & l &= \text{impar}. \end{aligned}$$

P.16.2. (*Oscilador armónico en tres dimensiones*). Hallar el espectro de energías y autofunciones del oscilador armónico en tres dimensiones, con valor bien definido de  $l$  y  $M$ .

*Solución.* La ecuación radial para las  $f_l(r)$  es en este caso

$$f_l''(r) + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} f_l(r) = 0.$$

Cambiando de variable,  $\xi = r \sqrt{m\omega/\hbar}$ , y con  $\epsilon = 2E/\hbar\omega$ , esto se convierte en

$$f_l''(\xi) - \xi^2 f_l(\xi) - \frac{l(l+1)}{r^2} f_l(\xi) + \epsilon f_l(\xi) = 0.$$

Escribiendo

$$f_l(\xi) = \xi^{l+1} e^{-\xi^2/2} L(\xi^2)$$

resulta que  $L$  satisface la ecuación

$$yL''(y) + (l + 3/2 - y)L'(y) + NL(y) = 0, \quad y = \xi^2$$

con  $N = (n_E - l)/2$  y  $n_E = (\epsilon - 3)/2$ . Ésta es la ecuación que define los polinomios de Laguerre. El número  $n_E \equiv n$  ha de ser entero y

$$L(\xi^2) = L_{(n-l)/2}^{l+1/2}(\xi^2), \quad n - l = \text{par} \geq 0.$$

Las energías son  $E_n = \hbar\omega(n + 3/2)$ ; como es lógico, lo mismo que se habría obtenido diagonalizando los tres  $\hat{H}_j$ , en vez de  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}$  y  $\hat{L}_z$ .

P.16.3. Demostrar (16.3.7a).

*Solución.* La fórmula a demostrar es

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} dx P_l(x) e^{ikrx} = i^l (-1)^l \left( \frac{r}{k} \right)^l \left( \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l \frac{\text{sen } kr}{kr},$$

o, definiendo  $\xi = kr$ ,

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} dx P_l(x) e^{i\xi x} = i^l (-1)^l \xi^l \left( \frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} \right)^l \frac{\text{sen } \xi}{\xi}.$$

Utilizando la fórmula de Rodrigues,

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l$$

e integrando  $l$  veces por partes, la fórmula a demostrar se reduce a

$$\frac{1}{2^{l+1} l!} \int_{-1}^{+1} dx (x^2 - 1)^l e^{i\xi x} = \left( \frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} \right)^l \frac{\text{sen } \xi}{\xi}.$$

Para  $l = 0$  la fórmula es trivial; para  $l$  arbitrario, lo hacemos por recurrencia: si es cierto para  $l$ , aplicando  $(1/\xi)d/d\xi$  a ambos miembros,

$$\left( \frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} \right)^{l+1} \frac{\text{sen } \xi}{\xi} = \frac{1}{2^{l+1} l!} \frac{i}{\xi} \int_{-1}^{+1} dx (x^2 - 1)^l e^{i\xi x}.$$

Utilizando entonces que  $x(x^2 - 1) = \frac{1}{2}(l+1)(d/dx)(x^2 - 1)^{l+1}$  e integrando por partes de nuevo obtenemos la relación buscada para  $l + 1$ .

P 16.4. Comprobar que las normalizaciones de (16.3.9) son congruentes, esto es

$$\int d^3 r \Psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$$

y

$$\int_0^\infty dr r^2 R_{E'l'}^*(r) R_{El}(r) = \frac{\pi}{2k^2} \delta(k' - k)$$

se siguen una de otra, utilizando (16.3.9).

*Solución.* Utilícese que

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{M=-l}^{+l} Y_M^l(\Omega_k) Y_M^l(\Omega_{k'})^* = \delta(\Omega_{k'} - \Omega_k)$$

y que

$$\delta(\Omega_{k'} - \Omega_k) \frac{1}{k^2} \delta(k' - k) = \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}).$$

## CAPÍTULO 17.

### Partícula en un potencial coulombiano.

#### El átomo de hidrógeno.

#### Potencial lineal: quarkonio.

#### Potenciales dependientes del espín: el sistema protón-neutrón.

#### El deuterón

### 17.1. Estados ligados electrón-protón: el átomo de hidrógeno

Consideramos el sistema compuesto por un protón y un electrón;<sup>1</sup> denotamos por  $e$ ,  $m_p$  y  $-e$ ,  $m_e$  a las cargas eléctricas y masas respectivas. Según el formalismo general, podemos descomponer el problema en la evolución del centro de masas, que lo hace como una partícula libre, y el movimiento relativo, que es equivalente a una partícula de masa reducida

$$m = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$$

en un potencial coulombiano,  $V(r) = -e^2/r$ . Si buscamos estados con energía, momento angular y tercera componente del mismo bien definidas, la función de onda será

$$\psi^{(l,M)}(\mathbf{r}) = Y_M^l(\theta, \phi) R_{El}(r)$$

y la función radial obedece la ecuación

$$R''_{El}(r) + \frac{2}{r} R'_{El}(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{El}(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{r} \right) R_{El}(r) = 0. \quad (17.1.1)$$

Puesto que  $m_e/m_p \simeq 1/2000$  podemos, al 0.5 ‰ de error, identificar  $m_e$  y  $m$ .

Las unidades ordinarias (gramos, ergios, centímetros, etc.) no son muy apropiadas para un objeto tan pequeño como un átomo de hidrógeno. Debido a ello, a veces es conveniente utilizar un sistema de unidades más apropiado, las llamadas *unidades atómicas*. En este sistema se toma como unidad de longitud el llamado *radio de Bohr*,  $a_B$ ,

$$a_B = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \simeq 0.529 \times 10^{-8} \text{ cm.},$$

<sup>1</sup> Todos los cálculos que hagamos se generalizan fácilmente a los sistemas conocidos como *hidrogenoides*, compuesto de dos partículas de cargas opuestas, interactuando a través del potencial coulombiano.



y como unidad de energía el Rydberg (Ry),

$$\text{Ry} = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \simeq 13.6 \text{ eV} \simeq 2.18 \text{ erg.} \times 10^{-11}$$

También es cómodo utilizar, en vez de  $e^2$ , la llamada *constante de estructura fina*,  $\alpha$ ,

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137.036};$$

$c$  es la velocidad de la luz en el vacío. En términos de ella,

$$a_B = \frac{\hbar}{mc\alpha}, \quad \text{Ry} = \frac{1}{2} mc^2 \alpha^2.$$

### 17.1.1. Espacio de posición

Si definimos ahora las variables sin dimensiones

$$n_E = \sqrt{\frac{\text{Ry}}{-E}}, \quad \rho = \frac{2}{a_B n_E} r,$$

la ecuación (17.1.1) se escribe como

$$R''_{El}(\rho) + \frac{2}{\rho} R'_{El}(\rho) + \left( -\frac{1}{4} + \frac{n_E}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) R_{El}(\rho) = 0. \quad (17.1.2)$$

Para  $\rho \rightarrow \infty$ , (17.1.2) se convierte en  $R''_{El} = \frac{1}{4} R_{El}$ . La solución de esta ecuación físicamente aceptable es

$$R_{El}(\rho) \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} e^{-\rho/2}.$$

Podemos tener en cuenta esto y el comportamiento en  $\rho \rightarrow 0$ ,  $R_{El}(\rho) \sim \rho^l$ , para definir

$$R_{El}(\rho) \equiv \rho^l e^{-\rho/2} P_N(\rho), \quad (17.1.3a)$$

y  $P_N(\rho)$  satisface la ecuación

$$P''_N(\rho) + \left( \frac{2(l+1)}{\rho} - 1 \right) P'_N(\rho) + \frac{n_E - l - 1}{\rho} P_N(\rho) = 0. \quad (17.1.3b)$$

Vamos a suponer que  $P_N$  es un polinomio<sup>2</sup> de grado  $N$ . Por tanto, escribimos

$$P_N(\rho) = \sum_{j=0}^N A_j \rho^j, \quad (17.1.4a)$$

<sup>2</sup> Utilizando propiedades de funciones hipergeométricas puede comprobarse que la solución no-polinómica de (17.2.3b) estropea el comportamiento en el infinito.

y (17.1.3b) se convierte en

$$\left\{ -N + n_E - l - 1 \right\} A_N \rho^N + \sum_{j=0}^{N-1} \left\{ [(j+1)(j+2l+2)] A_{j+1} - j A_j + (n_E - l - 1) A_j \right\} \rho^j = 0$$

lo que implica las relaciones de recurrencia

$$A_{j+1} = \frac{j - n_E + l + 1}{(j+1)(j+2l+2)} A_j \tag{17.1.4b}$$

y la condición de consistencia

$$N = n_E - l - 1. \tag{17.1.4c}$$

Puesto que  $N$  es obviamente un entero positivo o nulo, vemos que  $n_E$  tiene que ser de la forma

$$n_E = \text{entero} \geq l + 1.$$

La energía está cuantizada. A  $n \equiv n_E$  se le llama *número cuántico principal* y a  $N$  *número cuántico radial*. En términos de  $n$  las energías posibles de los estados ligados son las  $E_n$  con

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{Ry}{n^2} = \frac{1}{2n^2} mc^2 \alpha^2, \quad n = l + 1, l + 2, \dots \tag{17.1.5}$$

(serie de Balmer). Además de esto, por supuesto, tenemos un continuo de energías para  $E \geq 0$ , que estudiaremos más adelante. El espectro de energías es como el de la figura 17.1.1

El sistema es degenerado. Dado  $E_n$  fijo, o, lo que es lo mismo, dado  $n$ , tenemos los valores posibles  $l = 0, 1, \dots, n - 1$  (a esta degeneración se la llama *degeneración accidental*) y, para cada  $l$ , podemos tener los valores  $M = -l, \dots, +l$ . En total,

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$$

estados con la misma energía. Además, hay dos valores posibles de la tercera componente del espín del protón, y otros dos de la del espín del electrón.

El polinomio definido por las condiciones (17.1.4) puede relacionarse con funciones conocidas; son las funciones hipergeométricas confluyentes, o funciones de Kummer, que, para  $n$  entero degeneran en los polinomios de Laguerre. En términos de las primeras

$$P_N(\rho) = {}_1F_1(-N, 2l + 2, \rho)$$

y en términos de estos polinomios tenemos, escribiendo ya la solución completa,

$$R_{nl}(r) = \frac{2}{n^2 a_B^{3/2}} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}} \left( \frac{2r}{na_B} \right) e^{-r/na_B} L_{n-l-1}^{2l+1} \left( \frac{2r}{na_B} \right). \tag{17.1.6a}$$



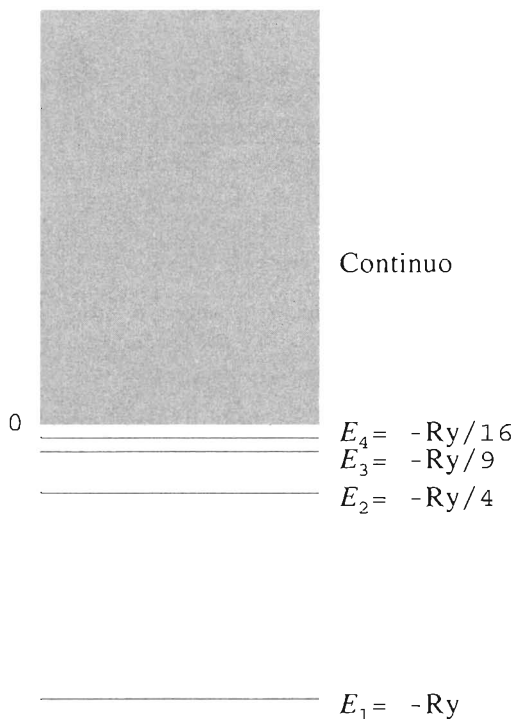


FIGURA 17.1.1. Niveles energéticos en el átomo de hidrógeno.

Esta expresión es real, y está normalizada a la unidad:

$$\int_0^{\infty} dr r^2 R_{nl}(r) R_{n'l}(r) = \delta_{nn'}. \quad (17.1.6b)$$

La demostración de esta normalización no es trivial, ya que *no* se sigue directamente de las fórmulas de ortogonalidad de los polinomios de Laguerre. Para  $n \neq n'$  la teoría general nos garantiza que la integral en (17.1.6b) se anula. Para  $n' = n$ , sustituimos (17.1.6a) en el miembro de la izquierda de (17.1.6b) y obtenemos, después de cambiar variables,

$$\int_0^{\infty} dr r^2 R_{nl}(r) R_{nl}(r) = \frac{1}{2n} \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \int_0^{\infty} d\rho \rho^{2l+2} e^{-\rho} [L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)]^2.$$

Es necesario utilizar ahora la fórmula de recurrencia

$$xL_N^\nu(x) = (2N + \nu + 1)L_N^\nu(x) - (N + 1)L_{N+1}^\nu(x) - (N + \nu)L_{N-1}^\nu(x)$$

para obtener una forma reducible a la relación de normalización de los polinomios de Laguerre (Apéndice IV).

Para los primeros estados tenemos,

$$\begin{aligned} R_{10}(r) &= \frac{2}{a_B^{3/2}} e^{-r/a_B}; & R_{20}(r) &= \frac{1}{\sqrt{2} a_B^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{a_B}\right) e^{-r/2a_B}; \\ R_{21}(r) &= \frac{1}{2\sqrt{6} a_B^{3/2}} \frac{r}{a_B} e^{-r/2a_B}. \end{aligned} \tag{17.1.7}$$

### 17.1.2. Espacio de momentos

El átomo de hidrógeno puede resolverse exactamente, en términos de funciones conocidas, también en espacio de momentos; esto puede hacerse transformando Fourier las soluciones que hemos encontrado, o directamente resolviendo la ecuación de Schrödinger en espacio de momentos. No presentaremos los detalles que pueden verse, junto con referencias, en el texto de Bethe y Salpeter (1957); únicamente daremos la solución.

Si escribimos

$$\hat{H}_p \psi_{nlM}(\mathbf{p}) = E_n \psi_{nlM}(\mathbf{p}), \tag{17.1.8}$$

con  $E_n$  las energías de la serie de Balmer, se tiene

$$\psi_{nlM}(\mathbf{p}) = Y_M^l(\theta_p, \phi_p) F_{nl}(p), \tag{17.1.9}$$

y las funciones radiales son

$$\begin{aligned} F_{nl}(p) &= \sqrt{\frac{2(n-l-1)!}{\pi(n+l)!}} n^2 4^{l+1} l! \frac{n^l [(p/p_0)^l]}{[n^2(p/p_0)^2 + 1]^{l+2}} \\ &\times C_{n-l-1}^{l+1} \left( \frac{n^2(p/p_0)^2 - 1}{n^2(p/p_0)^2 + 1} \right); \quad p_0 = \hbar/a_B. \end{aligned} \tag{17.1.10a}$$

Las  $F_{nl}$  están normalizadas a

$$\int_0^\infty dp p^2 |F_{nl}(p)|^2 = 1, \tag{17.1.10b}$$

y los  $C_N^\nu$  son los *polinomios de Gegenbauer*; para los primeros valores de  $N$ ,

$$C_0^\nu(x) = 1, \quad C_1^\nu(x) = 2\nu x, \quad C_2^\nu(x) = 2\nu(\nu + 1)x^2 - \nu.$$

En general, ver Magnus, Oberhettinger y Soni (1966).

## 17.2. Propiedades elementales del átomo de hidrógeno

El radio medio, y por tanto el tamaño de un átomo de hidrógeno en el estado caracterizado por los números cuánticos  $n, l$  es<sup>3</sup>

$$\langle r \rangle_{nl} = \int_0^\infty dr r^3 [R_{nl}(r)]^2 = [3n^2 - l(l+1)] \frac{a_B}{2}.$$

Para el estado fundamental,  $\langle r \rangle_{10} = \frac{3}{2} a_B \simeq 0.7 \times 10^{-8}$  centímetros.

La velocidad media del electrón,  $\bar{v}_{nl} = \sqrt{\langle \hat{v}^2 \rangle_{nl}}$ , puede también calcularse fácilmente: expresándolo en términos de  $\alpha$ ,

$$\langle \mathbf{v}^2 \rangle_{nl} = \frac{1}{m^2} \langle \hat{\mathbf{P}}^2 \rangle_{nl} = \frac{2}{m} \left\langle \left( \hat{H} - V \right) \right\rangle_{nl} = \frac{2}{m} \{ E_n + e^2 \langle r^{-1} \rangle_{nl} \} = \frac{c^2 \alpha^2}{n^2}.$$

De nuevo en el estado fundamental, esto nos dice que  $\bar{v}_{10}^2/c^2 = \alpha^2 \simeq 0.5 \times 10^{-5}$ , lo que nos proporciona el orden de magnitud de las correcciones relativistas.

Todos los niveles de energía, salvo el más bajo (*estado fundamental*) son inestables; un electrón puede pasar de un nivel  $E_{n+1}$  al  $E_n$  (o, aunque con menos probabilidad, a uno inferior) emitiendo uno o más fotones. Aunque el cálculo detallado requiere que desarrollemos la teoría cuántica de la radiación, lo que haremos en el capítulo 20, podemos ya concluir que la ley de conservación de la energía implica que la energía del fotón emitido será

$$E_\gamma = E_{n+1} - E_n = \frac{2n+1}{n^2(n+1)^2} \text{ Ry},$$

con lo que la cuantización de la radiación emitida por átomos queda explicada. En particular, el electrón no puede “caer” al núcleo porque hay una energía mínima,  $E_1 = -me^4/2\hbar^2 = -\text{Ry}$ . Ésta es la energía que hay que proporcionar al electrón para desligarlo del núcleo, que se llama *energía de ionización*, y es de unos 13.6 eV.

Consideremos ahora un átomo cuyo núcleo tenga  $Z$  protones y, por tanto, carga  $Ze$ . Si despreciamos en una primera aproximación las interacciones entre electrones frente a la interacción de éstos con el núcleo, el problema es análogo al que hemos resuelto reemplazando  $e^2 \rightarrow Ze^2$ . En particular, a cada energía  $E_n = -Z^2 \text{ Ry} / n^2$  corresponden  $2n^2$  estados independientes de los *electrones*; el 2 viene del espín del electrón. Puesto que, según el principio de Pauli, sólo puede haber un electrón en cada estado, resulta que en el nivel  $n = 1$  puede haber 2 electrones, en el  $n = 2$  habrá un máximo de  $2 \times 2^2 = 8$ , en el  $n = 3$  habrá, a lo sumo, 18, etc. Los electrones más “visibles” serán los externos. Esta estructura permite explicar en particular las propiedades de los enlaces químicos; nosotros dejaremos aquí el tema.

<sup>3</sup> Este y el siguiente cálculo pueden realizarse utilizando las fórmulas del Apéndice IV de integrales de potencias con polinomios de Laguerre.

### 17.3. Partícula en un campo coulombiano: estados del continuo

En esta sección consideraremos los estados de una partícula en un campo coulombiano, con energía positiva. Trataremos simultáneamente los casos de potencial atractivo, para  $E > 0$ , y repulsivo (donde no hay estados ligados y por fuerza  $E > 0$ ). Si  $e_1, e_2$  son las cargas de las partículas que interactúan y, por tanto, el potencial coulombiano es  $e_1 e_2 / r$ , definiremos  $\sigma = 1$  si  $e_1 e_2$  es *negativo* (potencial atractivo) y  $\sigma = -1$  si  $e_1 e_2$  fuese positivo (potencial repulsivo). Denotamos por  $m$  a la masa reducida del sistema y escribimos, además,

$$a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{m|e_1 e_2|}, \quad k \equiv + \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Si las partículas en interacción fuesen electrón y protón, tendríamos  $\sigma = +1$  y  $a_0$  coincidiría con el radio de Bohr,  $a_B$ .

La ecuación radial se escribe ahora como

$$R''_{kl}(r) + \frac{2}{r} R'_{kl}(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{kl}(r) + k^2 R_{kl}(r) + \frac{2\sigma}{a_0 r} R_{kl}(r) = 0. \quad (17.3.1)$$

Podemos tener en cuenta el comportamiento a gran  $r$  y a pequeño  $r$  definiendo

$$R_{kl}(r) = e^{-ikr} (2kr)^l \Phi(r). \quad (17.3.2)$$

Igual podíamos haber escrito

$$R_{kl}(r) = e^{+ikr} (2kr)^l \tilde{\Phi}(r); \quad (17.3.2)$$

luego veremos lo que esto implica. Cambiando de variable,

$$r = \frac{1}{2ik} z$$

(en el caso de haber escogido (17.3.3) tendríamos que haber tomado  $r = -z/2ik$ ), y definiendo  $F_{kl}(z) = \Phi(z/2ik)$ , la ecuación (17.3.1) se convierte en

$$F''_{kl}(z) + \left( \frac{2l+2}{z} - 1 \right) F'_{kl}(z) + \frac{-i\sigma/a_0 k - l - 1}{z} F_{kl}(z) = 0, \quad (17.3.4)$$

formalmente idéntica a la (17.1.3) para  $P_N$ . La diferencia es que ahora el papel de  $n_E$  lo juega  $-i\sigma/a_0 k$  que, evidentemente, no puede ser un número entero. Por tanto, si desarrollamos  $F_{kl}(z)$  en potencias de  $z$ , la serie será infinita:

$$F_{kl}(z) = \sum_{j=0}^{\infty} A_{jl} z^j.$$

Los  $A_{jl}$  satisfarán una relación de recurrencia idéntica a la (17.1.4b) con la sustitución de  $n_E$  por  $-i\sigma/a_0k$ . Iterándola, obtenemos la expresión explícita para  $F_{kl}$ ,

$$\begin{aligned} F_{kl}(z) &= A_{0l} M\left(l+1 + \frac{i\sigma}{a_0k}, 2l+2, z\right) \\ &= A_{0l} \frac{\Gamma(2l+2)}{\Gamma(l+1 + i\sigma/a_0k)} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\Gamma(l+1 + i\sigma/a_0k + j)}{j! \Gamma(2l+2 + j)} z^j. \end{aligned} \quad (17.3.5)$$

A la función  $M(a, b, z)$  se la conoce en la literatura como *función de Kummer*, y es un caso especial de función hipergeométrica (ver Apéndice IV). Desahaciendo los cambios de variable tenemos pues,

$$R_{kl}(r) = A_{0l} e^{-ikr} (2kr)^l M\left(l+1 + \frac{i\sigma}{a_0k}, 2l+2, 2ik\right). \quad (17.3.6a)$$

Si hubiésemos utilizado (17.3.3) habríamos llegado a

$$R_{kl}(r) = \tilde{A}_{0l} e^{-ikr} (2kr)^l M\left(l+1 - \frac{i\sigma}{a_0k}, 2l+2, -2ik\right). \quad (17.3.6b)$$

Puesto que ambas expresiones son iguales, y, manifiestamente, los miembros de la derecha son el uno el complejo conjugado del otro (para  $A_{0l}$ ,  $\tilde{A}_{0l}$  reales), se sigue que  $R_{kl}(r)$  es *real* (salvo la constante arbitraria  $A_{0l}$ ) como requiere la teoría general (sec. 6.1, final) aunque la expresión explícita de  $M$ , (17.3.5), no lo parezca (ver el problema P.17.9).

Para gran  $z$ ,

$$M(a, b, z) \simeq \Gamma(b) \left\{ e^{i\pi a} z^{-a} / \Gamma(b-a) + e^z z^{a-b} / \Gamma(a) \right\}, \quad -\pi/2 \leq \text{Arg } z \leq 3\pi/2,$$

de donde deducimos

$$R_{kl}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} A_{0l} \frac{\Gamma(2l+2) e^{-\pi\sigma/2a_0k}}{|\Gamma(l+1 - i\sigma/a_0k)|} \frac{\text{sen} \left( kr + \frac{\sigma}{a_0k} \log 2kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k) \right)}{kr} \quad (17.3.7a)$$

con

$$\delta_l(k) = \text{Arg } \Gamma(l+1 - i\sigma/a_0k). \quad (17.3.7b)$$

Nótese la diferencia con (16.3.8), a saber, el término  $(\sigma/a_0k) \log 2kr$  en el seno en (17.3.7). Esto se debe a que el potencial de Coulomb no satisface la condición  $rV(r) \rightarrow 0$  para  $r \rightarrow \infty$ , lo que da lugar a efectos persistentes; las partículas nunca están completamente libres.

La normalización de las  $R_{kl}$  se puede encontrar con los métodos que discutimos en la sección 6.7; el resultado es que, si escogemos

$$A_{0l} = e^{i\alpha l} |\Gamma(l+1 - i\sigma/a_0k)| \frac{e^{\pi\sigma/2a_0k}}{\Gamma(2l+2)} \quad (17.3.8)$$

entonces se tiene

$$\int dr r^2 R_{kl}^*(r) R_{k'l}(r) = \frac{\pi}{2k^2} \delta(k - k'). \quad (17.3.9a)$$

La expresión completa de estas  $R_{kl}$  es, pues,

$$R_{kl}(r) = e^{i\alpha_l} |\Gamma(l + 1 - i\sigma/a_0k)| \times \frac{e^{\pi\sigma/2a_0k}}{\Gamma(2l + 2)} e^{-ikr} (2kr)^l M\left(l + 1 + \frac{i\sigma}{a_0k}, 2l + 2, 2ik\right). \quad (17.3.9b)$$

Una cantidad importante en algunas aplicaciones es el cociente de los cuadrados de los módulos de las funciones de onda en  $r = 0$  para una partícula en un campo coulombiano, y la de la misma partícula libre. Esto es, la cantidad  $|\psi^C(\mathbf{r} = 0)|^2 / |\psi^{(0)}(\mathbf{r} = 0)|^2$ , conocida como *factor de Fermi*. Debido al comportamiento en el origen, sólo  $R_{k0}$  contribuye a  $\psi^C(\mathbf{r} = 0)$ , y sólo  $R_{k0}^{(0)}$  a  $\psi^{(0)}(\mathbf{r} = 0)$ . De (17.3.9b) y utilizando la fórmula<sup>4</sup>

$$|\Gamma(1 + iy)|^2 = \frac{2\pi y}{e^{\pi y} - e^{-\pi y}}$$

nos resulta

$$\frac{|\psi^C(0)|^2}{|\psi^{(0)}(0)|^2} = \frac{2\pi\sigma}{a_0k} \frac{1}{1 - \exp\frac{-2\pi\sigma}{a_0k}}. \quad (17.3.10)$$

Además de las funciones con valores bien definidos de  $\hat{L}^2$  y  $\hat{L}_z$ ,  $\psi_E^{(l,M)} = Y_M^l R_{kl}$ , en algunas aplicaciones se necesitan funciones  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  con valor bien definido de la energía,  $E + \hbar^2\mathbf{k}^2/2m$  y que, a gran  $r$ , coincidan con funciones con momento  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  bien definido. La solución general es

$$\psi_{\mathbf{k}} = C_+ \psi_{\mathbf{k}}^+ + C_- \psi_{\mathbf{k}}^-; \quad \psi_{\mathbf{k}}^- = [\psi_{\mathbf{k}}^+]^*,$$

$C_{\pm}$  arbitrarias, y

$$\psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \Gamma(1 - i\sigma/a_0k) \times e^{\pi\sigma/2a_0k} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} M\left(\frac{i\sigma}{a_0k}, 1, i(kr - \mathbf{k}\mathbf{r})\right), \quad (17.3.11)$$

$$\int d^3r \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r})^* \psi_{\mathbf{k}'}^+(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}').$$

Este resultado puede obtenerse muy trabajosamente desarrollando las  $\psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r})$  en las  $\psi_E^{(l,M)} = Y_M^l R_{kl}$  como en la sec. 16.3 o, más sencillamente, resolviendo directamente la ecuación de Schrödinger coulombiana en coordenadas parabólicas; ver p. ej., Landau y Lifshitz (1958) y el problema P.17.8 aquí.

<sup>4</sup> Esta fórmula se deduce fácilmente de la estándar  $\Gamma(z)\Gamma(1 - z) = \pi/\text{sen } \pi z$  y la propiedad  $\Gamma(z^*)^* = \Gamma(z)$ .

## 17.4. Potencial lineal. Quarkonio

### 17.3.1. Potencial lineal

Consideramos ahora dos problemas que tienen interés por sí mismos y que, además, nos van a servir para estudiar estados ligados de quarks. En el primero tenemos una partícula sujeta a una fuerza constante,  $F$ , como es el caso para una partícula en un campo eléctrico constante. El potencial es, pues,

$$V(x) = Fx;$$

trabajamos en una dimensión ya que la fuerza no afecta a las dimensiones ortogonales a su dirección (que hemos tomado como eje  $OX$ ). La ecuación de Schrödinger es particularmente sencilla en espacio de momentos donde tenemos

$$\frac{p^2}{2m} \psi_E(p) + i\hbar F \frac{d}{dp} \psi_E(p) = E\psi_E(p), \quad (17.4.1)$$

con solución

$$\psi_E(p) = C \exp \frac{i}{\hbar F} \left( \frac{p^3}{6m} - Ep \right), \quad (17.4.2a)$$

o, pasando a espacio de posición,

$$\psi_E(x) = \bar{C} \int_0^\infty dp \cos \frac{px - Ep/F + p^3/6mF}{\hbar}. \quad (17.4.2b)$$

Esta función está relacionada con la de Airy:<sup>5</sup>

$$\psi_E(x) = \bar{C} \pi (2mF)^{1/3} \text{Ai} \left( \frac{(2\hbar mF)^{1/3}}{\hbar} (x - E/F) \right). \quad (17.4.2c)$$

Por supuesto, no hay estados ligados y el espectro de energías es continuo.

En el segundo caso, importante para el estudio de estados ligados de quarks, suponemos que, además de estar sujeta a la fuerza  $F$ , la partícula está obligada a moverse sólo en las  $x$  positivas, esto es, que hay una barrera infinita en  $x = 0$  (fig. 17.4.1). Suponemos  $F = \Lambda^2$  positivo y el potencial es, por tanto,

$$V(x) = \begin{cases} \Lambda^2 x, & x \geq 0, \\ \infty, & x \leq 0. \end{cases}$$

La solución viene dada todavía por (17.4.2), para  $x \geq 0$ , y cero para  $x \leq 0$ ; la escribimos

$$\psi_n(x) = \begin{cases} C \text{Ai} \left( \frac{(2m\hbar\Lambda^2)^{1/3}(x - E_n/\Lambda^2)}{\hbar} \right), & x \geq 0 \\ 0, & x \leq 0 \end{cases} \quad (17.4.3a)$$

<sup>5</sup> Ver Apéndice IV. El libro de Abramowicz y Stegun (1965) tiene tablas de la función de Airy, que se define por  $\text{Ai}(z) = \pi^{-1} \int_0^\infty dt \cos(t^3/3 + zt)$ .

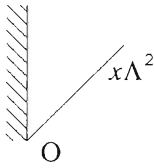


FIGURA 17.4.1.  
Potencial lineal con barrera  
infinita en  $x = 0$ .

y la condición de continuidad,  $\psi_n(0) = 0$ , nos da la condición (implícita) de cuantización:

$$\text{Ai} \left( -\frac{(2m\hbar\Lambda^2)^{1/3} E_n}{\hbar\Lambda^2} \right) = 0 \quad (17.4.3b)$$

o, con la forma explícita de la función de Airy,

$$\int_0^\infty dp \cos \frac{p^3/6m - pE_n}{\hbar\Lambda^2} = 0.$$

Para facilidad de referencia damos los primeros ceros y coeficientes de la función de Airy,  $\text{Ai}(\xi) \simeq \gamma_n(\xi - \xi_n)$ :

$$\begin{aligned} \xi_1 \simeq -2.34, \quad \gamma_1 \simeq 0.701; \quad \xi_2 \simeq -4.09, \quad \gamma_2 \simeq -0.803; \\ \xi_3 \simeq -5.52, \quad \gamma_3 \simeq 0.865; \quad \xi_4 \simeq -6.79, \quad \gamma_4 \simeq -0.911. \end{aligned} \quad (17.4.4)$$

Los primeros niveles energéticos son, por tanto,

$$\begin{aligned} E_n = \rho_n \frac{\Lambda^2 \hbar}{(\hbar m \Lambda)^{1/3}}, \quad \rho_n = \frac{-\xi_n}{2^{1/3}}; \\ \rho_1 \simeq 1.86, \quad \rho_2 \simeq 3.25, \quad \rho_3 \simeq 4.38, \quad \rho_4 \simeq 5.39. \end{aligned} \quad (17.4.5)$$

En lugar de utilizar los valores de los ceros de la función de Airy hubiéramos podido hallar la energía y función de onda aproximadas con el método de minimización de la sec. 11.5. Escogemos la función test más sencilla consistente con la condición de contorno  $\psi(0) = 0$ , a saber

$$\psi_\beta(x) = 2\beta^{3/2} e^{-\beta x}; \quad \int_0^\infty dx x^2 |\psi_\beta(x)|^2 = 1.$$

El valor esperado del hamiltoniano es

$$E(\beta) = \langle \psi_\beta | \hat{H} | \psi_\beta \rangle = \frac{1}{2} \left( \frac{\hbar^2 \beta^2}{m} + \frac{3\Lambda^2}{\beta} \right).$$



La condición de mínimo  $\partial E(\beta)/\partial\beta = 0$  se cumple para  $\beta_0 = (3\Lambda^2 m/2\hbar^2)^{1/3}$ . Obtenemos pues

$$\begin{aligned}\psi_{\beta_0}(x) &= \frac{2\Lambda\sqrt{3m/2}}{\hbar} x \exp\left\{- (3\Lambda^2 m/2\hbar^2)^{1/3} x\right\}, \\ E(\beta_0) &= \left(\frac{3}{2}\right)^{5/3} \frac{\Lambda^{4/3}\hbar^{2/3}}{m^{1/3}} \simeq 1.97 \frac{\Lambda^{4/3}\hbar^{2/3}}{m^{1/3}}.\end{aligned}\tag{17.4.6}$$

Este valor  $E(\beta_0)$  sólo difiere en un 6% del valor exacto (17.4.5), lo que difiere  $(3/2)^{5/3} \simeq 1.97$  de  $\rho_1 \simeq 1.86$ .

#### 17.4.2. Quarkonio

Se conoce como quarkonio al estado ligado de un quark y un antiquark; nosotros aquí sólo consideraremos el caso de momento angular  $l = 0$  (onda  $S$ ). Ambas partículas tienen la misma masa y, por tanto, si  $M_q$  es la masa de un quark de tipo  $q$ , la masa reducida es  $m_q = \frac{1}{2} M_q$ . La teoría de las interacciones fuertes (que son las que ligan el quarkonio) sugiere que el potencial es de la forma

$$V_q(r) = -\frac{4}{3} \frac{\alpha_s(q)}{r} + K^2 r,\tag{17.4.7}$$

despreciando efectos relativistas y fuerzas dependientes del espín. La cantidad  $\alpha_s(q)$  tiene los valores aproximados  $\alpha_s(c) \simeq (0.24)\hbar c$ ,  $\alpha_s(b) \simeq (0.18)\hbar c$  para los dos tipos de quark ( $c$  y  $b$ ) que consideraremos. Además,  $K \simeq (\hbar c)^{-1} 400$  MeV.

Las masas de estos quarks  $c$ ,  $b$ , son tales que

$$M_c c^2 \simeq 1.30 \text{ GeV}, \quad M_b c^2 \simeq 4.6 \text{ GeV}.$$

La ecuación radial para la función  $f_n(r)$ , definida como en (16.2.5), para  $l = 0$ , es

$$f_n''(r) + \left\{ \frac{2m_q}{\hbar^2} \left( E_n - V_q(r) \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} f_n(r) = 0,\tag{17.4.8}$$

y debemos satisfacer además la condición de contorno  $f_n(0) = 0$ .

Consideramos primero el caso del quark  $b$  y comenzamos por despreciar el término  $-\frac{4}{3}\alpha_s/r$  de (17.4.7); entonces estamos en la situación exacta de la subsección 17.4.1. Las energías vendrán dadas por (17.4.5) con  $\Lambda = K$ ; añadiendo los valores experimentales (entre paréntesis) tenemos

$$\begin{aligned}E_1(b) &= 0.42 \text{ GeV} \quad (\text{exp. : } 0.26 \text{ GeV}) \\ E_2(b) &= 0.73 \text{ GeV} \quad (\text{exp. : } 0.83 \text{ GeV}) \\ E_3(b) &= 0.98 \text{ GeV} \quad (\text{exp. : } 1.16 \text{ GeV}) \\ E_4(b) &= 1.20 \text{ GeV} \quad (\text{exp. : } 1.38 \text{ GeV}).\end{aligned}\tag{17.4.9}$$

La velocidad media puede calcularse utilizando la función de onda aproximada (cf. (17.4.6)) obteniéndose  $\langle v^2 \rangle / c^2 \simeq 0.16$ , para el estado fundamental. Las velocidades son pequeñas en comparación con  $c$  lo que justifica despreciar, en

Una primera aproximación, los efectos relativistas. El acuerdo del cálculo con los resultados experimentales es aceptable, excepto para el primer nivel. Esto es comprensible: las funciones de onda  $f_n$  con  $n = 2, 3, 4$  son bastante extendidas, de forma que la perturbación causada por el término despreciado ( $-\frac{4}{3}\alpha_s/r$ ) es pequeña. Esto no es así para el primer nivel; en su determinación hay que utilizar el potencial completo. Si consideramos, como en la subsec. 17.4.1, las funciones prueba

$$f_\beta(r) = 2\beta^{3/2}e^{-\beta r}$$

y minimizamos  $\langle f_\beta | \hat{H} | f_\beta \rangle$ , donde  $\hat{H}$  incluye el potencial completo, encontramos

$$E_1(b) \simeq 0.20 \text{ GeV},$$

en acuerdo con el valor experimental, dentro de los errores esperados.

Aunque para el quark  $c$  el análisis no tiene mucho sentido, ya que en este caso la velocidad media es  $\sim 0.7$  la de la luz, si lo repetimos se encuentra un acuerdo sorprendentemente bueno con el experimento:

$$\begin{aligned} E_1(c) &= 0.46 \text{ GeV} & (\text{exp. : } 0.50 \text{ GeV}) \\ E_2(c) &= 1.11 \text{ GeV} & (\text{exp. : } 1.08 \text{ GeV}) \\ E_3(c) &= 1.49 \text{ GeV} & (\text{exp. : } 1.17 \text{ GeV}) \end{aligned} \tag{17.4.10}$$

### 17.5. Potenciales dependientes del espín

Hasta hora hemos supuesto que las partículas no tienen espín o, si lo tienen, que éste no está acoplado con las variables espacio-temporales. Vamos a extender ahora el análisis a interacciones de dos partículas, admitiendo interacciones que involucren el espín. Consideramos el caso importante de dos partículas, ambas con espín total  $1/2$ .

La separación del movimiento del centro de masas es, por supuesto, todavía posible y podemos escribir la función de onda como el producto de una función que depende de la coordenada del centro de masas, que evoluciona como una partícula libre, y la función de ondas que describe el movimiento relativo,

$$\psi_{\alpha_1\alpha_2}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \tag{17.5.1}$$

y los índices  $\alpha_a$ ,  $a = 1, 2$  son los correspondientes a las componentes de los espines de las partículas  $a = 1, 2$ . Una base de estas  $\psi$  está formada por funciones de onda de la forma

$$\psi = \chi_1 \chi_2 \varphi(\mathbf{r}) \tag{17.5.2}$$

pero, si las interacciones involucran al espín, los estados estacionarios no serán factorizables, en general.

Pasemos ahora al potencial. Éste, en principio, puede depender de las variables de espín; por tanto, será una matriz  $2 \times 2$  en cada uno de los dos espacios

de espín. Si denotamos por  $\underline{\sigma}^{(a)}$  a las matrices de Pauli en cada uno de estos espacios de espín<sup>6</sup> entonces el potencial más general se puede escribir como

$$\begin{aligned} \underline{V}(\mathbf{r}) = & V^{(0)}(\mathbf{r}) + \sum_i V_i^{(1)}(\mathbf{r})\underline{\sigma}_i^{(1)} + \sum_i V_i^{(2)}(\mathbf{r})\underline{\sigma}_i^{(2)} + \sum_j V_j^{(3)}(\mathbf{r})(\underline{\sigma}^{(1)} \times \underline{\sigma}^{(2)})_j \\ & + \sum_{ij} V_{ij}^{(T)} \underline{\sigma}_i^{(1)} \underline{\sigma}_j^{(2)}. \end{aligned}$$

La invariancia bajo rotaciones de  $\underline{V}$ ,

$$\hat{U}(R)\underline{V}(\mathbf{r})\hat{U}^{-1}(R) = \underline{V}(\mathbf{r})$$

implica que  $V^{(0)}$  es un escalar, que los  $V_i^{(a)}$ ,  $a = 1, 2, 3$  se transforman como vectores y que  $V_{ij}^{(T)}$  se transforma como un tensor. Por tanto, tenemos  $V^{(0)}(\mathbf{r}) = V_0(r)$ ,

$$V_i^{(a)}(\mathbf{r}) = V_a(r)r_i, \quad a = 1, 2, \quad V_i^{(3)}(\mathbf{r}) = V_3(r)r_i$$

y

$$V_{ij}^{(T)}(\mathbf{r}) = V_T(r) \left( \frac{3}{r^2} r_i r_j - \delta_{ij} \right) + V_S(r)\delta_{ij}.$$

Para escribir la última hemos tenido en cuenta que los únicos tensores de rango 2, constantes o dependientes de una sola variable ( $r_i$ ), son  $\delta_{ij}$  y  $r_i r_j$ . Hemos separado dos combinaciones de éstos de forma que sean irreducibles.

Los términos en  $V^{(a)}$  se anulan, si la interacción es invariante bajo paridad, ya que ésta cambia  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$  pero no afecta al espín y, por tanto, a las matrices de Pauli. Suponiendo esta invariancia, nos queda pues la forma más general del potencial:

$$\underline{V}(\mathbf{r}) = V_0(r) + V_S(r) \underline{\sigma}^{(1)} \underline{\sigma}^{(2)} + V_T(r) \underline{S}_{12} \quad (17.5.3a)$$

donde el llamado *operador* (o *potencial*) *tensorial* es

$$\underline{S}_{12} = \frac{3}{r} (\mathbf{r} \underline{\sigma}^{(1)}) (\mathbf{r} \underline{\sigma}^{(2)}) - \underline{\sigma}^{(1)} \underline{\sigma}^{(2)}. \quad (17.5.3b)$$

Este operador *no* conmuta por separado con  $\hat{L}$  y  $\underline{S}$ .

El espín total del sistema es

$$\underline{\mathbf{S}} = \hbar \left[ \frac{1}{2} \underline{\sigma}^{(1)} + \frac{1}{2} \underline{\sigma}^{(2)} \right].$$

Componiendo los espines vemos que el espín total puede ser 0, 1. Si lo denotamos por  $s$ ,  $\underline{\mathbf{S}}^2 = \hbar^2 s(s+1)$ . Desarrollando la expresión para  $\underline{\mathbf{S}}$  en términos de las matrices de Pauli y utilizando propiedades de éstas obtenemos que

$$\underline{\sigma}^{(1)} \underline{\sigma}^{(2)} = 2 \left\{ s(s+1) - \frac{3}{2} \right\} : \quad (17.5.4)$$

el término  $V_S(r) \underline{\sigma}^{(1)} \underline{\sigma}^{(2)}$  sólo depende del espín total del sistema,  $s$ .

<sup>6</sup> Esto es,  $\underline{\sigma}^{(1)}$  actúa en la componente  $\alpha_1$  y  $\underline{\sigma}^{(2)}$  en la componente  $\alpha_2$  de  $\psi_{\alpha_1 \alpha_2}$  dada en (17.5.1).

### 17.6. El sistema protón-neutrón. El deuterón

Tanto el neutrón como el protón (símbolos  $n$ ,  $p$ ) tienen espín  $1/2$ . Consideramos el sistema dinámico formado por ambos; su masa reducida es

$$m \simeq (m_n + m_p)/4 \simeq 918.7 m_p \simeq 469.5 \text{ MeV}/c^2.$$

La interacción entre estas partículas a energías pequeñas con respecto a su energía de excitación, esto es, hasta que tenemos que tener en cuenta que no son elementales (digamos, hasta unos 100 MeV) puede representarse por interacciones de corto alcance (*fuerzas nucleares*); cuando necesitemos un modelo concreto, tomaremos pozos esféricos cuadrados de radio  $L \simeq 10^{-13}$  centímetros y de profundidad unas docenas de MeV. Esta interacción sólo produce un estado ligado, el *deuterón* (símbolo  $d$ ) con momento angular total  $j = 1$ .

Para ver cómo aparece este estado componemos primero los espines de  $n$  y  $p$ , obteniendo los valores 0, 1 para el espín total,  $s$ . Dado el momento angular relativo  $l$ , un momento angular total  $j = 1$  puede obtenerse con  $s = 0$ ,  $l = 1$ , o con  $s = 1$  y  $l = 0, 1, 2$ . En el primer caso la correspondiente fuerza centrífuga obliga al grueso de la función de onda a estar alejado del origen, con lo cual la fuerza nuclear no es suficiente para producir un estado ligado. Para  $s = 1$ , podemos tener  $l = 1$  o  $l = 0, 2$ , excluyentemente. En efecto: si suponemos (como ocurre experimentalmente) que las fuerzas nucleares conservan paridad, la paridad de los estados con momento angular  $l$  es  $(-1)^l$ , luego los valores pares e impares no se mezclan. Sólo el estado con componente  $l = 0$  puede producir un estado ligado debido, como ya discutimos, a que es el único caso en que no hay barrera centrífuga. Si las fuerzas nucleares no involucraran al espín, podríamos limitarnos a estudiar el estado con  $s = 1$ ,  $l = 0$ ; pero estas fuerzas tienen un componente tensorial, y hay que tratar simultáneamente ambos casos,  $s = 1$  y  $l = 0, 2$ .

La ecuación de Schrödinger que tenemos que resolver se puede escribir como

$$\hat{H}_0 \psi_E + V \psi_E = E \psi_E, \tag{17.6.1a}$$

con  $V$  dado por (cf. (17.5.3))

$$V(\mathbf{r}) = V_0(r) + V_T(r) S_{12}. \tag{17.6.1b}$$

Comenzamos por componer los espines como en el problema P.16.4:

$$\chi_1^{(1)} = \chi^n(1/2) \chi^p(1/2), \quad \chi_0^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi^n(1/2) \chi^p(-1/2) + \chi^n(-1/2) \chi^p(1/2)], \tag{17.6.2}$$

etc. Para simplificar el cálculo vamos a suponer que la tercera componente del momento angular total del deuterón vale  $j_3 = +1$ ; esto no es ninguna restricción ya que el sistema es invariante bajo rotaciones. Tenemos pues dos funciones de onda posibles: para onda  $S$ ,

$$\psi_S(\mathbf{r}) = Y_0^0(\theta, \phi) R_{E0}(r) \chi^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \chi^n(1/2) \chi^p(1/2) R_{E0}(r) \tag{17.6.3a}$$

y, para onda  $D$ ,

$$\psi_D(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda} (2, 1 - \lambda; 1, \lambda | 1) Y_{1-\lambda}^2(\theta, \phi) \chi_{\lambda}^{(1)} R_{E2}(r). \quad (17.6.3b)$$

Sustituyendo los valores explícitos de los coeficientes de Clebsch–Gordan y de los armónicos esféricos en términos de las  $P_l^M$  nos queda

$$\psi_S(\mathbf{r}) = R_{E0}(r) \underline{X}_S, \quad \psi_D(\mathbf{r}) = R_{E2}(r) \underline{X}_D, \quad (17.6.4a)$$

donde la parte angular y de espín de las funciones de onda son las  $\underline{X}$ ,

$$\underline{X}_S(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \chi^n(\frac{1}{2}) \chi^p(\frac{1}{2}), \quad (17.6.4b)$$

$$\begin{aligned} \underline{X}_D(\theta, \phi) = & \frac{1}{\sqrt{8}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left\{ 2P_2(\cos \theta) \chi^n(\frac{1}{2}) \chi^p(\frac{1}{2}) \right. \\ & - e^{i\phi} P_1^1(\cos \theta) \left[ \chi^n(\frac{1}{2}) \chi^p(-\frac{1}{2}) + \chi^n(-\frac{1}{2}) \chi^p(\frac{1}{2}) \right] \\ & \left. + e^{2i\phi} P_2^2(\cos \theta) \chi^n(-\frac{1}{2}) \chi^p(-\frac{1}{2}) \right\}; \end{aligned} \quad (17.6.4c)$$

$$P_2(\cos \theta) = \frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2}, \quad P_1^1(\cos \theta) = -3 \sin \theta \cos \theta, \quad P_2^2(\cos \theta) = 3 \sin^2 \theta.$$

Si los espinores del neutrón y protón están normalizados a la unidad, y normalizamos las funciones de onda radiales por

$$\int_0^{\infty} dr r^2 |R_{El}(r)|^2 = 1,$$

entonces las  $\psi_S$ ,  $\psi_D$  están también normalizadas a la unidad. En efecto, los  $Y_M^l$  están normalizados a la unidad y los coeficientes de Clebsch–Gordan son las componentes de una matriz ortogonal. Por tanto, la función de onda más general del deuterón, normalizada a la unidad, será una combinación de las (17.6.4):

$$\psi_d(\mathbf{r}) = \psi_S \cos \epsilon + \psi_D \sin \epsilon, \quad (17.6.4d)$$

y hemos llamado  $\epsilon$  al ángulo de mezcla porque esperamos que sea pequeño (y así ocurre).

EJERCICIO: Demostrar que, escogiendo apropiadamente las fases arbitrarias, puede conseguirse que las  $R_{E1}$  y la matriz de mezcla  $S - D$  sean reales •

Si ahora aplicamos  $\underline{S}_{12}$  a las  $\underline{X}$  obtenemos

$$\underline{S}_{12}\underline{X}_S = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left\{ \frac{3}{r^2} \left( \underline{r}\underline{\sigma}^n \underline{\chi}^n \left(\frac{1}{2}\right) \right) \left( \underline{r}\underline{\sigma}^p \underline{\chi}^p \left(\frac{1}{2}\right) \right) - \left( \underline{\sigma}^n \underline{\chi}^n \left(\frac{1}{2}\right) \right) \left( \underline{\sigma}^p \underline{\chi}^p \left(\frac{1}{2}\right) \right) \right\},$$

y hemos escrito  $\underline{\sigma}^{n,p}$  para indicar claramente qué matrices actúan sobre el espinor del neutrón y cuáles sobre el del protón. Utilizando coordenadas polares,

$$\underline{r}\underline{\sigma} = r \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}$$

y

$$\chi\left(\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi\left(-\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Sustituyendo directamente y comparando con (17.6.4), encontramos

$$\underline{S}_{12}\underline{X}_S = \sqrt{8}\underline{X}_D, \quad \underline{S}_{12}\underline{X}_D = \sqrt{8}\underline{X}_S - 2\underline{X}_D. \quad (17.6.5)$$

(La segunda igualdad es algo más latosa de obtener que la primera, aunque también es elemental).

EJERCICIO: Demostrar con argumentos generales ( $\underline{S}_{12}$  conserva el momento angular total y la paridad) que cualquier combinación lineal  $\underline{S}_{12}(\alpha\underline{X}_S + \beta\underline{X}_D)$  tiene que volver a ser una combinación lineal de  $\underline{X}_S$  y  $\underline{X}_D$ . Utilícese esto para comprobar la segunda de las igualdades (17.6.5) ahorrando cálculos.

Indicación. Escribir  $\underline{S}_{12}\underline{X}_D = a\underline{X}_S + b\underline{X}_D$ . Evaluar  $a, b$  tomando  $\phi = 0, \theta = \pi/2$ , etc. •

Sustituyendo la expresión hallada para  $\psi_d$  en (17.6.1), separando la parte angular y radial

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2mr^2} \hat{L}^2$$

y operando, obtenemos la ecuación matricial

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} g_S'' + (E - V_0)g_S \right\} \underline{X}_S + \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} g_D'' + \left( E - V_0 + 2V_T - \frac{2\hbar^2}{mr^2} \right) g_D \right\} \underline{X}_D - \sqrt{8}V_T \left\{ g_S \underline{X}_D - g_D \underline{X}_S \right\} = 0 \quad (17.6.6a)$$

y hemos definido

$$g_S(r) = rR_{E0}(r) \cos \epsilon, \quad g_D(r) = rR_{E2}(r) \sin \epsilon. \quad (17.6.6b)$$

Puesto que  $\underline{X}_S$  y  $\underline{X}_D$  son independientes, esto se nos convierte en dos ecuaciones escalares acopladas:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} g_S''(r) + V_0(r)g_S(r) + \sqrt{8}g_D(r) &= E g_S(r), \\ -\frac{\hbar^2}{2m} g_D''(r) + \left( V_0(r) - 2V_T(r) + \frac{3\hbar^2}{mr^2} \right) g_D(r) + \sqrt{8}V_T(r)g_S(r) &= E g_D(r). \end{aligned} \quad (17.6.7)$$

La información experimental que podemos utilizar es la energía de ligadura del deuterón,  $B_d = 2.23$  MeV; el momento magnético del deuterón dado por la fórmula

$$\mu_d = \mu_n + \mu_p + \frac{1}{2}\mu_n \langle \hat{L}_z \rangle$$

con  $\mu_{n,p}$  los momentos magnéticos de neutrón y protón y  $\mu_N = e\hbar/2m_p c$  el llamado *magnetón nuclear*; y el momento cuadrupolar del deuterón,

$$Q_d = \frac{1}{2} \int d^3r r^2 P_2(\cos\theta) |\psi_d(\mathbf{r})|^2.$$

Experimentalmente,  $\mu_d = (0.8574)\mu_N$  y  $Q_d = 2.7 \times 10^{-27}$  cm<sup>2</sup>. Es por tanto posible ajustar las alturas de los potenciales  $V_0$ ,  $V_T$  (fijando su alcance al valor sugerido por la teoría de Yukawa,  $L = 1.47$  fermis) y el valor del ángulo de mezcla,  $\epsilon$ , requiriendo que se reproduzcan estas tres cantidades,  $B_d$ ,  $\mu_d$  y  $Q_d$ .

Sin embargo, incluso en el caso que tomemos la aproximación de pozos esféricos constantes para las  $V_0$ ,  $V_T$ , estas ecuaciones sólo pueden resolverse de forma aproximada. Nosotros dejamos el problema aquí, remitiendo al lector a textos especializados como Elton (1959) o Brown y Jackson (1976).

### 17.7. Fuerzas dependientes de la velocidad: estructura fina del hidrógeno

En mecánica no relativista, cuántica o clásica, no puede haber fuerzas dependientes de la velocidad; esto lo demostramos en la sec. 4.5 y se debe al requisito

$$\hat{\mathbf{Q}} = \hat{\mathbf{v}} = \frac{1}{m} \hat{\mathbf{P}}, \quad \hat{\mathbf{Q}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{Q}}], \quad (17.7.1a)$$

que obliga a que la interacción,  $\hat{V}$ , satisfaga

$$[\hat{\mathbf{Q}}, \hat{V}] = 0, \quad (17.7.1b)$$

y, por tanto, a que  $\hat{V}$  no dependa de  $\hat{\mathbf{P}}$ .

El argumento no es válido en mecánica relativista, o para interacciones con el potencial vector electromagnético (como veremos, también relativistas), casos en los que las ecuaciones (17.7.1) fallan. Pueden, por tanto, generarse fuerzas dependientes de la velocidad, cuya intensidad ha de ser inversamente proporcional a la velocidad de la luz,  $c$ . Un tratamiento relativista de interacciones en mecánica cuántica se sale del marco de este texto; puede verse

en tratados específicos de mecánica cuántica relativista. Nosotros, a título de ejemplo, discutiremos una de las correcciones relativistas a la interacción coulombiana,  $V_C(r) = -e^2/r$  en el átomo de hidrógeno, la llamada *interacción espín-órbita*,

$$\hat{H}_{LS} = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{e^2}{r^3} \hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{S}}. \tag{17.7.2}$$

Esta interacción produce un desdoblamiento de los niveles energéticos, conocido como la *estructura fina*. Claramente, (17.7.2) depende de la velocidad, ya que  $\hat{\mathbf{L}} = m\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{v}}$ , y se anula para  $c \rightarrow \infty$ .

La modificación que el término (17.7.2) introduce en la solución del átomo de hidrógeno puede tratarse en primer orden de aproximación; en efecto, la velocidad media del electrón en el átomo de hidrógeno es  $\bar{v}^2 \sim \alpha c^2$ .

Denotamos los estados del átomo de hidrógeno en el potencial coulombiano por los números cuánticos  $n, l, M$ , añadiendo el valor de la tercera componente del espín,  $s_3$ :

$$\hat{H}^{(0)}|n; l, M; s_3\rangle = E_n^{(0)}|n; l, M; s_3\rangle; \quad E_n^{(0)} = -\frac{Ry}{n^2}, \quad \hat{H}^{(0)} = \frac{\hat{P}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}. \tag{17.7.3}$$

El operador  $\hat{H}_{LS}$  conmuta, como es lógico, con el momento angular total,

$$[\hat{H}_{LS}, \hat{\mathbf{J}}] = 0 \tag{17.7.4}$$

pero no con  $\hat{\mathbf{L}}$  y  $\hat{\mathbf{S}}$  por separado. Debido a esto, su presencia elimina (parcialmente) la degeneración del átomo de hidrógeno.

El problema que tenemos es el de perturbación de un nivel degenerado. Recordando la sección 11.2, tenemos que sustituir la base  $|n; l, M; s_3\rangle$  por una en la que la perturbación,  $\hat{H}_{LS}$  sea diagonal. Puesto que  $\hat{\mathbf{J}}$  conmuta con  $\hat{H}_{LS}$ , una solución es escoger una base con momento angular total,  $j$  y su tercera componente,  $j_3$ , bien definidas. Esta base viene dada por

$$|n; j, (l), j_3\rangle_{\pm} = \sum_{M+s_3=j_3} (l, M; 1/2, s_3 | l \pm 1/2) |n; l, M; s_3\rangle. \tag{17.7.5}$$

Los desplazamientos de energías serán pues,

$$\delta E_{nl\pm} = \pm \langle n; j, (l), j_3 | \hat{H}_{LS} | n; j, (l), j_3 \rangle_{\pm}.$$

Consideramos que  $l \geq 1$ ; el caso  $l = 0$  lo discutiremos al final. Los estados ( $\pm$ ) no se mezclan; en efecto, para un  $j$  dado, el estado (+) corresponde a  $l = j - 1/2$ , y el (-) a  $l' = j + 1/2$ . Estos valores del momento angular orbital difieren en una unidad y por lo tanto tienen paridad opuesta, mientras que  $\hat{H}_{LS}$  conserva la paridad. Por otra parte,

$$\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar^2}{2} \left\{ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right\}. \tag{17.7.6}$$



Utilizando esto, y que la matriz de coeficientes de Clebsch–Gordan es ortogonal, tenemos

$$\begin{aligned}\delta E_{nl\pm} &= \frac{e^2 \hbar^2}{4m^2 c^2} \left\{ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right\} \int_0^\infty dr r^2 \frac{1}{r^3} |R_{nl}(r)|^2 \\ &= \frac{-e^2 \hbar^2}{4m^2 c^2} \left\{ \frac{1}{2} \mp (l + \frac{1}{2}) \right\} \int_0^\infty dr \frac{1}{r} |R_{nl}(r)|^2.\end{aligned}$$

La integral puede calcularse utilizando las fórmulas del Apéndice IV; encontramos  $\int_0^\infty dr r^{-1} |R_{nl}(r)|^2 = 2/[l(2l+1)(l+1)n^3 a_B^3]$ . Finalmente,

$$\delta E_{nl\pm} = \frac{\frac{1}{2} \mp (l + \frac{1}{2}) \alpha^2}{l(2l+1)(l+1)n} \frac{Ry}{n^2}. \quad (17.7.7)$$

Para  $l = 0$  la ecuación no está definida;  $(\hat{\mathbf{L}}\mathbf{S})_{l=0} = 0$ , pero la integral  $\int_0^\infty dr r^{-1} |R_{n0}(r)|^2$  diverge. En este caso, el cálculo exige tratar con más detalle las correcciones relativistas (ver, p. ej., Akhiezer y Berestetskii, 1963; Ynduráin, 1996). Se obtiene que, para el caso (+) (el único que tiene sentido), (17.7.7) sigue siendo válida.

Ésta es la llamada *estructura fina* del hidrógeno. No sólo los niveles con distinto  $l$  (pero igual  $n$ ) adquieren desplazamientos distintos, sino que, incluso para el mismo valor de  $l$  hay un desdoblamiento:

$$\delta E_{nl+} - \delta E_{nl-} = \frac{e^2 \hbar^2}{8m^2 c^2} \frac{1}{l(l+1)n^3 a_B^3},$$

según que el momento angular total sea  $l + 1/2$  o  $l - 1/2$ . Añadiendo las correcciones relativistas del problema P.17.7 obtenemos la fórmula completa para los niveles energéticos, a orden  $\alpha^2$ ,

$$E_{nlj} + E_n^{(0)} \left\{ 1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left( \frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) + O(\alpha^3) \right\}.$$

PROBLEMAS

P.17.1. Hallar las cantidades  $\langle r^2 \rangle_{nl}$ ,  $\langle r^{-1} \rangle_{nl}$ ,  $\langle r^{-2} \rangle_{nl}$  en el átomo de hidrógeno.

Solución.

$$\langle r^2 \rangle_{nl} = \frac{a_B^2 n^2}{2} \{5n^2 - 1 - 3l(l+1)\}, \quad \langle r^{-1} \rangle_{nl} = \frac{1}{a_B n^2}, \quad \langle r^{-2} \rangle_{nl} = \frac{2}{a_B^2 n^3 (2l+1)}.$$

P.17.2. (Efecto Lamb-polarización del vacío. Las correcciones cuántico-relativistas al potencial coulombiano en el átomo de hidrógeno lo modifican; en particular, las debidas a la llamada polarización del vacío le añaden el término

$$V_L(r) = \frac{-4\hbar^3 \alpha^3}{15m^2 c} \delta(\mathbf{r}).$$

Calcular la corrección a los niveles energéticos.

Solución. A primer orden en la perturbación tenemos los desplazamientos  $\delta E_{nl}$ ,

$$\delta E_{nl} = \langle \psi_n^{(lM)} | V_L | \psi_n^{(lM)} \rangle.$$

Utilizando que  $R_{nl}(0) = 2(na_B)^{-3/2} \delta_{l0}$ ,  $\psi_n^{(00)} = R_{n0}(0)/\sqrt{4\pi}$ , obtenemos

$$\delta E_{nl} = \frac{-\hbar^3 \alpha^3}{15\pi m^2 c} |R_{n0}(0)|^2 \delta_{l0} = \frac{4\alpha^5}{15\pi n^3} mc^2 \delta_{l0}.$$

Numéricamente, para el nivel 2S,

$$\delta E_{20} = -1.1 \times 10^{-7} \text{ eV} = -27 \times 10^6 \text{ ciclos}$$

que coincide con el valor experimental,  $27 \pm 0.5$  megaciclos.

P.17.3. (Correcciones de tamaño finito del núcleo). Hallar las correcciones a los niveles energéticos de un átomo hidrogenoide debidas al tamaño finito del núcleo (este tamaño es del orden de  $10^{-13}$  cm.) Supóngase al núcleo con simetría esférica y homogéneo.

Solución. El potencial creado por una esfera homogénea de radio  $R$  y carga  $Ze$  es

$$V_N(r) = \begin{cases} -Ze^2/r, & r > R; \\ -Ze^2 \left( \frac{3}{2R} - \frac{r^2}{2R^3} \right), & r < R. \end{cases}$$

Podemos escribir  $V_N = V_C + V_1$ , con  $V_C(r) = -Ze^2/r$  el potencial creado por una carga puntual, y tratamos a  $V_1$  como una perturbación, a primer orden. Despreciando correcciones de orden  $R/a$  con  $a = a_B/Z$ ,

$$\delta E_{nl} = \delta_{l0} Ze^2 |R_{n0}(0)|^2 \int_0^R dr \left( r + \frac{r^4}{2R^3} - \frac{3r^2}{2R} \right) = \frac{2Ze^2}{5n^3 a} \delta_{l0} \left( \frac{R}{a} \right)^2.$$

El efecto es apenas detectable, excepto para núcleos pesados donde  $Z$ ,  $R$  son grandes.

P.17.4. (Apantallamiento del núcleo por el electrón en un átomo). Hallar el potencial (escalar) medio creado por un átomo de hidrógeno en su estado fundamental.

*Solución.* La densidad de carga es la suma de la del protón y la del electrón. Suponiendo el primero puntual, y en reposo en el origen, tenemos  $\rho_p(\mathbf{r}) = e\delta(\mathbf{r})$ . Para el electrón,  $\rho_e(\mathbf{r}) = -e|\psi_1^{(0,0)}(\mathbf{r})|^2$ . Con la fórmula explícita para esta última, e integrando, el potencial electromagnético escalar resulta ser

$$\phi(r) = e \left( \frac{1}{r} + \frac{1}{a_B} \right) e^{-2r/a_B}.$$

para  $r \ll a_B$ , esto coincide prácticamente con el potencial coulombiano creado por el protón; para  $r \gg a_B$ , el potencial decrece exponencialmente (*apantallamiento*).

P.17.5. (*Factor de Fermi*). En las desintegraciones  $\beta$  un núcleo emite un electrón y un neutrino (que no tiene carga eléctrica y no juega ningún papel en lo que sigue), convirtiéndose en un núcleo residual. La interacción responsable del proceso es la conocida como *interacción débil*, que sólo es efectiva si las partículas involucradas están en el mismo punto. Calcular las correcciones debidas a que el electrón emitido en la desintegración se mueve en el potencial coulombiano producido por el núcleo residual.

*Solución.* Si  $W_0$  es la probabilidad de desintegración olvidándose de la interacción de Coulomb, y  $W_C$  cuando se tiene ésta en cuenta, entonces  $W_C$  será igual a  $W_0$  multiplicado por la probabilidad de que el electrón esté en el origen, con campo coulombiano incluido, dividido por la probabilidad de que estuviese en el origen si no hubiese habido campo. Esto es,  $W_C = FW_0$  donde el *factor de Fermi* viene dado por  $F = |\psi_e(0)|^2 / |\psi_e^{(0)}(0)|^2$ . Aquí,  $\psi_e$  es la función de onda del electrón en el campo coulombiano del núcleo residual, y  $\psi_e^{(0)}$  la de un electrón libre. De (17.3.10), y si  $Ze$  es la carga del núcleo residual,

$$F = \frac{2\pi}{a_{B,Z}k_e} \left( 1 - \exp \frac{-2\pi}{a_{B,Z}k_e} \right)^{-1}, \quad a_{B,Z} = \frac{\hbar^2}{m_e Z e^2}, \quad k_e = \frac{\sqrt{2mE_e}}{\hbar}.$$

Nótese que  $1/a_{B,Z}k_e = Z\alpha c/v_e$  con  $c$  la velocidad de la luz y  $v_e$  la del electrón.

P.17.6. Encontrar la relación entre velocidad y momento para una partícula sujeta a un potencial dependiente sólo de  $r$  mas uno de tipo  $\hat{V}_{LS}$ ,

$$\hat{V}_{LS} = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{e^2}{r^3} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}.$$

*Solución.* Tenemos

$$\hat{v}_j = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{Q}_j].$$

La parte del hamiltoniano que contiene la energía cinética y el potencial dependiente sólo de  $r$  nos da una contribución a  $\hat{v}_j$  de  $m^{-1}\hat{P}_j$  (sec. 4.5). Evaluando el resto del conmutador,

$$\hat{v}_j = \frac{1}{m} \hat{P}_j + \frac{e^2}{2m^2c^2r^3} \sum \epsilon_{jkl} \hat{S}_k r_l$$

que también podemos escribir como

$$\hat{\mathbf{P}} = m\hat{\mathbf{v}} + \frac{e^2}{2m^2c^2r^3} \hat{\mathbf{S}} \times \mathbf{r}$$

P.17.7. Hallar las correcciones a los niveles energéticos del átomo de hidrógeno debidas a que la energía relativista de una partícula de masa  $m$  es  $\{m^2c^4 + \mathbf{p}^2c^2\}^{1/2}$ .

*Solución.* A orden  $1/c^2$ ,

$$\{m^2c^4 + \mathbf{p}^2c^2\}^{1/2} = mc^2 + \mathbf{p}^2/2m - \frac{1}{2mc^2} (\mathbf{p}^2/2m)^2 + \dots$$

El primer término es una constante, que absorbemos en la definición del cero de energías. Por tanto, utilizando el principio de correspondencia, tenemos el hamiltoniano, a orden  $1/c^2$ ,

$$\hat{H}_{\text{rel}} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{P}}^2 - \frac{e^2}{r} - \frac{1}{2mc^2} (\hat{\mathbf{P}}^2/2m)^2.$$

Debido a que  $v = p/m \sim \alpha c$ , podemos tratar el último término,

$$\hat{H}_1 = -\frac{1}{2mc^2} (\hat{\mathbf{P}}^2/2m)^2,$$

como una perturbación, a primer orden, del hamiltoniano coulombiano,

$$\hat{H}_C = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{P}}^2 - \frac{e^2}{r}.$$

Un truco que simplifica el cálculo es darse cuenta que

$$\hat{H}_1 = -\frac{1}{2mc^2} \left\{ \hat{H}_C + \frac{e^2}{r} \right\}^2,$$

y que, entre estados propios de  $\hat{H}_C$ ,

$$\hat{H}_C|n, l\rangle = E_n^{(0)}|n, l\rangle, \quad E_n^{(0)} = -Ry/n^2,$$

podemos sustituir  $\hat{H}_C$  por  $E_n^{(0)}$ . Obtenemos entonces los desplazamientos de energías,

$$\delta E_{\text{rel}} = \langle n, l | \hat{H}_1 | n, l \rangle = E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n^2} \left( \frac{2n}{2l+1} - \frac{3}{4} \right).$$

P.17.8. Resolver la ecuación de Schrödinger para una partícula en un potencial coulombiano en coordenadas parabólicas. Considérense estados con valor bien definido de  $\hat{L}_z$

*Solución.* En coordenadas parabólicas (Apéndice V), y considerando funciones de onda con  $\hat{L}_z \psi^{(M)} = \hbar M \psi^{(M)}$ ,

$$\psi^{(M)}(\xi, \eta, \phi) = e^{iM\phi} \varphi(\xi, \eta)$$

la ecuación de Schrödinger es

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \right\} \varphi(\xi, \eta) \\ & + \frac{\hbar^2 M^2}{2m} (\xi^{-1} + \eta^{-1}) \varphi(\xi, \eta) + 2e_1 e_2 \varphi(\xi, \eta) = (\xi + \eta) E \varphi(\xi, \eta); \end{aligned}$$

$e_1, e_2$  son las cargas de las partículas. La ecuación es separable.

A) Estados ligados. Escribimos  $\varphi = g_1(\xi)g_2(\eta)$ , con  $g_i(\xi) = \xi^{l_i+1/2} e^{-\xi/2a_i} P_i(\xi)$ ,

$i = 1, 2$ , y  $a_E = \hbar/\sqrt{-2mE}$ . La ecuación es como la que define los polinomios de Laguerre. La solución es

$$\begin{aligned} \psi_{n_1 n_2}^{(M)}(\xi, \eta, \phi) &= a_E^{-3/2} \sqrt{\frac{n_1! n_2!}{\pi(n_1 + n_2 + |M|)(n_1 + |M|)(n_2 + |M|)!}} \\ &\times e^{iM\phi} \left(\frac{\xi\eta}{a_E^2}\right)^{|M|/2} e^{-(\xi+\eta)/2a_E} L_{n_1}^{|M|}(\xi/a_E) L_{n_2}^{|M|}(\eta/a_E) \end{aligned}$$

y está normalizada a  $\langle \psi_{n_1' n_2'}^{(M')} | \psi_{n_1 n_2}^{(M)} \rangle = \delta_{MM'} \delta_{n_1 n_1'} \delta_{n_2 n_2'}$ . Los  $n_i$  son enteros  $\geq 0$ ; se tienen las energías  $E = -m(e_1 e_2)^2 / 2\hbar^2 (n_1 + n_2 + |M| + 1)^2$ .

B) Estados del continuo. Sólo resolvemos el caso de estados con simetría cilíndrica alrededor de  $OZ$ , de manera que  $M = 0$ . Con notación como en el texto principal, definimos  $G$  por

$$\psi(\xi, \eta) = e^{ik\xi/2} e^{ik\eta/2} G(\eta)$$

que satisface la ecuación

$$\eta G''(\eta) + (1 - ik\eta)G'(\eta) + \frac{\sigma}{a_0} G(\eta) = 0.$$

La solución es  $G = M(i\sigma/a_0 k, 1, ik\eta)$ . La ecuación (17.3.11) del texto se obtiene escogiendo el eje  $OZ$  paralelo a  $\mathbf{k}$  y la normalización apropiada:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{\pm} = \Gamma(1 - i\sigma/a_0 k) e^{\pi\sigma/2a_0 k} e^{ik(\xi-\eta)/2} M(i\sigma/a_0 k, 1, ik\eta).$$

P.17.9. Utilizar la relación de Kummer (Apéndice IV) para verificar la igualdad de las dos expresiones (17.3.6a,b) para  $R_{kl}$ .

## CAPÍTULO 18.

# Partículas en campos electromagnéticos (clásicos)

### 18.1. Sustitución mínima. Potencial de Coulomb. Invariancia gauge de la ecuación de Schrödinger. Sustitución mínima en un retículo

#### 18.1.1. Sustitución mínima. Ecuación de Schrödinger en presencia de un campo electromagnético

Los campos eléctrico,  $\mathcal{E}$ , y magnético,  $\mathcal{B}$ , son cantidades medibles. Por tanto, en una teoría completamente cuántica, tanto  $\mathcal{E}$  como  $\mathcal{B}$  (o  $\phi$  y  $\mathbf{A}$ , si utilizamos potenciales) deberían venir representados por operadores,

$$\hat{\mathcal{E}}, \hat{\mathcal{B}}, \hat{\phi}, \hat{\mathbf{A}}.$$

Este estudio se realizará en el capítulo 20. Por el momento, consideramos situaciones en las que las fluctuaciones cuánticas de  $\hat{\mathcal{E}}$ ,  $\hat{\mathcal{B}}$  sean despreciables frente a sus valores medios y, por tanto, podemos aproximar los operadores por el producto por sus valores medios, es decir, por campos clásicos:

$$\mathcal{E}_{\text{cl}} \simeq \langle \hat{\mathcal{E}} \rangle, \quad \mathcal{B}_{\text{cl}} \simeq \langle \hat{\mathcal{B}} \rangle, \quad \text{etc.}$$

Para aligerar la notación, suprimimos el subíndice “cl” escribiendo, simplemente,  $\mathcal{E}$ ,  $\mathcal{B}$ ,  $\phi$ ,  $\mathbf{A}$ .

Clásicamente, la relación entre la velocidad de una partícula y su momento vienen modificados en presencia de un campo electromagnético por

$$m\mathbf{v}_{\text{cl}} = \mathbf{p}_{\text{cl}} - \frac{e}{c} \mathbf{A},$$

y el hamiltoniano de una partícula con carga  $e$  en un campo electromagnético se convierte en

$$H_{\text{cl}} = \frac{1}{2} m \mathbf{v}_{\text{cl}}^2 \rightarrow \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p}_{\text{cl}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2.$$

Es decir: podemos obtener el hamiltoniano realizando lo que se llama la *sustitución mínima*,

$$\mathbf{p}_{\text{cl}} \rightarrow \mathbf{p}_{\text{cl}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}.$$

En el caso cuántico utilizamos el principio de correspondencia y postulamos

$$\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla \rightarrow \hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = -i\hbar\nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t). \quad (18.1.1)$$

Podemos incluir también la interacción con un potencial escalar extendiendo la sustitución mínima a las derivadas con respecto al tiempo:

$$i\hbar\partial_t \rightarrow i\hbar\partial_t - e\phi(\mathbf{r}, t). \quad (18.1.2)$$

La ecuación de Schrödinger para una partícula con carga  $e$ , en presencia de un potencial no electromagnético  $V$ , se convertirá en lo siguiente al incluir la interacción electromagnética a través de la sustitución mínima:

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\Psi &= \frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla)^2\Psi + V\Psi \\ \rightarrow i\hbar\partial_t\Psi - e\phi\Psi &= \frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\Psi + V\Psi, \end{aligned} \quad (18.1.3)$$

que podemos reescribir como

$$i\hbar\partial_t\Psi = e\phi\Psi + \frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\Psi + V\Psi \quad (18.1.4)$$

lo que corresponde al hamiltoniano efectivo

$$\hat{H}_{\text{e.m.}} = e\phi + \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + V; \quad \hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla. \quad (18.1.5)$$

Si la partícula tiene espín, hay un término extra de interacción del espín con el campo magnético, y debemos escribir

$$\hat{H}_{\text{e.m.}} = e\phi + \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - \frac{\mu}{s\hbar} \mathbf{S}\mathbf{B} + V; \quad (18.1.6)$$

a  $\mu$  se le llama *momento magnético intrínseco*, y  $s$  es el espín total de la partícula. La cantidad  $\mu$  puede calcularse en teoría relativista cuántica de campos; para nosotros es un parámetro empírico. Experimentalmente, para protón, neutrón y electrón tenemos  $\mu_p = 2.79\mu_N$ ,  $\mu_n = -1.91\mu_N$ ,  $\mu_N = |e|\hbar/2m_p c$  y  $\mu_e = -|e|\hbar/2m_e c$ . De momento vamos a olvidar la interacción con el espín (que es de orden superior en  $1/c$  con respecto al resto) y trabajamos con (18.1.4,5).

Como una primera aplicación, vamos a utilizar (18.1.5) para *deducir* la interacción de Coulomb en mecánica cuántica. Consideramos un electrón interaccionando con un núcleo de carga  $Ze_p$ ,  $e_p$  la carga del protón. Como éste

<sup>1</sup> El valor que damos para el momento magnético del electrón es aproximado; si escribimos  $\mu_e = -\{1 + a_e\}|e|\hbar/2m_e c$ , entonces se tiene

$$\begin{aligned} a(e) &= (1\,159\,652\,140 \pm 27) \times 10^{-12} \quad [\text{Teoría}], \\ a(e) &= (1\,159\,652\,188 \pm 3) \times 10^{-12} \quad [\text{Experimental}]. \end{aligned}$$

El cálculo teórico requiere considerar efectos relativistas y cuánticos para los campos electromagnéticos; su increíble acuerdo con el valor experimental es una solidísima indicación de lo correcto, entre otras cosas, de la descripción de interacciones electromagnéticas a través de la sustitución mínima.

es muy pesado comparado con el electrón, lo consideramos como fijo. El campo electromagnético creado por una partícula se obtiene de resolver las ecuaciones de Maxwell en presencia de cargas (Apéndice V). En nuestra aproximación el núcleo es estático luego  $\mathbf{J}_p = 0$  y  $\rho = Ze_p\delta(\mathbf{r})$ . Nos queda, pues,  $\mathbf{B} = 0$  y  $\nabla\mathcal{E} = 4\pi\rho = 4\pi Ze_p\delta(\mathbf{r})$ . Podemos por tanto escoger la solución  $\mathbf{A} = 0$ , y  $\phi$  satisface la ecuación  $\Delta\phi = -4\pi Ze_p\delta(\mathbf{r})$ , con solución  $\phi(\mathbf{r}) = e_p Z/r$ . (Esta solución es única, salvo transformaciones gauge que, como veremos en un momento, no cambian nada). La ecuación (18.1.5) se nos convierte en

$$\hat{H}_{e.m.} = \hat{H}_{\text{Coulomb}} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{P}}^2 - \frac{e^2 Z}{r},$$

que es el hamiltoniano que ya habíamos utilizado.

### 18.1.2. Transformaciones de gauge

Consideramos ahora transformaciones de gauge, para una partícula de carga  $e$ ,

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) &\rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_f(\mathbf{r}, t) + \nabla f(\mathbf{r}, t), \\ \phi(\mathbf{r}, t) &\rightarrow \phi_f(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c} \partial_t f(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (18.1.7a)$$

Los campos eléctrico y magnético no cambian con estas transformaciones; pero como (18.1.4) involucra a  $\mathbf{A}$  y  $\phi$ , la ecuación de Schrödinger sí se altera. ¿Se pierde la invariancia gauge en mecánica cuántica? La respuesta es *no*. Lo único que hace falta reconocer es que no hay motivo por el que la transformación de gauge no afecte también a la función de onda. De hecho, vamos a demostrar que la ecuación de Schrödinger (18.1.4) permanece invariante si, *simultáneamente* con (18.1.7a), realizamos, sobre la función de onda de la partícula la transformación (que seguimos llamando *gauge*) definida por<sup>2</sup>

$$\Psi(\mathbf{r}; t) \rightarrow \Psi_f(\mathbf{r}; t) = e^{ief(\mathbf{r}, t)/\hbar c} \Psi(\mathbf{r}; t) \quad (18.1.7b)$$

(esperamos que no haya confusión entre la carga de la partícula,  $e$ , y el número  $e=2.718\dots$ ).

En efecto: comenzamos por comprobar que la expresión

$$\left( \hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \Psi_f(\mathbf{r}; t) = \left( i\hbar\nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \Psi_f(\mathbf{r}; t)$$

<sup>2</sup> Para varias partículas  $a = 1, 2, \dots, n$  con cargas  $q_1, q_2, \dots, q_n$  definimos la sustitución mínima como  $\hat{\mathbf{P}}_a \rightarrow \hat{\mathbf{P}}_a - (q_a/c)\mathbf{A}(\mathbf{r}_a, t)$  y la transformación de la función de onda por

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t) \rightarrow \left\{ \exp \frac{i}{\hbar c} \sum_a q_a f(\mathbf{r}_a; t) \right\} \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; t).$$



sólo cambia en una fase bajo (18.1.7). Tenemos,

$$\begin{aligned}
 \left(i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\Psi &\rightarrow \left(i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} - \frac{e}{c}\nabla f\right)e^{ief(\mathbf{r},t)/\hbar c}\Psi \\
 &= -i\hbar\left(\frac{ie}{\hbar c}\nabla f\right)e^{ief(\mathbf{r},t)/\hbar c}\Psi + e^{ief(\mathbf{r},t)/\hbar c}\Psi(-i\hbar\nabla\Psi) \\
 &+ e^{ief(\mathbf{r},t)/\hbar c}\Psi\left(-\frac{e}{c}\mathbf{A}\Psi\right) - \frac{e}{c}(\nabla f)e^{ief(\mathbf{r},t)/\hbar c}\Psi \\
 &= e^{ief(\mathbf{r},t)/\hbar c}\left(i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\Psi.
 \end{aligned}$$

Debido a esto, se dice que la combinación  $i\hbar\nabla - (e/c)\mathbf{A}$  es *covariante gauge*.

De igual manera comprobaríamos que

$$\left(i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\Psi \rightarrow e^{ief/\hbar c}\left(i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\Psi$$

y que

$$(i\hbar\partial_t - e\phi)\Psi \rightarrow e^{ief/\hbar c}(i\hbar\partial_t - e\phi)\Psi.$$

Por tanto, la ecuación (18.1.3) se convierte en

$$e^{ief/\hbar c}(i\hbar\partial_t - e\phi)\Psi = \frac{1}{2m}e^{ief/\hbar c}\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\Psi + e^{ief/\hbar c}V\Psi$$

que cancelando la fase común es idéntica a (18.1.3).

Para terminar esta subsección, discutiremos algún aspecto interesante de la invariancia gauge. Como veremos, especialmente en las secciones 18.5 y 23.1, la formulación cuántica del electromagnetismo involucra necesariamente los potenciales  $\phi$  y  $\mathbf{A}$ . Por otra parte, hay evidencia experimental abrumadora de que todas las interacciones (no sólo la electromagnética, sino también la débil, la fuerte e incluso la gravitatoria) vienen mediadas por campos tipo gauge; y, además, pueden introducirse invocando un principio de sustitución mínima similar al de (18.1.7). La invariancia gauge, lejos de ser una curiosidad, resulta ser una propiedad básica de la naturaleza.

La transformación gauge es peculiar; es distinta de las que consideramos en el capítulo 5, ya que no viene representada por un operador unitario (salvo para  $f = \text{constante}$ , caso que discutiremos a continuación). En efecto, de (18.1.7b) este operador tendría que ser  $\hat{U}(f)$  con

$$\hat{U}(f)\Psi(\mathbf{r}; t) = e^{ief(\mathbf{r},t)}\Psi(\mathbf{r}; t)$$

lo que no presenta un problema; pero ni  $\hat{U}(f)$  ni ningún operador lineal verifica (18.1.7a); es decir, no es cierto que

$$\hat{U}(f)\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)\hat{U}^{-1}(f) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla f.$$

Cuando  $f$  depende de  $\mathbf{r}$ ,  $t$ , decimos que la transformación gauge es *local*; cuando  $f = \text{constante}$ , hablamos de transformación *global*. En este caso la transformación

$$\hat{U}\Psi(\mathbf{r}; t) = e^{ief}\Psi(\mathbf{r}; t) \quad (18.1.8)$$

sí corresponde a una simetría; la correspondiente cantidad conservada en el tiempo es la *carga eléctrica*. De hecho, como la transformación (18.1.8) conmuta con todos los operadores, produce una regla de superselección: no es posible construir superposiciones de estados con distintos valores de la carga eléctrica.

### 18.1.3. Observables y reglas de conmutación en presencia de campos electromagnéticos

Vamos ahora a encontrar la relación entre operador velocidad e impulso en presencia de un campo electromagnético, y a encontrar las leyes de conmutación de las componentes del primero. Es importante darse cuenta de que, en presencia de estos campos,  $\hat{\mathbf{P}}$  deja de ser observable; de hecho, depende manifiestamente del gauge. La velocidad, sin embargo, sigue siendo observable.

EJERCICIO: Imaginar un experimento que nos mida la velocidad de una partícula. ¿Y el momento? •

Según el argumento general (sec. 4.4) tenemos

$$\hat{v}_j = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{\text{e.m.}}, \hat{Q}_j],$$

con  $\hat{H}_{\text{e.m.}}$  dado por (18.1.6). Un cálculo sencillo nos da

$$\hat{v}_j = \frac{1}{m} \left( \hat{P}_j - \frac{e}{c} A_j \right),$$

expresión idéntica a la de la electrodinámica clásica.

Las relaciones de conmutación entre Ps y Qs son como en ausencia de campo electromagnético (ya que se sigue teniendo  $\hat{P}_j = -i\hbar\partial/\partial r_j$ ); pero las componentes de la velocidad no conmutan entre sí. En efecto,

$$[\hat{v}_j, \hat{v}_k] = \frac{1}{m^2} \left[ \hat{P}_j - \frac{e}{c} A_j, \hat{P}_k - \frac{e}{c} A_k \right] = \frac{e}{m^2 c} \left( [\hat{P}_j, A_k] - [\hat{P}_k, A_j] \right).$$

Ahora bien: recordando el ejercicio de la sección 4.5,

$$[\hat{P}_l, A] = -i\hbar\partial A/\partial r_l$$

y por tanto

$$[\hat{v}_j, \hat{v}_k] = \frac{i\hbar e}{m^2 c} \left( \frac{\partial A_k}{\partial r_j} - \frac{\partial A_j}{\partial r_k} \right),$$

o, recordando la relación entre  $\mathbf{A}$  y  $\mathcal{B}$  y la identidad

$$\sum \epsilon_{ijk} \epsilon_{irs} = \delta_{jr} \delta_{ks} - \delta_{js} \delta_{kr},$$

$$[\hat{v}_j, \hat{v}_k] = \frac{i\hbar e}{m^2 c} \sum_l \epsilon_{jkl} \mathcal{B}_l. \quad (18.1.9)$$

Una característica interesante de este resultado es que, aunque la expresión para  $\hat{v}_j$  involucra  $A_j$ , la invariancia gauge nos garantiza que la relación de conmutación (que es observable, por ejemplo midiendo indeterminaciones) contiene a  $A_j$  sólo en la combinación observable  $\mathcal{B}_l$ .

### 18.1.4. Sustitución mínima en un retículo

Damos ahora la definición de sustitución mínima para la formulación de la mecánica cuántica en un retículo que vimos en las secciones 3.6 y 11.5. Recordamos que el operador momento se definía por

$$\hat{P}_j \Psi_{\mathbf{n}} = \frac{-i\hbar}{2u} (\Psi_{\mathbf{n}+\mathbf{j}} - \Psi_{\mathbf{n}-\mathbf{j}})$$

con  $u$  el espaciamiento del retículo y  $\mathbf{j}$  un vector unitario a lo largo del eje  $Oj$ . El potencial vector estará definido sobre el retículo,  $A_j(\mathbf{r}_{\mathbf{n}})$ , y la transformación gauge para él será

$$A_j(\mathbf{r}_{\mathbf{n}}) \rightarrow A_j(\mathbf{r}_{\mathbf{n}}) + \frac{1}{2u} \left( f(\mathbf{r}_{\mathbf{n}+\mathbf{j}}) - f(\mathbf{r}_{\mathbf{n}-\mathbf{j}}) \right). \quad (18.1.10a)$$

Para una función de onda, (18.1.7b) se convertirá en

$$\Psi_{\mathbf{n}} \rightarrow e^{ie f(\mathbf{r}_{\mathbf{n}})/\hbar c} \Psi_{\mathbf{n}}. \quad (18.1.10b)$$

La definición de sustitución mínima que tenemos que tomar en el retículo es

$$\hat{P}_j \Psi_{\mathbf{n}} \rightarrow \frac{-i\hbar}{2u} \left( e^{-iue A_j(\mathbf{r}_{\mathbf{n}})/c\hbar} \Psi_{\mathbf{n}+\mathbf{j}} - e^{iue A_j(\mathbf{r}_{\mathbf{n}})/c\hbar} \Psi_{\mathbf{n}-\mathbf{j}} \right). \quad (18.1.11)$$

En efecto: para  $u \rightarrow 0$ , esto coincide con

$$-i\hbar(\partial/\partial r_j)\Psi - \frac{e}{c} A_j \Psi,$$

mientras que, al hacer una transformación de gauge (18.1.10),

$$\begin{aligned} & \frac{-i\hbar}{2u} \left( e^{-iue A_j(\mathbf{r}_{\mathbf{n}})/c\hbar} \Psi_{\mathbf{n}+\mathbf{j}} - e^{iue A_j(\mathbf{r}_{\mathbf{n}})/c\hbar} \Psi_{\mathbf{n}-\mathbf{j}} \right) \\ & \rightarrow \left\{ \exp \frac{ie}{2\hbar c} [f(\mathbf{r}_{\mathbf{n}+\mathbf{j}}) + f(\mathbf{r}_{\mathbf{n}-\mathbf{j}})] \right\} \\ & \times \frac{-i\hbar}{2u} \left( e^{-iue A_j(\mathbf{r}_{\mathbf{n}})/c\hbar} \Psi_{\mathbf{n}+\mathbf{j}} - e^{iue A_j(\mathbf{r}_{\mathbf{n}})/c\hbar} \Psi_{\mathbf{n}-\mathbf{j}} \right), \end{aligned} \quad (18.1.12)$$

esto es, sólo tenemos un cambio por multiplicación por la fase

$$\exp \frac{ie}{2\hbar c} [f(\mathbf{r}_{\mathbf{n}+\mathbf{j}}) + f(\mathbf{r}_{\mathbf{n}-\mathbf{j}})] \xrightarrow{u \rightarrow 0} \exp \frac{ie}{\hbar c} f(\mathbf{r})$$

de manera que mantenemos invariancia gauge en el retículo, incluso para valores finitos de  $u$ .

## 18.2. Partícula en un campo magnético uniforme

### 18.2.1 Espectro de energías

Consideramos como una primera aplicación el caso  $\mathcal{E} = 0$ ,  $\mathcal{B} = \text{constante}$ . Si elegimos el eje  $OZ$  a lo largo de  $\mathcal{B}$ , podemos escoger los potenciales  $\phi = 0$ ,  $A_y = A_z = 0$ ,  $A_x = -y\mathcal{B}$ .

Comenzaremos suponiendo que la partícula tiene espín bien definido a lo largo de la dirección de  $\mathcal{B}$ ; lo denotamos por  $s_3$ . La función de onda de la partícula la escribimos como

$$\underline{\psi}_E = \underline{\chi}(s_3)\varphi_E, \quad \underline{S}_z \underline{\chi}(s_3) = \hbar s_3 \underline{\chi}(s_3).$$

La ecuación de Schrödinger nos da, para  $\varphi_E$ ,

$$\hat{H}\varphi_E = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \varphi_E - 2\mu s_3 \mathcal{B} \varphi_E = E \varphi_E$$

y hemos utilizado (18.1.6) con  $\phi = V = 0$ . Desarrollando,

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left( \hat{P}_x + \frac{c}{\mathcal{B}} \mathcal{B}y \right)^2 + \frac{1}{2m} (\hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2) - 2\mu s_3 \mathcal{B} \right\} \varphi_E = E \varphi_E. \quad (18.2.1)$$

La única dependencia en las coordenadas del operador  $\hat{H}$  en (18.2.1) es en la coordenada  $y$ . Por tanto,  $\hat{P}_x$  y  $\hat{P}_z$  conmutan con  $\hat{H}$  y podemos buscar soluciones simultáneas de (18.2.1) y de

$$\hat{P}_x \varphi_E = p_x \varphi_E, \quad \hat{P}_z \varphi_E = p_z \varphi_E.$$

De estas dos últimas resulta que

$$\varphi_E(\mathbf{r}) = f_E(y) \exp \frac{i}{\hbar} (xp_x + zp_z);$$

sustituyendo en (18.2.1), y después de algún rearrreglo, obtenemos la ecuación para  $f_E$ ,

$$\frac{d^2 f_E(y)}{dy^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ E + 2\mu s_3 \mathcal{B} - \frac{p_x^2}{2m} - \frac{m}{2} \left( \frac{e\mathcal{B}}{mc} \right)^2 (y - y_0)^2 \right\} f_E(y) = 0, \quad (18.2.2)$$

y hemos definido  $y_0 = -cp_x/e\mathcal{B}$ .

Formalmente, esta ecuación es como la de una partícula en un oscilador armónico unidimensional, con las tres modificaciones siguientes: I) El oscilador no está centrado en  $y = 0$  sino en  $y = y_0$ . II) La energía  $E_n$  viene sustituida por

$$E_n = E + 2\mu \mathcal{B} s_3 - \frac{p_z^2}{2m}.$$

III) La "frecuencia" es

$$\omega_{\mathcal{B}} = \frac{|e|\mathcal{B}}{mc}.$$

El análisis formal del espectro de energías del oscilador armónico sigue siendo válido y se ha de tener  $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_B$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$  y, por tanto,

$$E = (n + \frac{1}{2}) \frac{|e|\hbar\mathcal{B}}{mc} - 2\mu\mathcal{B}s_3 + \frac{p_z^2}{2m}. \quad (18.2.3)$$

Según esto, para cada valor de  $p_z$  (que varía continuamente) la energía está cuantizada.

### 18.2.2. Precesión del espín

Consideramos ahora el caso de una partícula que se encuentra en el instante de tiempo  $t = 0$  en un estado propio de la componente del espín a lo largo de una dirección, que escogeremos como eje  $OZ$ , que no coincide con  $\mathcal{B}$ . El estado no puede ser estacionario y evolucionará en el tiempo de acuerdo con la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.

Supongamos que, en  $t = 0$ , la función de onda corresponde a un estado propio de  $\underline{S}_z$  con valor propio  $\hbar/2$ ; suponemos la partícula de espín total  $1/2$ . En este tiempo inicial, la función de onda de espín,  $\underline{\chi}(0)$ , la podemos tomar como

$$\underline{\chi}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (18.2.4)$$

El campo magnético lo tomamos como  $\mathcal{B} = \mathcal{B}\mathbf{n}$ , no paralelo al eje  $OZ$ . Podemos escribir la función de onda total como

$$\underline{\psi}(\mathbf{r}; t) = \varphi(\mathbf{r}; t)\underline{\chi}(t) \quad (18.2.5a)$$

con

$$i\hbar\partial_t\varphi(\mathbf{r}; t) = \hat{H}^{(0)}\varphi(\mathbf{r}; t). \quad (18.2.5b)$$

$\hat{H}^{(0)}$  es la parte del hamiltoniano independiente del espín,

$$\hat{H}^{(0)} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2.$$

Entonces, la ecuación de Schrödinger completa,

$$i\hbar\partial_t\underline{\psi}(\mathbf{r}; t) = \hat{H}\underline{\psi}(\mathbf{r}; t); \quad \hat{H} = \hat{H}^{(0)} - \frac{2\mu}{\hbar} \underline{\mathcal{S}}\mathcal{B}, \quad \underline{\mathcal{S}} = \frac{\hbar}{2} \underline{\sigma} \quad (18.2.6)$$

nos da la evolución de  $\underline{\chi}(t)$  con el tiempo. De (18.2.6) y teniendo en cuenta (18.2.5) tenemos

$$i\hbar\partial_t\underline{\chi}(t) = \frac{-2\mu}{\hbar} \underline{\mathcal{S}}\mathcal{B}\underline{\chi}(t), \quad (18.2.7)$$

con solución

$$\underline{\chi}(t) = \left( \exp \frac{i\mu\mathcal{B}}{\hbar} \mathbf{n}\underline{\sigma} \right) \underline{\chi}(0). \quad (18.2.8)$$

Utilizando las propiedades de las matrices de Pauli encontramos que

$$\exp \frac{i\mu\mathcal{B}t}{\hbar} \mathbf{n}\underline{\sigma} = \cos \frac{\bar{\omega}}{2} t - i\mathbf{n}\underline{\sigma} \sin \frac{\bar{\omega}}{2} t, \quad \bar{\omega} = -\frac{2\mu\mathcal{B}}{\hbar}$$

y, por tanto, dada la condición inicial (18.2.4),

$$\underline{\chi}(t) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\bar{\omega}}{2} t - in_z \sin \frac{\bar{\omega}}{2} t \\ (-in_x + n_y) \sin \frac{\bar{\omega}}{2} t \end{pmatrix}. \quad (18.2.9)$$

El valor esperado de la componente  $z$  del espín es

$$\langle \underline{\chi}(t) | \underline{S}_z | \underline{\chi}(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} [(1 - n_z^2) \cos \bar{\omega} t + n_z^2]. \quad (18.2.10)$$

Como si fuese un momento magnético clásico, el espín efectúa un movimiento de precesión. Para electrones, la frecuencia de precesión,  $\bar{\omega} = e\mathcal{B}/mc$ , coincide con la cantidad  $\omega_B$  de la subsección previa.

Esta precesión del espín proporciona un método muy exacto de medida de momentos magnéticos.

### 18.3. Átomo de hidrógeno en un campo magnético uniforme. Efecto Zeeman

Consideramos un electrón que se mueve sujeto a un potencial coulombiano (átomo hidrogenoide) y al que sometemos a un campo magnético constante,  $\mathcal{B}$ , al que tomamos dirigido a lo largo del eje  $OZ$ . Realizaremos los cálculos específicamente para el átomo de hidrógeno, de manera que el potencial escalar es  $\phi = e/r$ ,  $e$  la carga del protón. El potencial vector lo podemos tomar como

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \mathcal{B} \times \mathbf{r}.$$

El hamiltoniano (18.1.6) es pues,

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{P}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{e^2}{r} - \frac{2\mu}{\hbar} \mathcal{B} S_z,$$

y remarcamos que, con la notación actual, la carga del electrón es  $-e$ .  $\hat{H}$  se puede reescribir como

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{P}}^2 - \frac{e^2}{r} + \frac{\mu_B}{\hbar} \left( \hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}} \right) \cdot \mathcal{B} + \frac{e^2}{8mc^2} (\mathcal{B} \times \mathbf{r})^2; \quad (18.3.1)$$

$\mu_B$  es el llamado *magnetón de Bohr*,

$$\mu_B = |e|\hbar/2mc \simeq 0.927 \times 10^{-20} \text{ erg/gauss.}$$

Utilizando que  $\mathcal{B}$  es paralelo a  $OZ$ , podemos escribir también

$$\hat{H} = \hat{H}_C + \frac{\mu_B \mathcal{B}}{\hbar} \left( \hat{L}_z + 2\hat{S}_z \right) + \frac{e^2}{8mc^2} \mathcal{B}^2 (x^2 + y^2), \quad (18.3.2a)$$

con  $\hat{H}_C$  el hamiltoniano coulombiano,

$$\hat{H}_C = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{P}}^2 - \frac{e^2}{r}. \quad (18.3.2b)$$

La velocidad media de un electrón en el átomo de hidrógeno es (sec. 17.2) del orden de  $\bar{v}^2 \sim \alpha^2 c^2 \sim 5 \times 10^{-5} c^2$ . Salvo que  $\mathcal{B}$  fuese enorme, esto no vendrá modificado mucho por los términos extra, proporcionales a  $\mathcal{B}$ , en (18.3.2a). Podemos pues, en un primer análisis, despreciar el último término en esa ecuación, ya que contiene  $c^2$  en el denominador. Comenzamos, por tanto, considerando el hamiltoniano

$$\hat{H}^{(0)} = \hat{H}_C + \frac{\mu_B \mathcal{B}}{\hbar} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z). \quad (18.3.3)$$

Puesto que  $\hat{L}_z$ ,  $\hat{L}^2$  y  $\hat{S}_z$  conmutan con  $\hat{H}^{(0)}$ , podemos buscar soluciones de la ecuación de Schrödinger de la forma

$$\psi_E = \chi(s_3) Y_M^l(\theta, \phi) R_{El}^{\mathcal{B}}(r),$$

con notación autoexplicativa. (18.3.3) nos da entonces la condición, para estos estados,

$$\hat{H}^{(0)} \psi_E = \hat{H}_C \psi_E + \mu_B \mathcal{B} (M + 2s_3) \psi_E = E \psi_E.$$

Esta ecuación es formalmente idéntica a la del átomo de hidrógeno, con  $E$  sustituido por  $E_n$ ,

$$E_n = E - \mu_B \mathcal{B} (M + 2s_3).$$

Por tanto, sustituyendo la serie de Balmer, obtenemos el espectro de energías

$$E = \frac{-m e^4}{2\hbar n^2} + \mu_B \mathcal{B} (M + 2s_3), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (18.3.4)$$

Parte de la degeneración ha desaparecido ya que las energías (18.3.4) varían con  $M$  y  $s_3$ . Éste es el *efecto Zeeman*.

Pasamos ahora a calcular el espectro de energía correspondiente a (18.3.1), esto es, incluyendo el término

$$\frac{e^2}{8mc^2} \mathcal{B}^2 (x^2 + y^2),$$

al que tratamos como una perturbación de  $\hat{H}^{(0)}$ , a primer orden. Denotando por  $\epsilon_n$  a las energías correspondientes a (18.3.1), escribimos

$$\epsilon_n = E + \delta E$$

con  $E$  dado por (18.3.4) y

$$\delta E = \left\langle \psi_E \left| \frac{e^2}{8mc^2} \mathcal{B}^2 (x^2 + y^2) \right| \psi_E \right\rangle + O(1/c^3).$$

Hagamos el cálculo para el estado fundamental,  $n = 1$ . Tenemos

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= -\frac{me^4}{2\hbar} + \mu_B \mathcal{B}(M + 2s_3) + \delta E_1, \\ \delta E_1 &= \frac{4e^2 \mathcal{B}^2}{8mc^2} \int_0^\infty \frac{dr r^2}{a_1^3} \int \frac{d\Omega}{4\pi} (x^2 + y^2) e^{-2r/a_1}. \end{aligned} \quad (18.3.5)$$

Hemos aprovechado la similitud formal de  $\hat{H}^{(0)}$  con el hamiltoniano coulombiano para escribir la correspondiente función de onda radial como

$$R_{10}^B(r) = \frac{2}{a_1^{3/2}} \exp \frac{-r}{a_1}$$

y  $a_1$  es lo análogo al radio de Bohr, sustituyendo la energía  $E_1 = -me^4/2\hbar$  por

$$E = -me^4/2\hbar + \mu_B \mathcal{B}(M + 2s_3). \quad (18.3.6)$$

Tomando  $M = 0$ , ya que  $l = 0$ , y dándose cuenta de que  $\mu_B = e\hbar/2mc$  es de orden  $1/c$  resulta que, al orden al que estamos trabajando, podemos despreciar el término en  $\mu_B$  en (18.3.6) y tomar, simplemente,  $a_1 = a_B$ . Finalmente, la integral en (18.3.5) puede hacerse fácilmente utilizando la fórmula de “integración simétrica”,

$$\int_{R^3} d^3r r_i r_j f(r) = \frac{4\pi}{3} \delta_{ij} \int_0^\infty dr r^4 f(r).$$

El resultado final es

$$\epsilon_1 = -\frac{me^4}{2\hbar} + 2\mu_B \mathcal{B}s_3 + \frac{e^2 \mathcal{B}^2 a_B^2}{4mc^2} + O(1/c^3). \quad (18.3.7)$$

## 18.4. Interacción con un campo eléctrico constante.

Extracción fría de electrones de un sólido.

Átomo de hidrógeno: efecto Stark

Consideramos ahora la interacción de una partícula (eventualmente sujeta a otro potencial) con un campo eléctrico constante,  $\mathcal{E}$ . Elegimos el gauge de forma que

$$\mathbf{A} = 0, \quad \phi = \mathbf{r}\mathcal{B}. \quad (18.4.1)$$

Estudiaremos dos aplicaciones: la llamada extracción fría de electrones de un conductor y la modificación de los niveles de energía de un átomo de hidrógeno sumergido en el campo.



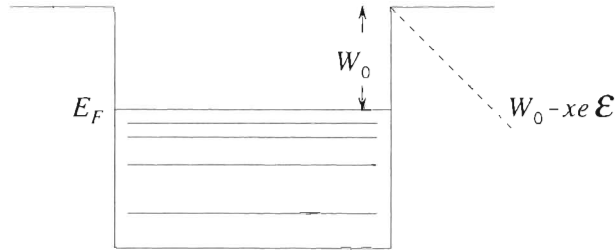


FIGURA 18.4.1. Potencial de un metal. La línea discontinua es  $V_E(x)$ .

#### 18.4.1. Extracción de electrones

Es posible extraer electrones de un conductor calentándolo, pero también es posible hacerlo aplicándole un campo eléctrico. En la sección 12.3 consideramos un conductor como un pozo infinito; vamos a hacer al modelo algo más realista considerando que el pozo es cuadrado, pero de profundidad finita. Llamemos  $W_0$  a la diferencia entre la energía de Fermi y el borde del pozo (fig. 18.4.1);  $W_0$  coincide con el trabajo necesario para extraer un electrón del metal. Aplicamos ahora un campo eléctrico  $\mathcal{E}$  perpendicular a una de las caras del conductor; escogemos el eje  $OX$  a lo largo de  $\mathcal{E}$ , y consideramos únicamente esta coordenada  $x$ , ya que las otras no juegan ningún papel. El potencial será ahora

$$V_E(x) = W_0 - xe\mathcal{E}. \quad (18.4.2)$$

Contamos el origen de coordenadas desde la superficie del sólido, y denotamos por  $-e$  a la carga del electrón.

La probabilidad de extraer un electrón vendrá dada por el coeficiente de transición  $D$  a través de la barrera (18.4.2). En la aproximación WKB al orden dominante podemos utilizar el resultado (8.4.3), con  $a = W_0$ , para obtener

$$D \simeq \exp \frac{-4W_0^{3/2} \sqrt{2m}}{3\hbar e\mathcal{E}}, \quad (18.4.3)$$

en acuerdo razonable con el experimento, dentro de la crudeza del modelo.

## 18.4.2. Átomo de hidrógeno en un campo eléctrico: efecto Stark

La ecuación de Schrödinger es ahora

$$\hat{H}_E \psi_E(\mathbf{r}) = E \psi_E(\mathbf{r}),$$

$$\hat{H}_E = -\frac{1}{2m} \hat{\mathbf{P}}^2 - \frac{e^2}{r} - e r \mathcal{E} \equiv \hat{H}_C + \hat{H}_1, \quad \hat{H}_1 = -e r \mathcal{E}.$$

Comparado con el término  $e^2/r$  el efecto de casi cualquier campo eléctrico externo es pequeño; podemos, por tanto, considerar al término  $\hat{H}_1 = -e r \mathcal{E}$  como una perturbación, y tratarlo a primer orden. La energías serán, pues,

$$E_i = E_n + \delta E_{n\beta}, \quad E_n = -\frac{Ry}{n^2}$$

con  $\delta E_{n\beta}$  los desplazamientos inducidos por la perturbación (*efecto Stark*). Siguiendo el desarrollo de la sección 11.2, consideramos los elementos de matriz

$$u_n^{l'l';M} = \langle \psi_n^{(l,M)} | \hat{H}_1 | \psi_n^{(l',M)} \rangle,$$

$\psi_n^{(l,M)}$  siendo las funciones de onda del átomo de hidrógeno, sin perturbar. Entonces, las  $\delta E_{n\beta}$  serán los valores propios de la matriz en  $l, l'$  de componentes  $u_n^{l'l';M}$ . Hemos tomado el mismo valor de  $M$  en  $\psi_n^{(l,M)}, \psi_n^{(l',M)}$  lo que es posible si escogemos  $OZ$  alineado en la dirección opuesta a  $\mathcal{E}$ . En este caso, además,

$$\hat{H}_1 = -e r \mathcal{E} = e z \mathcal{E} = e \mathcal{E} r \cos \theta.$$

Claramente,  $\mathbf{r}$  es un operador vectorial; podemos, por tanto, aplicar el teorema de Wigner–Eckart (sec. 13.7) para concluir que

$$u_n^{l'l';M} = e \mathcal{E} (1, 0; l', M | l) C(l, l', n). \quad (18.4.4)$$

Para calcular las  $C$  tomamos  $M = 0$ . Por una parte, de (18.4.4),

$$u_n^{l'l';0} = e \mathcal{E} (1, 0; l', 0 | l) C(l, l', n)$$

y por otra,

$$u_n^{l'l';0} = \langle \psi_n^{(l,0)} | e \mathcal{E} r \cos \theta | \psi_n^{(l',0)} \rangle$$

$$= e \mathcal{E} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} d \cos \theta Y_0^l(\theta, \phi) Y_0^{l'}(\theta, \phi) \cos \theta \int_0^\infty dr r^3 R_{nl}(r) R_{n'l'}(r).$$

Utilizando la fórmula  $Y_0^l(\theta, \phi) = \sqrt{(2l+1)/4\pi} P_l(\cos \theta)$ , la relación de recurrencia

$$x P_l(x) = \frac{l}{2l+1} P_{l-1}(x) + \frac{l+1}{2l+1} P_{l+1}(x)$$

y las propiedades de ortogonalidad de los  $P_l$  podemos llevar a cabo la integración angular obteniendo

$$u_n^{l';0} = e\mathcal{E} \frac{l\delta_{l'+1,l} + l'\delta_{l+1,l'}}{\sqrt{(2l+1)(2l'+1)}} I_{nl'l'}, \quad I_{nl'l'} = \int_0^\infty dr r^3 R_{nl}(r)R_{n'l'}(r).$$

En definitiva,

$$u_n^{l';M} = e\mathcal{E} \frac{(1,0;l',M|l)}{(1,0;l',0|l)} \frac{l\delta_{l'+1,l} + l'\delta_{l+1,l'}}{\sqrt{(2l+1)(2l'+1)}} I_{nl'l'}. \quad (18.4.5)$$

El caso general puede resolverse diagonalizando  $I_{nl'l'}$ , con los valores de las integrales que pueden deducirse con las fórmulas del Apéndice IV, o tratando el problema en coordenadas parabólicas (Landau y Lifshitz, 1958; Galindo y Pascual, 1978). Aquí nos limitaremos al caso más sencillo, con  $n = 2$ ,  $l, l' = 0, 1$ . Entonces

$$I_{2,01} = I_{2,10} = -3^{3/2}a_B;$$

por tanto,

$$u_2^{01;0} = u_2^{10;0} = -3e\mathcal{E}a_B; \quad u_2^{10;\pm 1} = 0.$$

Los desplazamientos energéticos son, pues,

$$\delta E_2(M=0) = \pm 3ea_B\mathcal{E}, \quad \delta E_2(M=\pm 1) = 0.$$

En el caso general,

$$\delta E_{n\beta} = \frac{3}{2}ea_B\mathcal{E}n\beta, \quad \beta = \nu_1 - \nu_2$$

con  $\nu_i$  enteros satisfaciendo  $0 \leq \nu_i \leq n$ , pero por lo demás arbitrarios.

### 18.5. Relevancia de los potenciales electromagnéticos en mecánica cuántica: efecto Bohm–Aharonov

Es sabido que las ecuaciones del electromagnetismo clásico pueden reformularse en términos de  $\mathcal{E}$  y  $\mathcal{B}$ ; por ejemplo, la segunda ecuación de Newton puede escribirse como

$$m\dot{\mathbf{v}} = e \left( \mathcal{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathcal{B} \right).$$

Uno puede preguntarse si no podría hacerse lo análogo en mecánica cuántica y evitarse los problemas asociados con la indeterminación gauge de  $\mathbf{A}$  y  $\phi$ . La respuesta es *no*. Hay abundantes razones experimentales y teóricas que implican que, en mecánica cuántica, las cantidades básicas son, realmente,  $\mathbf{A}$  y  $\phi$ . Entre ellas una particularmente espectacular es el efecto<sup>3</sup> Bohm–Aharonov (1959) en el que una partícula es sensible al hecho de que atraviesa zonas en

<sup>3</sup> Este efecto había sido ya considerado con anterioridad, en otro contexto, por Dirac.

las que  $\mathbf{A} \neq 0$ , a pesar de que no penetra en regiones en las que exista un valor no nulo de  $\mathcal{B}$  (o de  $\mathcal{E}$ ).

El dispositivo experimental es el de la figura 18.5.1a: desde un foco, situado en  $\mathbf{r}_0$ , enviamos partículas (digamos electrones, para fijar ideas) sobre dos rendijas de Young, 1 y 2. Detrás de estas rendijas colocamos un solenoide blindado, S, muy largo y estrecho; de hecho, trabajaremos con la idealización de un solenoide impenetrable, de diámetro despreciable, y de longitud infinita. Después de atravesar las rendijas de Young, recogemos los electrones en la pantalla (detector), D. Denotamos por  $\mathbf{r}_f$  al punto genérico donde llega el electrón.

Si el solenoide tiene  $n$  vueltas por unidad de longitud, su susceptibilidad magnética es  $\mu$ , y la corriente que circula por las espiras tiene una intensidad  $I$ , entonces, en el *interior* del solenoide (región S, en blanco, en la figura 18.5.1b) hay un campo magnético

$$\mathcal{B}(\mathbf{r}) = \mu n I \mathbf{z}, \quad \mathbf{r} \text{ en el interior de S.} \quad (18.5.1a)$$

$\mathbf{z}$  es un vector unitario a lo largo del eje  $OZ$ . Debido a que el solenoide es mucho más largo que las rendijas, el valor de  $\mathcal{B}$  es despreciable fuera del solenoide; en el límite tomamos

$$\mathcal{B}(\mathbf{r}) = 0, \quad \mathbf{r} \text{ fuera del solenoide S.} \quad (18.5.1b)$$

Puesto que el solenoide está provisto de un blindaje supuesto perfecto, ni clásica ni cuánticamente penetran en él los electrones. Por tanto, en las regiones accesibles a éstos,  $\mathcal{B}$  es nulo; pero, sin embargo,  $\mathbf{A}$  no se anula. En efecto, en el límite de un solenoide infinitamente largo y estrecho podemos tomar

$$\mathcal{B}_x = \mathcal{B}_y = 0; \quad \mathcal{B}_z = \mathcal{B} \delta(x) \delta(y),$$

$$A_z = 0, \quad A_x(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} \theta(y) \delta(x) \mathcal{B}, \quad A_x(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \theta(x) \delta(y) \mathcal{B}.$$

Por lo tanto, *todos* los caminos posibles atraviesan zonas en las que  $\mathbf{A} \neq 0$ .

EJERCICIO: Demostrar que esto último es cierto en cualquier gauge •

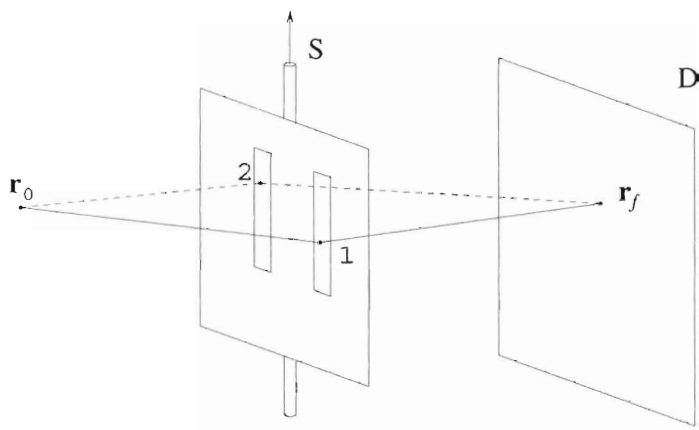
Tenemos, por tanto, posibles efectos de la presencia del campo magnético, que detectaremos en D. Para evaluar estos efectos trabajamos en la aproximación WKB, al orden más bajo. Hay dos caminos clásicos posibles:  $\ell_1 = \mathbf{r}_0 1 \mathbf{r}_f$  y  $\ell_2 = \mathbf{r}_0 2 \mathbf{r}_f$  (fig. 18.5.1b). A lo largo del primero,

$$\Psi^{(1)}(\mathbf{r}_f) = \exp \frac{i}{\hbar} \mathcal{A}^{(1)}, \quad (18.5.2a)$$

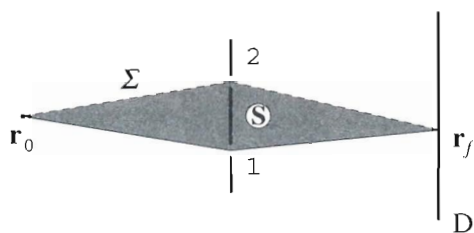
y, a lo largo del segundo,

$$\Psi^{(2)}(\mathbf{r}_f) = \exp \frac{i}{\hbar} \mathcal{A}^{(2)}. \quad (18.5.2a)$$

$\mathcal{A}_\alpha$  es la acción calculada a lo largo del camino  $\ell_\alpha$ .



(a)



(b)

FIGURA 18.5.1. Experimento de tipo Bohm-Aharonov.

(a) Vista lateral; S es el solenoide y D el detector.

(b) Vista desde arriba. La superficie  $\Sigma$  es la sombreada.

El lagrangiano clásico de una partícula en un campo electromagnético se deduce fácilmente de la fórmula general

$$L_{cl} = \mathbf{p}_{cl} \mathbf{v}_{cl} - H_{cl},$$

sustituyendo  $\mathbf{p}_{cl}$  y  $H_{cl}$  por sus expresiones en presencia de un campo electromagnético (sec. 18.1):

$$L_{cl} = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}_{cl}^2 - e\phi_{cl} + \frac{e}{c} \dot{\mathbf{r}}_{cl} \mathbf{A}_{cl}. \quad (18.5.3)$$

Por tanto, la acción a lo largo del camino  $\ell_\alpha$  es

$$\mathcal{A}^{(\alpha)} = \int_{t_0}^{t_f} dt L_{cl} = \int_{\ell_\alpha} d\boldsymbol{\ell} \left\{ \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right\}. \quad (18.5.4)$$

Hemos utilizado que  $\phi_{cl}$  es cero y, en la segunda expresión, hemos cambiado de variable de integración,

$$dt \dot{\mathbf{r}} = d\boldsymbol{\ell}$$

y  $d\boldsymbol{\ell}$  es el elemento de línea a lo largo de la trayectoria clásica. (Hemos suprimido los índices "cl" en  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{r}$ ).

La función de onda en  $\mathbf{r}_f$  es

$$\Psi(\mathbf{r}_f) = \Psi^{(1)}(\mathbf{r}_f) + \Psi^{(2)}(\mathbf{r}_f) \quad (18.5.5)$$

con  $\Psi^{(\alpha)}(\mathbf{r}_f)$  dados por (18.5.2) y  $\mathcal{A}_{cl}^{(\alpha)}$  por (18.5.4). Las interferencias se deben a la diferencia de fases entre  $\Psi^{(1)}$  y  $\Psi^{(2)}$ . Si llamamos  $\delta$  a esta diferencia de fase, evidentemente,

$$\delta = \frac{1}{\hbar} \left( \mathcal{A}^{(1)} - \mathcal{A}^{(2)} \right) = \frac{1}{\hbar} \int_C d\boldsymbol{\ell} \left\{ \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right\}, \quad (18.5.6)$$

donde  $C$  es el circuito  $\ell_1 - \ell_2 = \mathbf{r}_0 1 \mathbf{r}_f 2 \mathbf{r}_0$ ; ver fig. 18.5.1b.

En (18.5.6) hay un primer trozo que es la diferencia de fase que habría en ausencia de corriente en el solenoide ( $\mathcal{A} = 0$ ),

$$\delta_0 = \frac{1}{\hbar} \int_C d\boldsymbol{\ell} \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}; \quad (18.5.7a)$$

al enchufar la corriente, esto se incrementa en la fase de Bohm-Aharonov,

$$\begin{aligned} \delta &= \delta_0 + \delta_{BA}, \\ \delta_{BA} &= \frac{1}{\hbar} \int_C d\boldsymbol{\ell} \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (18.5.7b)$$

La última integral puede calcularse utilizando la conocida fórmula

$$\int_C d\boldsymbol{\ell} \mathbf{f}(\mathbf{r}) = \int_\Sigma ds (\nabla \times \mathbf{f}(\mathbf{r}))$$

donde  $ds$  es la diferencial de superficie, y  $\Sigma$  una superficie encerrada por el contorno  $C$ . En nuestro caso,  $\Sigma$  es el área sombreada en la figura 18.5.1(b), y tenemos,

$$\delta_{BA} = \frac{e}{\hbar c} \int_{\Sigma} ds (\nabla \times \mathbf{A}) = \frac{e}{\hbar c} \int_{\Sigma} ds \mathcal{B}(\mathbf{r}).$$

Ahora bien:  $\mathcal{B}$  sólo es diferente de cero en el interior del solenoide (área  $S$  en la fig. 18.5.1b), donde viene dado por la fórmula (18.5.1a). Por tanto,

$$\delta_{BA} = \frac{e}{\hbar c} \int_S ds \mathcal{B}(\mathbf{r}) = \frac{e\mu n a I}{\hbar c}, \quad (18.5.8)$$

y  $a$  es el área de la sección  $S$  del solenoide.

Aunque lo hemos calculado en la aproximación WKB, el resultado (18.5.8) es, de hecho, *exacto*. En efecto, utilizando el método de integrales de caminos de Feynman (capítulo 10, especialmente sec. 10.3, ec. (10.3.7)) vemos que, para cada par de caminos posibles (y no sólo los clásicos) de  $\mathbf{r}_0$  a  $\mathbf{r}_f$  pasando por  $\alpha = 1, 2$ , y que denotamos por  $\lambda_\alpha$ , la existencia de  $\mathbf{A} \neq 0$  induce una diferencia de fase

$$\delta_{BA}^\lambda = \frac{1}{\hbar} \int_{\lambda_1 - \lambda_2} d\mathbf{l} \frac{e}{c} \mathbf{A} = \frac{e}{\hbar c} \int_{\Gamma} ds (\nabla \times \mathbf{A}) = \frac{e}{\hbar c} \int_S ds \mathcal{B},$$

donde  $\Gamma$  es la superficie bordeada por el camino  $\lambda_1 - \lambda_2$ . El resultado es independiente de los caminos seguidos, luego el valor hallado en (18.5.8) es exacto.

El efecto Bohm-Aharonov, aunque muy pequeño, ha sido observado experimentalmente<sup>4</sup> y, por supuesto, las medidas están de acuerdo con la predicción teórica (18.5.8).

## PROBLEMAS

P.18.1. Un oscilador cargado con carga  $e$ , en el estado fundamental, se sumerge en un campo eléctrico constante,  $\mathcal{E}$ . Hallar la probabilidad de que se excite al estado  $n$ .

*Solución.* El potencial correspondiente es  $e\mathcal{E}x$ , suponiendo el campo dirigido a lo largo del eje  $OX$ . Las variables  $y, z$  no juegan ningún papel y las omitimos. Entonces,

$$W(0 \rightarrow n) = |\langle \psi_n^\mathcal{E} | \psi_0 \rangle|^2,$$

donde  $\psi_0$  es la función de onda del estado fundamental sin perturbar, y  $\psi_n^\mathcal{E}$  la del estado perturbado, esto es, con un potencial

$$\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + e\mathcal{E}x.$$

Este lo resolvimos en el problema P.7.1, con  $\nu_0 = e\mathcal{E}$ . El resultado es

$$W(0 \rightarrow n) = \frac{\xi_0^{2n}}{n!2^n} e^{-\xi_0^2/2}, \quad \xi_0 = \frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}.$$

<sup>4</sup> Lo que se observa es un desplazamiento de la figura de interferencia, debido a la fase  $\delta_{BA}$ , al enchufar la corriente.

El estado más probable al que se excite es el  $n_0$  para el que  $W(0 \rightarrow n_0)$  es máximo:

$$n_0 = (e\mathcal{E})^2 / 2m\hbar\omega.$$

P.18.2. Utilizar las propiedades de las matrices de Pauli para demostrar que  $\hat{\mathbf{P}}^2 = (\underline{\sigma}\hat{\mathbf{P}})(\underline{\sigma}\hat{\mathbf{P}})$ .

Si escribimos el hamiltoniano (libre) en la forma  $\hat{H} = (1/2m)(\underline{\sigma}\hat{\mathbf{P}})^2$ , la sustitución mínima nos da, para partículas de carga  $Qe$ ,

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\underline{\sigma}\hat{\mathbf{P}})(\underline{\sigma}\hat{\mathbf{P}}) \rightarrow \hat{H}_{c.m.} = \frac{1}{2m} \left( \underline{\sigma}\hat{\mathbf{P}} - \frac{Qe}{c} \underline{\sigma}\mathbf{A} \right) \left( \underline{\sigma}\hat{\mathbf{P}} - \frac{Qe}{c} \underline{\sigma}\mathbf{A} \right).$$

Mostrar que, para *electrones*, esto nos proporciona el término de interacción de espín correcto

$$\hat{H}_{e.m.} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{P}} - \frac{Qe}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{2\mu_e}{\hbar} \mathbf{B}\underline{\sigma}, \quad \mu_e = -e\hbar/2mc$$

(*hamiltoniano de Pauli*).

*Solución.* Utilizando que  $\underline{\sigma}_i \underline{\sigma}_j = \delta_{ij} + i \sum_k \epsilon_{ijk} \underline{\sigma}_k$ ,

$$\begin{aligned} \left( \underline{\sigma}\hat{\mathbf{P}} - \frac{Qe}{c} \underline{\sigma}\mathbf{A} \right) \left( \underline{\sigma}\hat{\mathbf{P}} - \frac{Qe}{c} \underline{\sigma}\mathbf{A} \right) &= \sum \underline{\sigma}_i \underline{\sigma}_j \left( \hat{P}_i - \frac{Qe}{c} A_i \right) \left( \hat{P}_j - \frac{Qe}{c} A_j \right) \\ &= \left( \hat{\mathbf{P}} - \frac{Qe}{c} \mathbf{A} \right)^2 - i \frac{Qe}{c} \sum (\hat{P}_i A_j + A_i \hat{P}_j) \epsilon_{ijk} \underline{\sigma}_k. \end{aligned}$$

Se tiene

$$\hat{P}_i A_j = -i\hbar(\nabla_i A_j) + A_j \hat{P}_i; \quad \sum \epsilon_{ijk} \nabla_i A_j = \mathbf{B}_k;$$

sustituyendo se sigue el resultado buscado:

$$\hat{H}_{c.m.} = \left( \hat{\mathbf{P}} - \frac{Qe}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{Qe\hbar}{2mc} \mathbf{B}\underline{\sigma}.$$

P.18.3. Aparentemente, el método anterior nos permite *calcular* el parámetro  $\mu$ . Demuéstrese que, sin embargo, a nuestro nivel el parámetro  $\mu$  sigue siendo empírico.

*Solución.* Igual que escribíamos  $\hat{\mathbf{P}}^2 \rightarrow (\underline{\sigma}\hat{\mathbf{P}})(\underline{\sigma}\hat{\mathbf{P}})$  podíamos haber escrito

$$\hat{\mathbf{P}}^2 \rightarrow (1 - \lambda)\hat{\mathbf{P}}^2 + \lambda(\underline{\sigma}\hat{\mathbf{P}})(\underline{\sigma}\hat{\mathbf{P}}),$$

con  $\lambda$  arbitrario, y hacer la sustitución mínima en la expresión de la derecha. Hubiéramos obtenido

$$\hat{H}_{c.m.} = \left( \hat{\mathbf{P}} - \frac{Qe}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{\lambda Qe\hbar}{2mc} \mathbf{B}\underline{\sigma},$$

esto es, el momento magnético que queramos.

P.18.4. Argüir que ¡menos mal!

*Solución.* En efecto: para el protón y el neutrón, el método del problema P.18.2 hubiera predicho  $\mu_p = \mu_N$ ,  $\mu_n = 0$  con  $\mu_N = e\hbar/2m_p c$  el magnetón nuclear, en flagrante contradicción con la experiencia:

$$\mu_p = (2.79)\mu_N, \quad \mu_n = (-1.91)\mu_N.$$



Se cuenta que Pauli, seducido por el argumento del problema P.18.2, recomendó a un físico experimental que no se molestara en medir el momento magnético del neutrón ya que “evidentemente era nulo.” Afortunadamente para él, el experimental no hizo caso a Pauli y midió  $\mu_n$ .

Una predicción de los momentos magnéticos requiere especificar en qué ecuación hay que efectuar la sustitución mínima, una cuestión dinámica cuya solución involucra mecánica cuántica relativista (de hecho, teoría cuántica de campos). Se puede demostrar que la solución correcta es la de P.18.2, pero sólo para partículas elementales, lo que incluye electrones y quarks, pero no el neutrón y el protón, compuestos ambos de quarks.

## CAPÍTULO 19.

# Sistemas continuos. Campos cuánticos

### 19.1. Vibraciones de un medio continuo (caso clásico)

En la sección 7.5 estudiamos las vibraciones de un cristal. Para investigar las de un medio continuo vamos a considerarlo como el límite de un objeto discreto. Esto es, reemplazamos el medio continuo por un retículo (que, por simplicidad consideramos cúbico) de separación media  $u$ ; el caso continuo se obtendrá haciendo tender  $u \rightarrow 0$ . Reducimos pues el estudio de medios continuos a un caso límite de retículos discretos.

La manera de tomar el límite continuo no puede ser arbitraria. En efecto, si la masa de cada uno de los puntos del retículo es  $m$ , el número de puntos en un volumen fijo  $V$  sería  $V/u^3$ , y la masa en dicho volumen  $m_V = Vm/u^3$ . En el límite  $u \rightarrow 0$  esto se hace infinito, lo que no es físicamente aceptable. Para obtener un límite correcto tenemos que mantener finita la *densidad*, y, por tanto, admitir que  $m$  varía con  $u$  de forma que  $m = \rho u^3$ , con la cantidad  $\rho$  —la densidad— manteniéndose constante. De igual manera tenemos que suponer que la intensidad de la interacción entre próximos vecinos,  $\lambda$  (cf. ec. (7.5.1)) es de la forma  $\lambda = \sigma u$  con  $\sigma =$  constante. (Estas fórmulas valen en tres dimensiones; en una dimensión tenemos  $m = \rho u$  y  $\lambda = \sigma/u$ ).

Todavía en el caso discreto, y trabajando en una dimensión para simplificar, reescribimos el hamiltoniano (7.5.2) como

$$H_{cl}^u = \sum_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{1}{2} \rho u \omega^2 q(x_n, t)^2 + \frac{1}{2} \rho u \dot{q}(x_n, t)^2 + \frac{1}{2} \frac{\sigma}{u} \left[ q(x_n + u, t) - q(x_n, t) \right]^2 \right\} + C, \quad (19.1.1)$$

y ya hemos sustituido  $m = \rho u$  y  $\lambda = \sigma/u$ . También hemos cambiado ligeramente la notación  $q_n(t) \rightarrow q(x_n, t)$ ,  $x_n = nu$ , además de reemplazar  $p_{cl}$  por  $m\dot{q}$ .

El límite  $u \rightarrow 0$  de (19.1.1) es inmediato;  $u \sum_u$  se convierte en  $\int dx$  y

$$q(x_n + u, t) - q(x_n, t) \rightarrow u \partial q(x, t) / \partial x \equiv u q'(x, t).$$

Por tanto,

$$H_{cl} = \lim_{u \rightarrow 0} H_{cl}^u = \int d^3r \left\{ \frac{1}{2} \rho \dot{q}(x, t)^2 + \frac{1}{2} \sigma q'(x, t) + \frac{1}{2} \rho \omega^2 q(x, t)^2 \right\} + C. \quad (19.1.2)$$

Este hamiltoniano será reconocido por los *cognoscenti* como el de una varilla (de longitud infinita) vibrando longitudinalmente. La varilla es *elástica* si  $\omega = 0$ .

En tres dimensiones,

$$H_{cl} = \int d^3r \left\{ \frac{\rho}{2} \dot{\mathbf{q}}(\mathbf{r}, t)^2 + \frac{\sigma}{2} \sum_{ij} \left[ \frac{\partial}{\partial r_i} q_j(\mathbf{r}, t) \right]^2 + \frac{\rho\omega^2}{2} \mathbf{q}(\mathbf{r}, t)^2 \right\} + C. \quad (19.1.3)$$

En (19.1.2, 3) suponemos el medio continuo llenando toda la recta real, o el espacio; el caso de longitud, o volumen, finitos, se obtienen ajustando los límites de integración a la región apropiada.

Las ecuaciones del movimiento se obtienen de nuevo tomando el límite  $u \rightarrow 0$  del caso discreto; obtenemos, en una dimensión,

$$\rho \ddot{q}(x, t) - \sigma q''(x, t) + \rho\omega^2 q(x, t) = 0. \quad (19.1.4)$$

Definimos la variable

$$\alpha(k, t) \equiv \beta_0(k) \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ikx} \left\{ q(x, t) + i \frac{\dot{q}(x, t)}{\Omega_0(k)} \right\} \quad (19.1.5a)$$

con

$$\Omega_0^2(k) = \omega^2 + \frac{\sigma}{\rho} k^2; \quad (19.1.5b)$$

esto es el límite de (7.5.1) para  $u \rightarrow 0$ . En términos de  $\alpha$  la energía es

$$H_{cl} = \int_{-\infty}^{+\infty} dk \hbar \Omega(k) \alpha^*(k, t) \alpha(k, t) + C, \quad (19.1.6)$$

fórmula válida con tal de escoger apropiadamente el valor de  $\beta_0$ :

$$\beta_0(k) = \sqrt{\rho \Omega_0(k) / 4\pi \hbar}.$$

Finalmente, la inversa de (19.1.5) es

$$q(x, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{4\pi\rho}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{\sqrt{\Omega_0(k)}} \left\{ e^{ikx} \alpha(k, t) + e^{-ikx} \alpha^*(k, t) \right\}. \quad (19.1.7)$$

Pasamos ahora al caso tridimensional. Las ecuaciones del movimiento son

$$\ddot{q}_j(\mathbf{r}, t) - \frac{\sigma}{\rho} \Delta q_j(\mathbf{r}, t) + \omega^2(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (19.1.8)$$

Definimos las variables  $\alpha_j$  por

$$\alpha_j(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{\rho \Omega(k)}{2\hbar}} \int d^3r e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left\{ q_j(\mathbf{r}, t) + i \frac{\dot{q}_j(\mathbf{r}, t)}{\Omega(k)} \right\}, \quad (19.1.9a)$$

$$\Omega^2(k) = \omega^2 + \frac{\sigma}{\rho} \mathbf{k}^2 \quad (19.1.9b)$$

y hemos suprimido el índice 0 en  $\Omega$ . En términos de las  $\alpha_j$ ,

$$\dot{\alpha}_j(\mathbf{k}, t) = -i\Omega(k)\alpha_j(\mathbf{k}, t) \quad (19.1.10a)$$

con solución

$$\alpha_j(\mathbf{k}, t) = e^{-i\Omega(k)t} \alpha_j^{(0)}(\mathbf{k}). \quad (19.1.10b)$$

La expresión de  $H_{cl}$  es ahora

$$H_{cl} = \int d^3k \hbar \Omega(k) \sum_j \alpha_j^{(0)}(\mathbf{k})^* \alpha_j^{(0)}(\mathbf{k}) + C. \quad (19.1.11)$$

La demostración de todas estas relaciones no presenta gran dificultad; a título de ejemplo, presentamos el cálculo detallado de (19.1.11). En primer lugar, y como se comprueba fácilmente, la inversa de (19.1.9) es

$$q_j(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho}} \times \int \frac{d^3k}{\sqrt{\Omega(k)}} \left\{ e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \Omega(k)t)} \alpha_j^{(0)}(\mathbf{k}) + e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \Omega(k)t)} \alpha_j^{(0)}(\mathbf{k})^* \right\}. \quad (19.1.12)$$

De aquí se obtienen inmediatamente  $\dot{q}_j$  y  $\nabla q_j$ . Sustituyéndolas en (19.1.3),

$$H_{cl} = \frac{\hbar}{2(2\pi)^3} \int d^3r \int \frac{d^3k d^3k'}{\sqrt{\Omega(k)\Omega(k')}} \sum_j \left\{ \begin{aligned} & \left[ \frac{-\rho}{2} \Omega(k)\Omega(k') \left[ e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\mathbf{r} - i(\Omega(k)+\Omega(k'))t} \alpha_j^{(0)}(\mathbf{k})\alpha_j^{(0)}(\mathbf{k}') + \text{c.c.} \right] \right. \\ & - \frac{\sigma\mathbf{k}\mathbf{k}'}{2} \left[ e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\mathbf{r} - i(\Omega(k)+\Omega(k'))t} \alpha_j^{(0)}(\mathbf{k})\alpha_j^{(0)}(\mathbf{k}') + \text{c.c.} \right] \\ & + \frac{\rho\omega^2}{2} \left[ e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\mathbf{r} - i(\Omega(k)+\Omega(k'))t} \alpha_j^{(0)}(\mathbf{k})\alpha_j^{(0)}(\mathbf{k}') + \text{c.c.} \right] \\ & + \frac{\rho}{2} \Omega(k)\Omega(k') \left[ e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r} - i(\Omega(k)-\Omega(k'))t} \alpha_j^{(0)}(\mathbf{k})\alpha_j^{(0)}(\mathbf{k}')^* + \text{c.c.} \right] \\ & + \frac{\sigma\mathbf{k}\mathbf{k}'}{2} \left[ e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r} - i(\Omega(k)-\Omega(k'))t} \alpha_j^{(0)}(\mathbf{k})\alpha_j^{(0)}(\mathbf{k}')^* + \text{c.c.} \right] \\ & \left. + \frac{\rho\omega^2}{2} \left[ e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r} - i(\Omega(k)-\Omega(k'))t} \alpha_j^{(0)}(\mathbf{k})\alpha_j^{(0)}(\mathbf{k}')^* + \text{c.c.} \right] \right\}. \end{aligned} \right.$$

“c.c.” quiere decir el complejo conjugado del término que le precede.

Las integrales en  $d^3r$  se pueden hacer inmediatamente; los términos que contienen  $\exp(\pm i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\mathbf{r})$  nos dan  $(2\pi)^3\delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}')$ ; los que tienen  $\exp(\pm i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r})$ ,  $(2\pi)^3\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$ . Gracias a estas deltas, la integral en  $d^3k'$  se realiza sin más que poner  $\mathbf{k}' = \pm\mathbf{k}$ , según el caso. Nos queda pues

$$H_{cl} = \frac{\hbar}{2\rho} \int \frac{d^3k}{\Omega(k)} \sum_j \left\{ e^{-2i\Omega(k)t} \left[ -\frac{\rho\Omega(k)}{2} + \frac{\sigma k^2}{2} + \frac{\rho\omega^2}{2} \right] \alpha_j^{(0)}(\mathbf{k})\alpha_j^{(0)}(\mathbf{k}) \right. \\ \left. + \text{c.c.} + \left[ \frac{\rho\Omega(k)}{2} + \frac{\sigma k^2}{2} + \frac{\rho\omega^2}{2} \right] \alpha_j^{(0)}(\mathbf{k})^* \alpha_j^{(0)}(\mathbf{k}) + \text{c.c.} \right\}.$$

Utilizando el valor de  $\Omega^2(k)$ , (19.1.9b), vemos que el primer paréntesis cuadrado se anula, y el segundo es igual a  $2\rho\Omega^2/2$ . Por tanto,

$$H_{cl} = \frac{\hbar}{2\rho} \int \frac{d^3k}{\Omega(k)} \sum_j \left\{ \rho\Omega^2(k)\alpha_j^{(0)}(\mathbf{k})^* \alpha_j^{(0)}(\mathbf{k}) + \text{c.c.} \right\}.$$

El término “c.c.” es idéntico al que le precede y obtenemos (19.1.11), como anunciábamos.

## 19.2. Vibraciones de un medio continuo (caso cuántico)

Salvo en algunos puntos específicos, el tratamiento del caso cuántico sigue las huellas del clásico. Trabajaremos directamente en tres dimensiones; antes de tomar el límite continuo (ver las ecuaciones (7.5.15 y 16)),

$$\begin{aligned} \hat{H}^u = \sum_{\mathbf{n}} \left\{ \frac{1}{2}m \sum_j \hat{q}_j(\mathbf{r}_{\mathbf{n}})^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 \sum_j \hat{q}_j(\mathbf{r}_{\mathbf{n}})^2 \right. \\ \left. + \frac{\lambda}{2} \sum_{ij} [\hat{q}_j(\mathbf{r}_{\mathbf{n}} + u\mathbf{i}) - \hat{q}_j(\mathbf{r}_{\mathbf{n}})]^2 \right\} + C, \end{aligned}$$

siendo un vector unitario a lo largo del eje  $Oi$ . Tomando  $m = u^3\rho$ ,  $\lambda = \sigma u$ ,

$$\hat{H}^u = u^3 \sum_{\mathbf{n}} \left\{ \frac{\rho}{2} \hat{\mathbf{q}}(\mathbf{r}_{\mathbf{n}})^2 + \frac{\rho\omega^2}{2} \hat{\mathbf{q}}(\mathbf{r}_{\mathbf{n}})^2 + \frac{\sigma}{2} \sum_{ij} \left[ \frac{\hat{q}_j(\mathbf{r}_{\mathbf{n}} + u\mathbf{i}) - \hat{q}_j(\mathbf{r}_{\mathbf{n}})}{u} \right]^2 \right\} + C, \quad (19.2.1a)$$

y, en el límite  $u \rightarrow 0$ ,

$$\hat{H} = \int d^3r \left\{ \frac{\rho}{2} \hat{\mathbf{q}}(\mathbf{r})^2 + \frac{\rho\omega^2}{2} \hat{\mathbf{q}}(\mathbf{r})^2 + \frac{\sigma}{2} \sum_{ij} \left[ \frac{\partial}{\partial r_i} \hat{q}_j(\mathbf{r}) \right]^2 \right\} + C. \quad (19.2.1b)$$

Hallemos ahora las relaciones de conmutación entre  $\hat{q}$  y  $\hat{q}$ . Antes de tomar el límite,

$$\hat{q}_j(\mathbf{r}_{\mathbf{n}}) = \frac{1}{m} \hat{P}_j(\mathbf{n}) = \frac{1}{u^3\rho} \hat{P}_j(\mathbf{n})$$

luego, de las relaciones de conmutación de Heisenberg

$$[\hat{q}_j(\mathbf{r}_{\mathbf{n}}), \hat{P}_l(\mathbf{n}')] = i\hbar\delta_{jl}\delta_{\mathbf{nn}'},$$

se sigue que

$$[\hat{q}_j(\mathbf{r}_{\mathbf{n}}), \hat{q}_l(\mathbf{n}')] = \frac{i\hbar}{\rho} \delta_{jl} \frac{\delta_{\mathbf{nn}'}}{u^3}. \quad (19.2.2a)$$

El límite de la última expresión hay que interpretarlo como una delta de Dirac:

$$\frac{\delta_{\mathbf{nn}'}}{u^3} \xrightarrow{u \rightarrow 0} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Para comprobarlo, basta insertar en una suma y tomar el límite; en efecto,

$$u^3 \sum_{\mathbf{n}'} \frac{\delta_{\mathbf{nn}'}}{u^3} f(\mathbf{n}') = f(\mathbf{n}')$$

y, en el límite  $u \rightarrow 0$ ,  $u^3 \sum_{\mathbf{n}'} \rightarrow \int d^3r'$ . Obtenemos, por tanto,

$$[\hat{q}_j(\mathbf{r}), \hat{q}_l(\mathbf{r}')] = \frac{i\hbar}{\rho} \delta_{jl} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (19.2.2b)$$

Esta última ecuación nos permite interpretar a  $\rho \hat{q}_l$  como la *densidad de momento*.

Análogamente a como hicimos en el caso clásico, podemos definir operadores  $\hat{a}_j$  (y sus adjuntos,  $\hat{a}_j^\dagger$ ),

$$\hat{a}_j(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{\rho \Omega(k)}{2\hbar}} \int d^3r e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left\{ \hat{q}_j(\mathbf{r}) + \frac{i}{\Omega(k)} \dot{\hat{q}}_j(\mathbf{r}) \right\}, \quad (19.2.3a)$$

con  $\Omega^2(k) = \omega^2 + (\sigma/\rho)\mathbf{k}^2$ ; trabajamos ahora en la imagen de Schrödinger y por esto los  $\hat{a}_j$  son independientes del tiempo.

EJERCICIO: Comprobar que  $\hat{a}_j(\mathbf{k}) = -i\Omega(k)\hat{a}_j(\mathbf{k})$  •

La inversa de (19.2.3a) es

$$\hat{q}_j(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho}} \int \frac{d^3k}{\sqrt{\Omega(k)}} \left\{ e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{a}_j(\mathbf{k}) + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{a}_j^\dagger(\mathbf{k}) \right\}. \quad (19.2.3b)$$

De las relaciones de conmutación (19.2.2) se sigue que

$$\begin{aligned} [\hat{a}_j(\mathbf{k}), \hat{a}_l(\mathbf{k}')] &= 0, \\ [\hat{a}_j(\mathbf{k}), \hat{a}_l^\dagger(\mathbf{k}')] &= \delta_{jl} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \end{aligned} \quad (19.2.4)$$

que nos identifican a los  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^\dagger$  como destructores y creadores de excitaciones del medio continuo; ver también las ecuaciones (19.2.6 a 9) más abajo. Nótese que ahora las  $k_j$  varían entre  $-\infty$  y  $+\infty$ , que es en lo que se convierten los límites  $\mp\pi/u$  de la sección 7.5 para  $u \rightarrow 0$ .

La expresión de  $\hat{H}$  en términos de creadores y aniquiladores se puede obtener siguiendo los pasos que nos llevaron, en el caso clásico, a la expresión (19.1.11). Como ahora los  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^\dagger$  no conmutan, tendremos términos de las formas

$$\hat{a}_j(\mathbf{k}) \hat{a}_l^\dagger(\mathbf{k}') \quad \text{y} \quad \hat{a}_l^\dagger(\mathbf{k}) \hat{a}_j(\mathbf{k}').$$

Podemos utilizar las relaciones de conmutación para reducir los primeros a los segundos, mas una constante:

$$\hat{a}_j(\mathbf{k}) \hat{a}_l^\dagger(\mathbf{k}') = \hat{a}_l^\dagger(\mathbf{k}') \hat{a}_j(\mathbf{k}) + \delta_{jl} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (19.2.5)$$

Esto nos dice que, salvo una constante, el resultado es una expresión exactamente como (19.1.11) sustituyendo  $\alpha \rightarrow \hat{a}$ ,  $\alpha^* \rightarrow \hat{a}^\dagger$ . Nos queda pues,

$$\hat{H} = \int d^3k \hbar\omega(k) \sum_j \hat{a}_j^\dagger(\mathbf{k}) \hat{a}_j(\mathbf{k}) + \bar{C}.$$

Es conveniente ajustar la constante arbitraria en la definición del origen de energías de manera que  $\bar{C}$  se anule, de manera que tengamos

$$\hat{H} = \int d^3k \hbar\omega(k) \sum_j \hat{a}_j^\dagger(\mathbf{k}) \hat{a}_j(\mathbf{k}). \quad (19.2.6)$$

A este respecto hay una cuestión que es necesario comentar. En el límite continuo, debido a la aparición de deltas de Dirac, y a tener infinitos osciladores, las constantes  $C$ ,  $\bar{C}$  resultan ser, de hecho, *divergentes*. Esto no plantea problemas de principio, puesto que dicha constante es inobservable; pero indica que la expresión (19.2.1) ha de ser utilizada con cuidado. La expresión (19.2.6), sin embargo, no contiene ya  $C$  ni  $\bar{C}$  y es, por tanto, más segura de utilizar.

Para construir los estados del medio continuo comenzamos por el estado fundamental, que denotamos por  $|0\rangle$ , que verifica

$$\hat{a}_j(\mathbf{k})|0\rangle = 0, \quad \text{para todos } j, \mathbf{k}. \quad (19.2.7)$$

Los estados excitados se construyen aplicando creadores:

$$|\mathbf{k}_1, j_1; \dots; \mathbf{k}_n, j_n\rangle = \hat{a}_{j_1}^\dagger(\mathbf{k}_1) \cdots \hat{a}_{j_n}^\dagger(\mathbf{k}_n)|0\rangle. \quad (19.2.8)$$

Éstos son autoestados de  $\hat{H}$ ,

$$\hat{H}|\mathbf{k}_1, j_1; \dots; \mathbf{k}_n, j_n\rangle = \hbar \{ \Omega(k_1) + \dots + \Omega(k_n) \} |\mathbf{k}_1, j_1; \dots; \mathbf{k}_n, j_n\rangle. \quad (19.2.9)$$

Por cuestiones de normalización, es conveniente suponer que no hay dos  $\mathbf{k}_a$ ,  $\mathbf{k}_b$  iguales; en caso en que los hubiese se toma como un límite del anterior.

EJERCICIO: Discutirlo. Ver qué modificaciones debemos incorporar si admitimos  $\mathbf{k}$ s iguales •

### 19.3. Campos. Campos cuánticos

Las ecuaciones que verifican las excitaciones (clásicas) de un medio continuo son muy similares a las que obedecen las vibraciones del campo electromagnético: compárese (19.1.8) con las ecuaciones de Maxwell para el potencial vector,

$$\frac{1}{c^2} \ddot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) - \Delta \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0.$$

La diferencia es conceptual: en un caso consideramos las vibraciones de un medio material; en el otro, atribuimos existencia propia al campo.

En general, podemos describir un campo (clásico) por una función multi-componente,  $\Phi_\lambda(\mathbf{r}, t)$ ,  $\lambda = 1, \dots, \nu$ . Por ejemplo, en el caso electromagnético, el campo tiene cuatro componentes (una del potencial escalar y tres del vector) de las que, debido a invariancia gauge, sólo dos son independientes. La propagación del campo obedece ecuaciones similares a la (19.1.8). Considerando el último caso, podemos identificar  $q = \rho^{-1/2}\Phi$ , definir las constantes  $\rho/\sigma \equiv 1/c^2$ ,  $\omega^2\rho/\sigma \equiv \mu^2 c^2/\hbar^2$  y escribir la ecuación satisfecha por  $\Phi$  como

$$\frac{1}{c^2} \ddot{\Phi}_\lambda(\mathbf{r}, t) - \Delta \Phi_\lambda(\mathbf{r}, t) + \frac{c^2 \mu^2}{\hbar^2} \Phi_\lambda(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (19.3.1)$$

El parámetro  $\mu$  tiene dimensiones de masa, y lo interpretaremos como la masa asociada al campo;  $c$  las tiene de velocidad y está relacionado con la velocidad de propagación del campo.

El hamiltoniano correspondiente es

$$H_{cl} = c^2 \int d^3r \sum_\lambda \left\{ \frac{1}{2c^2} \dot{\Phi}_\lambda(\mathbf{r}, t)^2 + \frac{1}{2} (\nabla \Phi_\lambda(\mathbf{r}, t))^2 + \frac{c^2 \mu^2}{2\hbar^2} \Phi_\lambda(\mathbf{r}, t)^2 \right\}. \quad (19.3.2)$$

Puesto que, formalmente, las ecuaciones de un campo son como las de las vibraciones de un medio continuo, podemos traducir, sin más, el formalismo de la sec. 19.1. Así tenemos el desarrollo

$$\Phi_\lambda(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar^{1/2}}{(2\pi)^{3/2}} \frac{d^3k}{\sqrt{2\Omega(k)}} \left\{ e^{i(\mathbf{kr} - \Omega(k)t)} \alpha_\lambda^{(0)}(\mathbf{k}) + e^{-i(\mathbf{kr} - \Omega(k)t)} \bar{\alpha}_\lambda^{(0)}(\mathbf{k})^\dagger \right\}; \quad (19.3.3a)$$

si el campo es real (como ocurre con el electromagnético),  $\bar{\alpha}^{(0)} = \alpha^{(0)}$ . La inversa de (19.3.3a) es

$$\alpha_\lambda^{(0)}(\mathbf{k}) = \frac{e^{i\Omega(k)t}}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{\Omega(k)}{2\hbar}} \int d^3r e^{-i\mathbf{kr}} \left\{ \Phi_\lambda(\mathbf{r}, t) + \frac{i}{\Omega(k)} \dot{\Phi}_\lambda(\mathbf{r}, t) \right\}. \quad (19.3.3b)$$

El hamiltoniano, en términos de los  $\alpha^{(0)}$ , es

$$H_{cl} + \sum_\lambda \int d^3k \hbar \Omega(k) \alpha_\lambda^{(0)}(\mathbf{k})^* \alpha_\lambda^{(0)}(\mathbf{k}). \quad (19.3.4)$$



La relación (19.1.5b) entre  $\Omega$ ,  $\omega$ ,  $\sigma$ ,  $\rho$ ,  $\mathbf{k}$  se escribe, con nuestras actuales convenciones, como

$$\hbar\Omega(k) = \sqrt{\mu^2 c^4 + \mathbf{p}^2 c^2}, \quad \mathbf{p} \equiv \hbar\mathbf{k}, \quad (19.3.5)$$

expresión que es similar a la de la energía relativista  $E = \hbar\Omega$  para una partícula de momento  $\mathbf{p}$  y masa  $\mu$ ; sería idéntica si  $c$  fuese la velocidad de la luz. Ésta es la razón por la que interpretamos  $\mu$  como la masa asociada al campo.

Un campo es una cantidad observable;<sup>1</sup> por tanto, en mecánica cuántica tenemos que definir operadores  $\hat{\Phi}_\lambda(\mathbf{r}, t)$  que correspondan a las variables clásicas  $\Phi_\lambda(\mathbf{r}, t)$ . Los valores clásicos de los campos los debemos interpretar como valores medios,

$$\hat{\Phi}_{c|\lambda}(\mathbf{r}, t) = \langle \Psi | \hat{\Phi}_\lambda(\mathbf{r}, t) | \Psi \rangle.$$

Es conveniente trabajar en la imagen de Heisenberg; de esta manera podemos definir los operadores campo,  $\hat{\Phi}_\lambda(\mathbf{r}, t)$ , y tratarlos como a las excitaciones cuánticas de un medio continuo que vimos en la sección precedente. Nos limitamos a enunciar resultados ya que, formalmente, las demostraciones son idénticas a las ya vistas.

Los  $\hat{\Phi}$  satisfacen ecuaciones

$$\frac{1}{c^2} \hat{\Phi}_\lambda(\mathbf{r}, t) - \Delta \hat{\Phi}_\lambda(\mathbf{r}, t) + \frac{c^2 \mu^2}{\hbar^2} \hat{\Phi}_\lambda(\mathbf{r}, t) = 0; \quad (19.3.6)$$

si escribimos  $\hat{\Phi}$  en términos de las  $\hat{a}$ , tenemos

$$\hat{\Phi}_\lambda(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar^{1/2}}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d^3k}{\sqrt{2\Omega(k)}} \left\{ e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \Omega(k)t)} \hat{a}(\mathbf{k}, \lambda) + e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \Omega(k)t)} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \lambda) \right\}; \quad (19.3.7)$$

hemos cambiado ligeramente la notación, y suponemos el campo real para escribir  $\hat{a} = \hat{a}$ . En términos de los  $\hat{a}$ ,

$$\hat{H} = \sum_\lambda \int d^3k \hbar\Omega(k) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \lambda) \hat{a}(\mathbf{k}, \lambda), \quad \hbar\Omega(k) = \sqrt{\mu^2 c^4 + \mathbf{p}^2 c^2}, \quad \mathbf{p} \equiv \hbar\mathbf{k}. \quad (19.3.8)$$

Con las convenciones actuales, las reglas de conmutación son

$$\begin{aligned} [\hat{a}(\mathbf{k}, \lambda), \hat{a}(\mathbf{k}', \mu)] &= 0, \\ [\hat{a}(\mathbf{k}, \lambda), \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \mu)] &= \delta_{\mu\lambda} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \end{aligned} \quad (19.3.9)$$

En el caso de vibraciones de un medio continuo, interpretábamos los estados  $\hat{a}^\dagger \dots \hat{a}^\dagger |0\rangle$  como excitaciones cuánticas, y a  $|0\rangle$  como el estado fundamental. Sin embargo, ahora no hay medio material que vibre. Lo que hacemos es fijarnos en la analogía de las vibraciones con estados de cuasi-partículas (los

<sup>1</sup> A veces lo que son observables son combinaciones  $\Phi_\lambda^* \Phi_{\lambda'}$ .

fonones), como vimos en la sec. 12.4: según esta analogía, interpretamos ahora un estado

$$|\mathbf{k}_1, \lambda_1, \dots, \mathbf{k}_n, \lambda_n\rangle = \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1, \lambda_1) \dots \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_n, \lambda_n)|0\rangle$$

como un estado de  $n$  partículas libres, idénticas, con momentos  $\hbar\mathbf{k}_1, \dots, \hbar\mathbf{k}_n$ ; las  $\lambda$  representan otros números cuánticos distintos del momento, pero compatibles con él (por ejemplo, el espín). Por tanto, un campo cuántico representa *asambleas* de partículas idénticas.

EJERCICIO: Demostrar que el operador momento del campo es el

$$\hat{P}_{\text{campo}} = \sum_{\lambda} d^3k \hbar \mathbf{k} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \lambda) \hat{a}(\mathbf{k}, \lambda) \tag{19.3.10a}$$

comprobando que

$$\begin{aligned} & \hat{P}_{\text{campo}} |\mathbf{k}_1, \lambda_1, \dots, \mathbf{k}_n, \lambda_n\rangle \\ &= \hbar \{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n\} |\mathbf{k}_1, \lambda_1, \dots, \mathbf{k}_n, \lambda_n\rangle \quad \bullet \end{aligned} \tag{19.3.10b}$$

En próximas secciones veremos en algún detalle el caso más importante de campo, a saber, el electromagnético. No seguiremos más por ahora con teoría de campos cuánticos excepto para decir que las relaciones (19.3.9) son válidas para campos asociados a *bosones*. Para el caso de *fermiones*, la estadística de Fermi–Dirac nos obliga a reemplazar en (19.3.7, 8)  $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$  por  $\hat{b}, \hat{b}^\dagger$  que satisfacen relaciones de *anticomutación*:

$$\begin{aligned} \{\hat{b}(\mathbf{k}, \lambda), \hat{b}(\mathbf{k}', \mu)\} &= 0, \\ \{\hat{b}(\mathbf{k}, \lambda), \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}', \mu)\} &= \delta_{\mu\lambda} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \end{aligned} \tag{19.3.11}$$

### PROBLEMAS

P.19.1. Dado un campo, representarlo como un límite de osciladores.

*Solución.* Reemplacemos el continuo  $\{\mathbf{r}\}$  por un retículo  $\{\mathbf{r}_n\}$  como hicimos en la sección 3.6, con

$$\mathbf{r}_n = u\mathbf{n}, \quad n_j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N$$

El límite del continuo se alcanza para  $u \rightarrow 0, uN \rightarrow \infty$ .

Sustituyendo derivadas por diferencias finitas,

$$\frac{\partial \Phi_\lambda(\mathbf{r}, t)}{\partial r_j} \rightarrow \frac{1}{2u} \{\Phi_\lambda(\mathbf{r}_n + u\mathbf{j}, t) - \Phi_\lambda(\mathbf{r}_n - u\mathbf{j}, t)\}$$

donde  $\mathbf{j}$  es un vector unitario a lo largo del eje  $Oj$ , las ecuaciones de campo son formalmente idénticas a las de un sistema de osciladores acoplados.

## Teoría cuántica de la radiación

### 20.1. Cuantización del campo electromagnético

Como ya comentamos en la sección 18.1, los campos eléctrico  $\mathcal{E}$  y magnético,  $\mathcal{B}$  deberán, en un tratamiento cuántico del electromagnetismo, ser reemplazados por operadores,  $\hat{\mathcal{E}}$ ,  $\hat{\mathcal{B}}$ . Al proceso de reemplazar las variables clásicas  $\mathcal{E}$  y  $\mathcal{B}$  por operadores se le conoce como *cuantización del campo electromagnético*.<sup>1</sup> Sin embargo, para llevar esto a cabo no debemos trabajar con  $\mathcal{E}$  y  $\mathcal{B}$  como cantidades básicas. En efecto, ya vimos en la sec. 18.5 que las cantidades básicas en electromagnetismo cuántico no son  $\mathcal{E}$  y  $\mathcal{B}$ , sino el potencial vector  $\mathbf{A}$  (y el escalar,  $\phi$ ). Tenemos, pues, que desarrollar un formalismo de operadores para  $\mathbf{A}$  y  $\phi$ .

El caso general de campos cuánticos lo vimos en la sección 19.3; allí obtuvimos las ecuaciones de evolución para campos cuánticos, (19.3.6). Para el caso electromagnético, y puesto que queremos que en el límite clásico se reproduzcan las ecuaciones clásicas, (19.3.6) se nos convierte en

$$\frac{1}{c^2} \partial_t^2 \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) - \Delta \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (20.1.1)$$

y  $c$  es la velocidad de la luz. Por supuesto, (20.1.1) es un caso particular de (19.3.6) con  $\mu = 0$ : efectivamente, las partículas asociadas con el campo electromagnético (los fotones) no tienen masa. Una ecuación análoga vale para el potencial escalar,  $\hat{\phi}$ :

$$\frac{1}{c^2} \partial_t^2 \hat{\phi}(\mathbf{r}, t) - \Delta \hat{\phi}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (20.1.2)$$

Las cantidades observables no son  $\hat{\mathbf{A}}$ ,  $\hat{\phi}$ , sino  $\hat{\mathcal{E}}$ ,  $\hat{\mathcal{B}}$ ,

$$\hat{\mathcal{E}} = \frac{1}{c} \partial_t \hat{\mathbf{A}} - \nabla \hat{\phi}, \quad \hat{\mathcal{B}} = \nabla \times \hat{\mathbf{A}}.$$

Como sabemos, ni  $\hat{\mathcal{E}}$  ni  $\hat{\mathcal{B}}$  cambian si hacemos un cambio de gauge,

$$\hat{\mathbf{A}} \rightarrow \hat{\mathbf{A}} + \nabla \hat{f}, \quad \hat{\phi} \rightarrow \hat{\phi} - \frac{1}{c} \partial_t \hat{f};$$

podemos fijar el gauge requiriendo condiciones suplementarias. Nosotros vamos a escoger el llamado *gauge de Coulomb* (o *de la radiación*), como ya hicimos con anterioridad. Pedimos pues que se tenga

$$\hat{\phi}(\mathbf{r}, t) \equiv 0, \quad \nabla \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (20.1.3)$$

<sup>1</sup> O *segunda cuantización*. La teoría cuántica de la radiación se debe a Dirac.

Esto nos permite prescindir de  $\hat{\phi}$  y trabajar sólo con  $\hat{\mathbf{A}}$ .

Aunque podríamos tomar los resultados del capítulo precedente para escribir las correspondientes relaciones para el caso electromagnético, es instructivo repetir el desarrollo con los cambios oportunos. Escribimos

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3p \beta(p) \left\{ e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - E(p)t)/\hbar} \hat{\boldsymbol{\alpha}}_1(\mathbf{p}) + e^{-i(\mathbf{p}\mathbf{r} - E(p)t)/\hbar} \hat{\boldsymbol{\alpha}}_2(\mathbf{p}) \right\}. \quad (20.1.4)$$

Puesto que  $\hat{\mathcal{E}}$ ,  $\hat{\mathcal{B}}$  corresponden a observables, deberían ser operadores autoadjuntos; por lo tanto, también lo serán los  $\hat{\mathbf{A}}$ :  $\hat{A}_j^\dagger = \hat{A}_j$ . Esto implica que, en (20.1.4), se tenga la relación  $\hat{\boldsymbol{\alpha}}_2 = \hat{\boldsymbol{\alpha}}_1^\dagger$ . El valor de  $E(p)$  lo obtenemos pidiendo que  $\hat{\mathbf{A}}$ , dado por (20.1.4), satisfaga (20.1.1), lo que implica la familiar relación entre momento y energía para una partícula de masa cero:

$$E(p) = c|\mathbf{p}|. \quad (20.1.5a)$$

A pesar de esta interpretación transparente de  $E$  y  $\mathbf{p}$  es más cómodo trabajar con el vector número de ondas  $\mathbf{k}$ , y la frecuencia<sup>2</sup>  $\omega(k)$ :

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}, \quad E(p) = \hbar\omega(k). \quad (20.1.5b)$$

La condición (20.1.3) aplicada a (20.1.4) nos dice que  $\mathbf{p}\hat{\boldsymbol{\alpha}}_1(\mathbf{p}) = 0$ ; podemos pues desarrollar  $\hat{\boldsymbol{\alpha}}_1(\mathbf{p})$  en la base formada por dos vectores transversales (por ejemplo, los definidos en la sección 14.4) y escribir, por tanto,

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}}_1(\mathbf{p}) = \sum_{\eta=\pm 1} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{k}, \eta) \hat{a}(\mathbf{k}, \eta); \quad \mathbf{k}\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{k}, \eta) = 0.$$

Podemos interpretar  $\eta$  como el número cuántico de helicidad que introdujimos en la sec. 14.4. Según esto, (20.1.4) se nos convierte en

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar^3}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \beta(\hbar k) \sum_{\eta} \left\{ e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega(k)t)} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{k}, \eta) \hat{a}(\mathbf{k}, \eta) + e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega(k)t)} \boldsymbol{\epsilon}^*(\mathbf{k}, \eta) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \eta) \right\}. \quad (20.1.6)$$

Interpretamos ahora los operadores  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^\dagger$  como destructores y creadores de *fotones*, con las relaciones de conmutación

$$\begin{aligned} [\hat{a}(\mathbf{k}, \eta), \hat{a}(\mathbf{k}', \eta)'] &= 0, \\ [\hat{a}(\mathbf{k}, \eta), \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \eta')] &= \delta_{\eta\eta'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \end{aligned} \quad (20.1.7)$$

<sup>2</sup> La cantidad  $\omega(k)$  es la que en el capítulo precedente denotábamos por  $\Omega(k)$ . El cambio de notación se debe a que queremos guardar la notación habitual para las cantidades asociadas con las ondas electromagnéticas

La función  $\beta$  la encontramos considerando la energía del campo electromagnético. La energía clásica de la radiación electromagnética es

$$E_{\text{cl}} = \frac{1}{8\pi} \int d^3r (\mathcal{E}_{\text{cl}}^2 + \mathcal{B}_{\text{cl}}^2) :$$

en términos de  $\hat{\mathbf{A}}$  y en el gauge de Coulomb tenemos, después de una integración por partes,

$$E_{\text{cl}} = \frac{1}{8\pi} \int d^3r \left\{ \frac{1}{c^2} (\partial_t \mathbf{A}_{\text{cl}})^2 - \mathbf{A}_{\text{cl}}(\Delta \mathbf{A}_{\text{cl}}) \right\}. \quad (20.1.8)$$

Utilizamos el principio de correspondencia y postulamos el *hamiltoniano cuántico de la radiación*, en el gauge de Coulomb,<sup>3</sup>

$$\hat{H}_{\text{rad}} = \frac{1}{8\pi} \int d^3r \left\{ \frac{1}{c^2} (\partial_t \hat{\mathbf{A}})^2 - \hat{\mathbf{A}}(\Delta \hat{\mathbf{A}}) \right\} + C. \quad (20.1.9)$$

La constante  $C$  la ajustamos de manera que el estado sin fotones (el vacío) tenga energía cero. Queremos pues tener,

$$\hat{H}_{\text{rad}} = \int d^3k \hbar\omega(k) \sum_{\eta=\pm 1} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \eta) \hat{a}(\mathbf{k}, \eta); \quad (20.1.10)$$

sustituyendo (20.1.6) en (20.1.9) y utilizando (20.1.7) vemos, después de un cálculo similar al último de la sec. 19.1, que esto efectivamente se verifica con tal que

$$\hbar^3 \beta(k) = \sqrt{\frac{4\pi \hbar c}{2k}}.$$

Sustituyendo esto en (20.1.6) tenemos la expresión final para el operador  $\hat{\mathbf{A}}$ , en la imagen de Heisenberg,

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}_{\text{H}}(\mathbf{r}, t) = \frac{\sqrt{\hbar c}}{2\pi} \int \frac{d^3k}{\sqrt{k}} \sum_{\eta=\pm 1} \left\{ e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega(k)t)} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{k}, \eta) \hat{a}(\mathbf{k}, \eta) \right. \\ \left. + e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega(k)t)} \boldsymbol{\epsilon}^*(\mathbf{k}, \eta) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \eta) \right\}, \quad \omega(k) = ck. \end{aligned} \quad (20.1.11)$$

<sup>3</sup> La diferencia entre (20.1.9) y la expresión correspondiente que vimos para  $H_{\text{cl}}$  en términos de  $\Phi_\lambda$ , ec. (19.3.2), es un factor  $1/4\pi$ , debido a que trabajamos en el sistema de unidades de Gauss para el campo electromagnético. Si hubiésemos utilizado el sistema de unidades de Heavyside, tendríamos  $\hat{\mathbf{A}}_{\text{H}} = \hat{\mathbf{A}}/\sqrt{4\pi}$ ,  $e_{\text{H}} = \sqrt{4\pi} e$ , de forma que las combinaciones  $e\phi$ ,  $e\mathbf{A}$  son independientes del sistema; pero la relación entre  $\mathbf{A}$  y  $\tilde{H}$  cambia. En el sistema de unidades de Heavyside, podemos reescribir (20.1.9). Integrando por partes el segundo término allí obtenemos

$$\hat{H}_{\text{rad}} = \int d^3r \left\{ \frac{1}{2c^2} \hat{\mathbf{A}}_{\text{H}}^2 - \frac{1}{2} \sum_{ij} (\partial_i \hat{A}_{\text{H},j})^2 \right\} + C.$$

expresión idéntica a (19.3.2).

Puesto que sabemos que las imágenes de Schrödinger y Heisenberg coinciden a  $t = 0$ , la expresión de  $\hat{\mathbf{A}}$  en la imagen de Schrödinger será

$$\hat{\mathbf{A}}_S(\mathbf{r}) = \frac{\sqrt{\hbar c}}{2\pi} \int \frac{d^3k}{\sqrt{k}} \sum_{\eta=\pm 1} \left\{ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{k}, \eta) \hat{a}(\mathbf{k}, \eta) + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\epsilon}^*(\mathbf{k}, \eta) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \eta) \right\}. \quad (20.1.12)$$

El estado sin fotones (el vacío) lo denotamos por  $|0\rangle$ ; se caracteriza por

$$\hat{a}(\mathbf{k}, \eta)|0\rangle = 0.$$

Un estado de  $n$  fotones con vectores de ondas  $\mathbf{k}_i$  y helicidades  $\eta_i$  es el

$$|\mathbf{k}_1, \eta_1; \dots; \mathbf{k}_n, \eta_n\rangle = \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1, \eta_1) \dots \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_n, \eta_n)|0\rangle. \quad (20.1.13)$$

El operador momento para la radiación lo podemos definir como

$$\hat{\mathbf{P}}_{\text{rad}} = \frac{1}{8\pi} \int d^3r \left\{ \hat{\boldsymbol{\mathcal{E}}} \times \hat{\boldsymbol{\mathcal{B}}} - \hat{\boldsymbol{\mathcal{B}}} \times \hat{\boldsymbol{\mathcal{E}}} \right\}, \quad (20.1.14)$$

lo que, en términos de creadores y aniquiladores da

$$\hat{\mathbf{P}}_{\text{rad}} = \int d^3k \hbar \mathbf{k} \sum_{\eta} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \eta) \hat{a}(\mathbf{k}, \eta). \quad (20.1.15)$$

EJERCICIO: Comprobar que

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{rad}}|\mathbf{k}_1, \eta_1; \dots; \mathbf{k}_n, \eta_n\rangle &= \left\{ E(k_1) + \dots + E(k_n) \right\} |\mathbf{k}_1, \eta_1; \dots; \mathbf{k}_n, \eta_n\rangle; \\ \hat{\mathbf{P}}_{\text{rad}}|\mathbf{k}_1, \eta_1; \dots; \mathbf{k}_n, \eta_n\rangle &= \left\{ \mathbf{p}_1 + \dots + \mathbf{p}_n \right\} |\mathbf{k}_1, \eta_1; \dots; \mathbf{k}_n, \eta_n\rangle; \quad \mathbf{p}_i = \hbar \mathbf{k}_i \quad \bullet \end{aligned}$$

EJERCICIO: Comprobar que  $\langle 0|\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)|\mathbf{k}, \eta\rangle$  coincide (salvo una constante) con la función de onda del fotón con momento  $\hbar \mathbf{k}$  y helicidad  $\eta$  que denotamos por  $\Psi_{\hbar \mathbf{k}}^{(\eta)}(\mathbf{r}, t)$  en la sección 14.4 •

EJERCICIO: Comprobar la normalización

$$\langle \mathbf{k}', \eta' | \mathbf{k}, \eta \rangle = \delta_{\eta \eta'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad \bullet$$

## 20.2. Límite clásico. Estados coherentes

El potencial vector cuántico  $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)$  es un conjunto de operadores, uno para cada punto del espacio  $\mathbf{r}$ , y dependientes del tiempo,  $t$ . En el límite clásico esperamos que se tenga

$$\langle \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) \rangle_{\Psi} \underset{\hbar \rightarrow 0}{\simeq} \mathbf{A}_{\text{cl}}(\mathbf{r}, t), \quad \langle \hat{H}_{\text{rad}} \rangle_{\Psi} \underset{\hbar \rightarrow 0}{\simeq} H_{\text{cl}}$$

para estados apropiados  $|\Psi\rangle$ . La relación entre cualquier campo cuántico y un sistema de osciladores nos sugiere que las  $|\Psi\rangle$  serán del tipo de los estados coherentes que estudiamos en la sección 8.2.

Antes de comenzar el cálculo tenemos que resolver un problema técnico. A una onda electromagnética clásica, de amplitud  $\alpha_0$ , vector de ondas  $\mathbf{k}$  y polarización  $\eta$  le corresponde un potencial vector (en el gauge de Coulomb, en el que trabajamos)

$$\mathbf{A}_{\text{cl}}^{[\mathbf{k}, \eta]}(\mathbf{r}, t) = 2 \operatorname{Re} \frac{\sqrt{\hbar c}}{2\pi k^{1/2}} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{k}, \eta) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega(k)t)} \alpha_0. \quad (20.2.1)$$

La energía correspondiente a esta onda,

$$E_{\text{cl}} = \frac{1}{8\pi} \int_{R^3} d^3r \left\{ \frac{1}{c^2} (\partial_t \mathbf{A}_{\text{cl}}^{[\mathbf{k}, \eta]})^2 - \mathbf{A}_{\text{cl}}^{[\mathbf{k}, \eta]} \Delta \mathbf{A}_{\text{cl}}^{[\mathbf{k}, \eta]} \right\}, \quad (20.2.2)$$

es *infinita*. Por supuesto, esto se debe a que (20.2.1) es una idealización matemática, ya que ninguna onda real puede estar extendida a todo el espacio.

Podemos resolver el problema restringiendo la integral en (20.2.2) a un volumen grande pero finito,  $V$ , imponiendo además la condición de que

$$\mathbf{A}_{\text{cl}}^{[\mathbf{k}, \eta]} = 0, \quad \text{para } \mathbf{r} \text{ fuera de } V. \quad (20.2.3)$$

Por consistencia, la misma condición ha de ser impuesta para el campo cuántico. Sin embargo, y aunque se puede proceder a partir de aquí, es conveniente utilizar otra condición de contorno distinta de (20.2.3), que no es la más apropiada para representar una onda que avanza en la dirección  $\mathbf{k}$ : es preferible imponer condiciones de contorno periódicas. Tomamos como  $V$  a un cubo de lado  $L$ , reemplazamos  $\hat{\mathbf{A}}$  por  $\hat{\mathbf{A}}_L$  y requerimos pues

$$\hat{\mathbf{A}}_L(\mathbf{r} + L\mathbf{j}, t) = \hat{\mathbf{A}}_L(\mathbf{r}, t), \quad (20.2.4)$$

con  $\mathbf{j}$  un vector unitario a lo largo del eje  $Oj$ . La expresión (20.1.11) debe, en este caso, modificarse a

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}_L(\mathbf{r}, t) = \frac{\rho^3 \sqrt{\hbar c}}{2\pi} \sum_{\mathbf{n}} \frac{1}{k_{\mathbf{n}}^{1/2}} \sum_{\eta} \left\{ e^{i(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}\mathbf{r} - \omega(k_{\mathbf{n}})t)} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}, \eta) \hat{a}(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}, \eta) \right. \\ \left. + e^{-i(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}\mathbf{r} - \omega(k_{\mathbf{n}})t)} \boldsymbol{\epsilon}^*(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}, \eta) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}, \eta) \right\} \end{aligned} \quad (20.2.5a)$$

donde

$$(k_{\mathbf{n}})_j = 2\pi n_j/L, \quad \rho = 2\pi/L; \quad n_j = \text{entero}$$

y el conmutador de creadores y aniquiladores es ahora

$$[\hat{a}(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}, \eta), \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_{\mathbf{n}'}, \eta')] = \rho^{-3} \delta_{\eta\eta'} \delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}'}. \quad (20.2.5b)$$

Claramente, (20.2.5) satisface las condiciones de periodicidad (20.2.4). En el límite  $L \rightarrow \infty$ ,  $\rho$  tiende a cero y

$$\rho^3 \sum_{\mathbf{n}} \rightarrow \int d^2k, \quad \rho^{-3} \delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}'} \rightarrow \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'),$$

(20.2.5b) tiende a (20.1.7) y (20.2.5a) se convierte en (20.1.11).

Construyamos ahora los estados coherentes. El estado  $|\Psi(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}, \eta)\rangle$  va a consistir en una superposición de ensamblas de fotones, todos ellos con número de ondas  $\mathbf{k}_{\mathbf{n}}$  y polarización  $\eta$ . Escribimos,

$$|\Psi(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}, \eta)\rangle = \sum_{N=0}^{\infty} C_N \frac{1}{\sqrt{N!}} \rho^{3N/2} [\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}, \eta)]^N |0\rangle. \quad (20.2.6)$$

Los coeficientes  $C_N$  los determinamos pidiendo que  $|\Psi(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}, \eta)\rangle$  sea un autoestado del operador de aniquilación correspondiente al valor propio  $\alpha_0$ :

$$\hat{a}(\mathbf{k}_{\mathbf{n}'}, \eta') |\Psi(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}, \eta)\rangle = \delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}'} \delta_{\eta\eta'} \alpha_0 |\Psi(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}, \eta)\rangle; \quad (20.2.7)$$

esto implica la relación de recurrencia

$$C_{N+1} = \frac{\rho^{3/2} \alpha_0}{\sqrt{N+1}} C_N,$$

con solución

$$C_N = \frac{\rho^{3N/2} \alpha_0^N}{\sqrt{N!}} C_0;$$

$C_0$  es una constante que puede fijarse (salvo fase) requiriendo, por ejemplo, que

$$\langle \Psi(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}, \eta) | \Psi(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}, \eta) \rangle = 1.$$

Utilizando (20.2.5) encontramos inmediatamente que

$$\langle \Psi(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}, \eta) | \hat{\mathbf{A}}_L(\mathbf{r}, t) | \Psi(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}, \eta) \rangle = \frac{\sqrt{\hbar c}}{2\pi} \frac{\rho^3}{k_{\mathbf{n}}^{1/2}} 2 \operatorname{Re} \left\{ e^{i(\mathbf{k}_{\mathbf{n}} \mathbf{r} - \omega(\mathbf{k}_{\mathbf{n}})t)} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}, \eta) \alpha_0 \right\}, \quad (20.2.8)$$

que es en efecto idéntica a (20.2.1), salvo la constante  $\rho^3$ .

Igualmente puede comprobarse que el valor esperado en estos estados del hamiltoniano de la radiación,

$$\langle \Psi(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}, \eta) | \hat{H}_{\text{rad}} | \Psi(\mathbf{k}_{\mathbf{n}}, \eta) \rangle,$$

es idéntico al dado por (20.2.2).



Una expresión para el estado coherente que es útil para estudiar emisión de radiación es

$$|\Psi(\mathbf{k}_n, \eta)\rangle = \left\{ \exp\left(\rho^3 \alpha_0 \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_n, \eta)\right) \right\} |0\rangle. \quad (20.2.9)$$

Un estudio más detallado de campos electromagnéticos, en especial en el límite clásico y semiclásico, puede verse en Sakurai (1967), Louisell (1973) y en Ynduráin (1996). En este último se estudia, en particular, cómo se emiten los estados coherentes cuando el emisor puede aproximarse por una corriente clásica.

### 20.3. Interacción de radiación con la materia

En esta sección y la siguiente estudiamos las interacciones de partículas materiales con fotones. El tratamiento que hacemos es semi-cuántico y semi-relativista, en los siguientes sentidos. Suponemos que las velocidades de las partículas que interactúan con los fotones son pequeñas en comparación con la de la luz,  $c$ ; pero los fotones, por supuesto, son relativistas. Debido a esta hipótesis de pequeñas velocidades, resulta que las energías cinéticas de las partículas son también pequeñas en comparación con sus energías en reposo,  $mc^2$ . Por tanto, no tenemos posibilidad de crear partículas que no sean fotones. Por supuesto, al tener éstos masa cero, pueden crearse por pequeñas que sean las energías disponibles. Si tuviéramos energía suficiente para crear, por ejemplo, electrones, tendríamos que considerar ensamblas de estas partículas y, por tanto, construir también campos correspondientes al electrón.<sup>4</sup> En nuestra aproximación, sin embargo, podemos considerar al electrón como una partícula no-relativista, individual; pero los fotones los describiremos a través de operadores cuánticos para el campo electromagnético.

Según esto, si consideramos el caso sencillo de una única partícula (que, para fijar ideas, tomamos como un electrón) sujeta a un potencial, y en interacción con la radiación, el estado más general del sistema será una superposición lineal de estados con un electrón con función de onda  $\psi_e$ , y un número arbitrario de fotones con vectores de ondas y helicidad  $\mathbf{k}_1, \eta_1, \dots, \mathbf{k}_n, \eta_n$ . Es decir, el estado más general será una superposición de los estados

$$|\psi_e; \mathbf{k}_1, \eta_1, \dots, \mathbf{k}_n, \eta_n\rangle = \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1, \eta_1) \dots \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_n, \eta_n) |\psi_e\rangle. \quad (20.3.1a)$$

Nótese que el estado  $|\psi_e\rangle$  no contiene ningún fotón; por tanto, debemos suponer que

$$\hat{a}(\mathbf{k}, \eta) |\psi_e\rangle = 0, \quad \text{para todos } \mathbf{k}, \eta. \quad (20.3.1b)$$

El hamiltoniano del sistema podemos obtenerlo de la forma siguiente. Si no hubiera interacción entre la radiación y la materia tendríamos el hamiltoniano

$$\hat{H}_1 = \hat{H}_e + \hat{H}_{rad}, \quad (20.3.2a)$$

<sup>4</sup> Esto puede verse, por ejemplo, en el texto del autor (Ynduráin, 1996) y en las referencias allí citadas.

donde  $\hat{H}_{\text{rad}}$  viene dado por (20.1.10),

$$\hat{H}_{\text{rad}} = \sum_{\eta} \int d^3k \hbar\omega(k) \hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k}, \eta) \hat{a}(\mathbf{k}, \eta) \quad (20.3.2b)$$

y

$$\hat{H}_e = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{P}}_e^2 + V. \quad (20.3.2c)$$

$V$  es un potencial externo al que eventualmente puede estar sujeto el electrón. La interacción entre la radiación y la materia la introducimos utilizando el principio de sustitución mínima, exactamente igual que en (18.1.1), excepto que ahora  $\hat{\mathbf{A}}$  es el operador dado por (20.1.12):

$$\hat{\mathbf{P}}_e \rightarrow \hat{\mathbf{P}}_e - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}}_S(\mathbf{r});$$

trabajamos en la imagen de Schrödinger y, a partir de ahora, suprimimos el índice S en  $\hat{\mathbf{A}}_S$ . Obtenemos así el hamiltoniano en presencia de radiación cuantizada,

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{P}}_e - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}} \right)^2 + V - \frac{2\mu}{\hbar} \mathbf{S} \hat{\mathbf{B}} + \hat{H}_{\text{rad}} + C. \quad (20.3.3)$$

Hemos añadido el término de interacción con el espín  $-(2\mu/\hbar) \mathbf{S} \hat{\mathbf{B}}$  (recordar la ecuación (19.1.6)), y una constante arbitraria  $C$ .

Puesto que trabajamos a pequeñas velocidades, los términos de interacción de la radiación con la materia que contienen  $1/c$  deben ser considerados como una perturbación. Debido a esto, será útil descomponer  $\hat{H}$  como

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}_I \quad (20.3.4a)$$

con

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(0)} &= \hat{H}_e + \hat{H}_{\text{rad}} + C, \\ \hat{H}_I &= \frac{e^2}{2mc^2} \hat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}) - \frac{e}{2mc} \left\{ \hat{\mathbf{P}}_e \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) + \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{P}}_e \right\} - \frac{2\mu}{\hbar} \mathbf{S} \hat{\mathbf{B}}. \end{aligned} \quad (20.3.4b)$$

En próximas secciones aplicaremos esto a casos concretos.

## 20.4. Emisión de radiación por un átomo hidrogenoide

En esta sección vamos a calcular la desintegración de un estado del átomo de hidrógeno a un nivel de energía inferior, emitiendo un fotón. Aunque escribiremos las fórmulas explícitas únicamente para este caso, es sencillo, con unos pocos cambios, extender los resultados a otros sistemas (por ejemplo, estados del oscilador armónico).

Denotamos con  $H_{M'}^l(n)$  al estado del átomo de hidrógeno con número cuántico principal  $n$ , momento angular total  $l$  y tercera componente del mismo  $M$ ; y por  $\gamma(\mathbf{k}, \eta)$  al estado de un fotón con vector de ondas  $\mathbf{k}$  y helicidad  $\eta$ . El proceso puede escribirse de forma simbólica como

$$H_{M'}^l(n) \rightarrow H_{M'}^{l'}(n) + \gamma(\mathbf{k}, \eta). \quad (20.4.1)$$

Dada la precisión de nuestro cálculo, donde despreciamos efectos relativistas ( $O(v^2/c^2) \sim 10^{-4}$ ) podemos aproximar la masa reducida por la del electrón,  $m \simeq m_e$ , lo que sólo produce un error de orden  $m_e/m_p \sim 5 \times 10^{-4}$ . Las funciones de onda del electrón antes ( $\psi_e$ ) y después ( $\psi'_e$ ) de la emisión son

$$\begin{aligned} \psi_e &= R_{nl}(r)Y_M^l(\theta, \phi), \\ \psi'_e &= R_{n'l'}(r)Y_{M'}^{l'}(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (20.4.2)$$

Despreciamos aquí la interacción con el espín, el término  $-(2\mu/\hbar)\underline{\mathbf{S}}\underline{\hat{\mathbf{B}}}$  en (20.3.4b); se puede comprobar que, para los procesos que consideramos, su efecto es pequeño en comparación con el resto (de hecho, de orden relativo  $1/c^2$ ). Trabajamos también al orden más bajo en la carga del electrón, que denotamos por  $e$ ; por tanto,  $\hat{H}^{(0)}$  en (20.3.4a) es el hamiltoniano coulombiano, mas el de la radiación

$$\hat{H}^{(0)} \equiv \hat{H}_e + \hat{H}_{\text{rad}} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{P}}^2 - \frac{e^2}{r} + \hat{H}_{\text{rad}},$$

y (20.3.4b) se nos convierte en el hamiltoniano de interacción efectivo,

$$\hat{H}_{I,\text{ef}} = -\frac{e}{2mc} \left\{ \hat{\mathbf{P}}_e \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) + \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{P}}_e \right\}.$$

El operador  $\hat{\mathbf{P}}_e = -i\hbar\nabla$  al aplicarse a la izquierda de  $\hat{\mathbf{A}}$  nos da

$$\nabla \hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}} \nabla + \text{div } \hat{\mathbf{A}}.$$

En el gauge de Coulomb, en el que estamos trabajando,  $\text{div } \hat{\mathbf{A}} = 0$ , luego  $\hat{\mathbf{P}}_e$  y  $\text{div } \hat{\mathbf{A}}$  conmutan y podemos simplificar  $\hat{H}_{I,\text{ef}}$  a

$$\hat{H}_{I,\text{ef}} = -\frac{e}{mc} \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{P}}_e = -\frac{e}{mc} \hat{\mathbf{P}}_e \hat{\mathbf{A}}. \quad (20.4.3)$$

Según la ec. (11.4.14), la anchura de desintegración para el proceso (20.4.1) es

$$\begin{aligned} \Gamma(i \rightarrow f) &\equiv \Gamma(H_{M'}^l(n) \rightarrow H_{M'}^{l'}(n) + \gamma(\mathbf{k}, \eta)) \\ &= 2\pi |\langle \psi'_e; \mathbf{k}, \eta | \hat{H}_{I,\text{ef}} | \psi_e \rangle|^2 \delta(E_i - E_f), \end{aligned} \quad (20.4.4)$$

con  $E_i$ ,  $E_f$  las energías de los estados inicial y final. Nuestra primera tarea es pues calcular el elemento de matriz

$$\langle f | \hat{H}_{I,ef} | i \rangle = \langle \psi'_e | \mathbf{k}, \eta | \hat{H}_{I,ef} | \psi_e \rangle = \langle \psi'_e | \hat{a}(\mathbf{k}, \eta) \hat{H}_{I,ef} | \psi_e \rangle.$$

Sustituyendo en  $\hat{H}_{I,ef}$  la expresión (20.1.12) para  $\hat{\mathbf{A}}$  tenemos

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{H}_{I,ef} | i \rangle = & -\frac{e}{mc} \frac{\sqrt{\hbar c}}{2\pi} \langle \psi'_e | \sum_{\eta'} \int \frac{d^3 k'}{\sqrt{k'}} \hat{a}(\mathbf{k}, \eta) \left\{ e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{k}', \eta') \hat{a}(\mathbf{k}', \eta') \hat{\mathbf{P}}_e \right. \\ & \left. + e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \boldsymbol{\epsilon}^*(\mathbf{k}', \eta') \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \eta') \hat{\mathbf{P}}_e \right\} | \psi_e \rangle. \end{aligned}$$

El término con  $\hat{a} \hat{\mathbf{P}}_e = \hat{\mathbf{P}}_e \hat{a}$  da cero, al actuar el aniquilador sobre el estado  $|\psi_e\rangle$ , que no tiene fotones. El otro término contiene un producto de la forma

$$\hat{a}(\mathbf{k}, \eta) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \eta') = \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}', \eta') \hat{a}(\mathbf{k}, \eta) + \delta_{\eta\eta'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}').$$

El primer término da cero, por el argumento ya utilizado; sólo el segundo sobrevive y, por tanto, nos queda

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{H}_{I,ef} | i \rangle = & -\frac{e}{mc} \frac{\sqrt{\hbar c}}{2\pi} \sum_{\eta'} \int \frac{d^3 k'}{\sqrt{k'}} \boldsymbol{\epsilon}^*(\mathbf{k}', \eta') \langle \psi'_e | e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \hat{\mathbf{P}}_e | \psi_e \rangle \delta_{\eta\eta'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \\ = & -\frac{e}{mc} \frac{\sqrt{\hbar c}}{2\pi k'^{1/2}} \boldsymbol{\epsilon}^*(\mathbf{k}, \eta) \langle \psi'_e | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{\mathbf{P}}_e | \psi_e \rangle. \end{aligned} \quad (20.4.5)$$

La energía del fotón emitido es  $ch\mathbf{k}$ , y tiene que ser igual a la diferencia de energías entre los estados  $H_{\lambda I}^i(n)$ ,  $H_{\lambda I}^f(n)$ , que es del orden de  $m_e c^2 \alpha^2$ . Por otra parte, el valor medio de  $r$  es del orden del radio de Bohr,  $r \sim a_B = \hbar/m_e c \alpha$ . De esta manera,  $|\mathbf{k}\mathbf{r}| \sim \alpha$ , y al orden que estamos trabajando podemos sustituir en (20.4.5) la exponencial  $\exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r})$  por la unidad.<sup>5</sup> Por tanto,

$$\langle f | \hat{H}_{I,ef} | i \rangle = \frac{-e\sqrt{\hbar c}}{2\pi m_e c k^{1/2}} \boldsymbol{\epsilon}^*(\mathbf{k}, \eta) \langle \psi'_e | \hat{\mathbf{P}}_e | \psi_e \rangle : \quad (20.4.6)$$

hemos reducido el problema al sencillo de evaluar el elemento de matriz del operador momento entre estados del átomo de hidrógeno.

El cálculo de (20.4.6) puede aún simplificarse con un par de trucos. En primer lugar,

$$\hat{\mathbf{P}}_e = m_e \hat{\mathbf{Q}}_e = \frac{im_e}{\hbar} [\hat{H}_e, \hat{\mathbf{Q}}_e],$$

<sup>5</sup> A esta aproximación se la conoce, por razones que serán claras en un momento, como *aproximación dipolar*. Hay procesos en los que este primer término,  $\exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) \sim 1$  da cero, y hay que tener en cuenta órdenes superiores en el desarrollo de la exponencial (conocidos como *multipolos*).

y  $\hat{\mathbf{Q}}_e \leftrightarrow \mathbf{r}$  es el operador posición del electrón. Como  $|\psi_e\rangle$  y  $|\psi'_e\rangle$  son autoestados de  $\hat{H}_e$  con energías  $E_n$ ,  $E_{n'}$  respectivamente, resulta pues

$$\langle \psi'_e | \hat{\mathbf{P}}_e | \psi_e \rangle = \frac{im}{\hbar} \langle \psi'_e | [\hat{H}_e, \hat{\mathbf{Q}}_e] | \psi_e \rangle = \frac{im}{\hbar} (E_{n'} - E_n) \int d^3r \psi'^*_e \mathbf{r} \psi_e.$$

El segundo truco consiste en utilizar la proporcionalidad entre  $\mathbf{r}$ , en coordenadas esféricas,  $r_\lambda$ ,

$$r_\pm = \mp \frac{r_1 \pm r_2}{\sqrt{2}}, \quad r_0 = r_3,$$

y el armónico esférico  $Y_\lambda^1$ : tenemos

$$r_\lambda = r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_\lambda^1(\theta, \phi) \quad (20.4.7)$$

con  $\theta$  y  $\phi$  los ángulos polares de  $\mathbf{r}$ . El producto escalar  $\boldsymbol{\epsilon}^* \mathbf{r} = \sum_i \epsilon_i^* r_i$  lo podemos escribir también en coordenadas esféricas,  $\sum_\lambda \epsilon_\lambda^* r_\lambda$ . Sustituyendo también la expresión para las funciones de onda del electrón tenemos pues

$$\begin{aligned} & \boldsymbol{\epsilon}^* \int d^3r \psi'^*_e \mathbf{r} \psi_e \\ &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \sum_\lambda \epsilon_\lambda^* \int_0^\infty d^3r r^2 R_{n'l'}(r) R_{nl}(r) \int d\Omega Y_{M'}^{l'}(\theta, \phi)^* Y_\lambda^1(\theta, \phi) Y_M^l(\theta, \phi). \end{aligned}$$

Utilizando la fórmula de composición de armónicos esféricos (13.6.12), y las relaciones de ortonormalidad de éstos, (13.5.3),

$$\begin{aligned} & \int d\Omega Y_{M'}^{l'}(\theta, \phi)^* Y_\lambda^1(\theta, \phi) Y_M^l(\theta, \phi) \\ &= \sum_{l''=|l-1|}^{l+1} C(1, \lambda; l, M|l'') \int d\Omega Y_{M'}^{l'}(\theta, \phi)^* Y_{M+\lambda}^{l''}(\theta, \phi) \\ &= \begin{cases} C(1, \lambda; l, M|l'), & \text{si } l' = l \pm 1, \\ 0, & \text{si } l' \neq l \pm 1; \end{cases} \end{aligned}$$

y hemos definido la combinación de coeficientes de Clebsch–Gordan

$$C(1, \lambda; l, M|l') = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sqrt{\frac{2l+1}{2l'+1}} (l, M; 1, \lambda|l') (l, 0; 1, 0|l').$$

Que el elemento de matriz de  $\mathbf{r}$  se anula si  $l = l'$  se puede comprobar por cálculo directo; pero también puede obtenerse de las propiedades de transformación bajo paridad. Si hacemos  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ ,  $Y_M^l \rightarrow (-1)^l Y_M^l$  luego la integral  $\int d\Omega Y_{M'}^{l'} Y_M^l Y_\lambda^1$  se anula idénticamente.<sup>6</sup> Podemos decir que el fotón se lleva

<sup>6</sup> Esto no quiere decir que no existan transiciones entre estados con el mismo momento angular total; pero, necesariamente, deberán emitirse un número par de fotones.

una unidad de momento angular, y un  $(-1)$  de paridad. Finalmente, y recordando que  $E_{n'} - E_n = E_\gamma = \hbar ck$  tenemos el resultado

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{H}_{I,ef} | i \rangle &= \frac{-ie\sqrt{E_\gamma}}{2\pi} \sqrt{\frac{2l+1}{2l'+1}} (1, 0; l, 0 | l') \\ &\times \sum_\lambda \epsilon_\lambda^*(\mathbf{k}, \eta) (1, \lambda; l, M | l') \int_0^\infty dr r^3 R_{n'l'}(r) R_{nl}(r), \end{aligned} \quad (20.4.8)$$

para  $l' = l \pm 1$ , y cero si  $l' = l$ .

El elemento de matriz que hemos obtenido es el mismo que hubiéramos encontrado substituyendo el operador cuántico  $\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{P}}_e$  por la cantidad clásica

$$-\frac{1}{c} (\partial_t \mathbf{A}) \mathbf{r} = \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{r}$$

esto es, por un dipolo  $\boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{r}$ . Éste es el motivo del nombre de “transiciones dipolares” dado a las que estamos considerando.

## 20.5. Desintegración del primer nivel excitado del átomo de hidrógeno

La ecuación (20.4.8) nos proporciona el elemento de matriz para una transición en la que se emita un fotón; si interpretamos las  $R$  como funciones de onda radiales en general, esta ecuación vale no sólo para el átomo de hidrógeno, sino para muchos otros sistemas. Aquí, sin embargo, nos vamos a restringir a realizar un cálculo detallado únicamente para el átomo de hidrógeno y, en éste, específicamente entre los niveles más bajos: con notación espectroscópica, entre los estados  $2P$  y  $1S$  (el estado  $2S$  también se desintegra en el  $1S$ , pero emitiendo dos fotones, lo que complica el cálculo). En este caso, más sencillo que utilizar (20.4.8) es proceder directamente de (20.4.6):

$$\langle f | \hat{H}_{I,ef} | i \rangle = \frac{-e\sqrt{\hbar c}}{2\pi mck^{1/2}} \boldsymbol{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, \eta) \int d^3r R_{10}(r) Y_0^{0*} (-i\hbar\nabla) Y_M^1(\Omega) R_{21}(r). \quad (20.5.1)$$

Recordamos las expresiones explícitas de las  $R$ ,

$$R_{10} = \frac{2}{3/2} e^{-r/a_B}, \quad R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6} a_B^{5/2}} r e^{-r/2a_B}.$$

Podemos reemplazar  $Y_0^0$  por su valor,  $1/\sqrt{4\pi}$  y hacer actuar  $\nabla$  en (20.5.1) a la izquierda; teniendo en cuenta que

$$-\nabla R_{10} = \frac{\mathbf{r}}{ra_B} R_{10}$$

nos queda

$$\langle f | \hat{H}_{I,ef} | i \rangle = \frac{-i\hbar e\sqrt{\hbar c}}{2\pi mck^{1/2} a_B} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sum_i \epsilon_i^*(\mathbf{k}, \eta) \int d^3r r_i r^{-1} R_{10}(r) Y_M^1(\Omega) R_{21}(r).$$

Reemplazando  $r_i$  en componentes esféricas por  $Y_\lambda^1$ ,

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{H}_{I,ef} | i \rangle &= \frac{-i\hbar e\sqrt{\hbar c}}{2\pi m c k^{1/2} a_B} \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_\lambda \epsilon_\lambda^*(\mathbf{k}, \eta) \\ &\times \int_0^\infty dr r^2 R_{10}(r) R_{21}(r) \int d\Omega Y_\lambda^1(\Omega) Y_M^1(\Omega) \\ &= \frac{-i\hbar e\sqrt{\hbar c}}{2\pi m c k^{1/2} a_B} \frac{1}{\sqrt{3}} \epsilon_M^*(\mathbf{k}, \eta) \int_0^\infty dr r^2 R_{10}(r) R_{21}(r). \end{aligned} \quad (20.5.2)$$

Vamos a calcular la anchura total, esto es, salvo un factor, la probabilidad de que el átomo se desintegre emitiendo un fotón con cualquier valor de  $\mathbf{k}$ ,  $\eta$ . Tendremos por tanto que sumar sobre estados finales:<sup>7</sup>

$$\Gamma_{\text{tot}}(2P) = \sum_\eta \int d^3k \Gamma(i \rightarrow f). \quad (20.5.3)$$

En general no se conoce el valor inicial de la tercera componente del momento angular,  $M$ . Esto no plantea un problema ya que  $\Gamma_{\text{tot}}$  es invariante bajo rotaciones y, por tanto, independiente de  $M$ . Podemos pues, simplemente, sumar a los tres valores posibles de  $M$ , 0,  $\pm 1$  y dividir por tres.

Al sustituir (20.5.2) en (20.4.4), y esto en (20.5.3), encontramos las siguientes expresiones: la suma

$$\frac{1}{3} \sum_M \left( \sum \eta \epsilon_M^*(\mathbf{k}, \eta) \epsilon_M(\mathbf{k}, \eta) \right) = \frac{2}{3};$$

la integral

$$\int \frac{d^3k}{k} \delta(E_f - E_i) = \int d\Omega_{\mathbf{k}} \int_0^\infty dk k \delta\left(\frac{-3me^4}{8\hbar^2} + c\hbar k\right) = \frac{3\pi me^4}{2c^2\hbar^4}$$

(el término  $-3me^4/8\hbar^2$  es la diferencia  $E_1 - E_2$ ). Finalmente, la integral

$$\int_0^\infty dr r^2 R_{10}(r) R_{21}(r) = \frac{2^{9/2}}{37^{7/2}} a_B.$$

Poniéndolo todo junto, y expresando el resultado en términos de  $\alpha$ , encontramos

$$\Gamma_{\text{tot}}(2P) = \left(\frac{2}{3}\right)^8 \alpha^5 mc^2. \quad (20.5.4a)$$

<sup>7</sup> La forma de la suma sobre estados finales depende de la normalización que hayamos escogido para los mismos: la suma a todo los estados finales debe dar la unidad. En nuestro caso, como hemos normalizado los estados del fotón a  $\langle \mathbf{k}', \eta' | \mathbf{k}, \eta \rangle = \delta_{\eta\eta'} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$  tenemos

$$\sum_\eta \int d^3k |\mathbf{k}, \eta\rangle \langle \mathbf{k}, \eta| = 1.$$

La vida media del estado  $2P$  es, pues,

$$\tau(2P) = \hbar/\Gamma_{\text{tot}}(2P) = \left(\frac{3}{2}\right)^8 \frac{\hbar}{\alpha^5 m c^2} = (1.596) \times 10^{-9} \text{ segundos}, \quad (20.5.4b)$$

en perfecto acuerdo con el valor experimental,

$$\tau^{\text{exper.}}(2P) = (1.60 \pm 0.01) \times 10^{-9} \text{ segundos.}$$

### PROBLEMAS

P.20.1. Encontrar la expresión de los  $\hat{a}(\mathbf{k}, \eta)$  en función de  $\hat{\mathbf{A}}$ .

*Solución.*

$$\hat{a}(\mathbf{k}, \eta) = \frac{-i}{2(2\pi)^2 c \sqrt{E(k)}} \boldsymbol{\epsilon}^*(\mathbf{k}, \eta) \int d^3k e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r} + i\omega(k)t} \overleftrightarrow{\partial}_t \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)$$

y la notación  $\overleftrightarrow{\partial}_t$  se define por

$$f(t) \overleftrightarrow{\partial}_t g(t) = (\partial f/\partial t)g - f(\partial g/\partial t).$$

P.20.2. Demostrar que  $\hat{H}_{\text{rad}}$  es invariante gauge (salvo, quizás, una constante).

*Solución.* Reexpresar  $\hat{H}_{\text{rad}}$  como

$$\hat{H}_{\text{rad}} = \frac{1}{8\pi} \int d^3r \left( \hat{\mathcal{E}}^2 + \hat{\mathcal{B}}^2 \right) + \text{Const.}$$

P.20.3. Demostrar que

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{P}}\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)\hat{\mathcal{P}}^{-1} &= -\hat{\mathbf{A}}(-\mathbf{r}, t) \\ \hat{\mathcal{T}}\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)\hat{\mathcal{T}}^{-1} &= -\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, -t) \\ \hat{\mathcal{P}}\hat{\phi}(\mathbf{r}, t)\hat{\mathcal{P}}^{-1} &= \hat{\phi}(-\mathbf{r}, t) \\ \hat{\mathcal{T}}\hat{\phi}(\mathbf{r}, t)\hat{\mathcal{T}}^{-1} &= \hat{\phi}(\mathbf{r}, -t). \end{aligned}$$

*Solución.* Consideremos, por ejemplo, la primera ecuación. Puesto que

$$\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathbf{P}}\hat{\mathcal{P}}^{-1} = -\hat{\mathbf{P}}, \quad \hat{\mathcal{P}}\hat{\mathbf{S}}\hat{\mathcal{P}}^{-1} = \hat{\mathbf{S}},$$

si denotamos por  $|\mathbf{p}, s_3\rangle$  al estado de un fotón con momento  $\mathbf{p}$  y tercera componente de espín  $s_3$  tendremos

$$\hat{\mathcal{P}}|\mathbf{p}, s_3\rangle = \eta_P |-\mathbf{p}, s_3\rangle;$$

$\eta_P$  lo determinaremos luego. De  $\hat{a}^\dagger(\mathbf{p}, s_3)|0\rangle = |\mathbf{p}, s_3\rangle$  y puesto que, evidentemente, al vacío no le afecta la operación de paridad ( $\hat{\mathcal{P}}|0\rangle = |0\rangle$ ) se sigue que

$$\hat{\mathcal{P}}\hat{a}^\dagger(\mathbf{p}, s_3)\hat{\mathcal{P}}^{-1} = \eta_P \hat{a}^\dagger(-\mathbf{p}, s_3),$$



y lo análogo para el aniquilador  $\hat{a}$ . Utilizando ahora (20.1.11) esto implica que  $\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)\hat{\mathcal{P}}^{-1} = \eta_P\hat{\mathbf{A}}(-\mathbf{r}, t)$ . El valor de  $\eta_P$  se obtiene pidiendo que la sustitución mínima,

$$\hat{\mathbf{P}} \rightarrow \hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}}$$

sea compatible con la paridad, lo que ocurre si  $\eta_P = -1$ .

P.20.4. Demostrar las reglas de conmutación del campo electromagnético

$$[\hat{\mathcal{E}}_i(\mathbf{r}_1, t_1), \hat{\mathcal{E}}_j(\mathbf{r}_2, t_2)] = 4\pi i\hbar c \left\{ \frac{\delta_{ij}}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t_1 \partial t_2} - \frac{\partial^2}{\partial r_{1i} \partial r_{2j}} \right\} D(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|, t_1 - t_2),$$

$$D(r, t) = \frac{1}{4\pi r} \left\{ \delta(r + ct) - \delta(r - ct) \right\}.$$

Estas relaciones indican que, en general, no se pueden conocer con exactitud simultáneamente los valores del campo electromagnético en distintos puntos y distintos tiempos. Una discusión detallada y otras relaciones de conmutación pueden encontrarse en Gottfried (1966) o Ynduráin (1996).

P.20.5. Demostrar que  $\hat{\mathbf{P}}_{\text{rad}}$  dado por (20.1.15) puede escribirse en términos de  $\hat{\mathcal{E}}$ ,  $\hat{\mathcal{B}}$ , igual que en electromagnetismo clásico, por la fórmula

$$\hat{\mathbf{P}}_{\text{rad}} = \frac{1}{8\pi} \int d^3r \left\{ \hat{\mathcal{E}} \times \hat{\mathcal{B}} - \hat{\mathcal{B}} \times \hat{\mathcal{E}} \right\}.$$



CAPÍTULO 21.

## Dispersión de partículas en mecánica cuántica

### 21.1. Evolución libre de un paquete de ondas: desperdigamiento

En la sección 6.2 vimos que un paquete de ondas gaussiano en una dimensión tendía, al evolucionar libremente, a desperdigarse de forma que, después de un tiempo  $t$ , la incertidumbre en la posición de la partícula,  $(\Delta Q)_t$ , crece sin límite (ecuación (6.2.10)):

$$(\Delta Q)_t^2 = (\Delta Q)_{t=0}^2 + \frac{\hbar t^2}{(\Delta Q)_{t=0}^2}. \quad (21.1.1)$$

Vamos a ver esto de forma más general. Sea  $\Psi(\mathbf{p}, t)$  la función de onda de una partícula libre, que supondremos normalizada a la unidad,  $\|\Psi\| = 1$ . Tenemos

$$\Psi(\mathbf{p}, t) = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \Psi(\mathbf{p}, 0) = e^{-i\mathbf{p}^2 t/2m\hbar} \Psi(\mathbf{p}, 0).$$

Por tanto,

$$\begin{aligned} \hat{Q}_j \Psi(\mathbf{p}, t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p_j} \Psi(\mathbf{p}, t) = e^{-i\mathbf{p}^2 t/2m\hbar} \hat{Q}_j \Psi(\mathbf{p}, 0) + \frac{tp_j}{m} e^{-i\mathbf{p}^2 t/2m\hbar} \Psi(\mathbf{p}, 0) \\ &= e^{-i\mathbf{p}^2 t/2m\hbar} \left( \hat{Q}_j + \frac{t}{\hbar} \hat{P}_j \right) \Psi(\mathbf{p}, 0). \end{aligned}$$

Escojamos ahora el origen de coordenadas y el sistema de referencia de forma que, a  $t = 0$ ,

$$\langle \mathbf{Q} \rangle_0 \equiv \langle \mathbf{Q} \rangle_{\Psi(\mathbf{p}, 0)} = \langle \mathbf{P} \rangle_0 \equiv \langle \mathbf{P} \rangle_{\Psi(\mathbf{p}, 0)} = 0.$$

Comenzamos el cálculo suponiendo que  $\Psi(\mathbf{p}, 0)$  es real. Entonces  $\hat{P}_j \Psi(\mathbf{p}, 0)$  es real y  $\hat{Q}_j \Psi(\mathbf{p}, 0) = i\hbar \partial \Psi(\mathbf{p}, 0) / \partial p_j$  es imaginario puro y, por tanto,

$$\begin{aligned} (\Delta Q)_t^2 &= \int d^3p (\hat{Q}_j \Psi(\mathbf{p}, t))^* \hat{Q}_j \Psi(\mathbf{p}, t) \\ &= \int d^3p \left\{ \left| \hbar \frac{\partial}{\partial p_j} \Psi(\mathbf{p}, 0) \right|^2 + \frac{t^2}{m^2} |p_j \Psi(\mathbf{p}, 0)|^2 \right\} \\ &= (\Delta Q)_0^2 + \frac{t^2}{m^2} (\Delta P)_0^2. \end{aligned}$$

Utilizando la relación de incertidumbre de Heisenberg podemos escribir también

$$(\Delta Q)_t^2 = (\Delta Q)_0^2 + \frac{t^2}{m^2} (\Delta P)_0^2 \gtrsim (\Delta Q)_0^2 + \frac{t^2 \hbar^2}{4m^2} \frac{1}{(\Delta Q)_0^2}, \quad (21.1.2)$$

que generaliza a (21.1.1). Vemos que la dispersión  $\Delta Q$  crece con el tiempo; el paquete de ondas se *desperdiga* (o *desparrama*; ambas expresiones suelen usarse). Cuanto más estrecho sea el paquete al principio, más rápidamente se ensanchará.

En el caso más general de que  $\Psi(\mathbf{p}, 0)$  sea complejo, la primera relación de (21.1.2) se convierte en

$$(\Delta Q)_t^2 = (\Delta Q)_0^2 + \frac{t^2}{m^2} (\Delta P)_0^2 + \frac{2\hbar t}{m} \operatorname{Re}\langle \Psi | \hat{Q}_j \hat{P}_j | \Psi \rangle; \quad (21.1.3)$$

no podemos afirmar nada para  $t$  arbitrario. Sin embargo, a grandes valores de  $t$ , el término cuadrático en  $t$  en el miembro de la derecha de (21.1.3) domina, luego podemos afirmar que habrá desperdigamiento a grandes valores de  $t$ :

$$(\Delta Q)_t^2 \underset{t \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{t^2}{m^2} (\Delta P)_0^2. \quad (21.1.4)$$

¿Cómo puede entenderse intuitivamente este fenómeno? La manera más sencilla es recordar la analogía con un fluido de la sec. 4.6, e imaginar al paquete de ondas como un fluido extendido inicialmente en una región del orden de  $(\Delta Q)_0$  y cuyas partículas tienen velocidades diversas, desde cero hasta  $(\Delta v)_0$  con

$$(\Delta v)_0^2 = \frac{1}{m^2} (\Delta P)_0^2.$$

Al cabo del tiempo  $t$ , las partículas con velocidad inicial  $(\Delta v)_0$  se habrán separado de las que tenían velocidad cero en una distancia  $t(\Delta v)_0 = (t/m)(\Delta P)_0$ , y el fluido se habrá desparramado en una extensión dada, precisamente, por  $(\Delta Q)_t \sim (t/m)(\Delta P)_0$ , en acuerdo con (21.1.4).

Los efectos del desperdigamiento no son en absoluto despreciables. Si, por ejemplo, a  $t = 0$  la anchura del paquete es del orden del tamaño de un átomo, y la masa de la partícula del orden de las atómicas ( $10^{-23}$  gr.), en un cuarto de hora la incertidumbre en posición es de unos tres kilómetros. Esto es, tal vez, menos sorprendente de lo que parece; en el caso que hemos considerado,  $(\Delta v)_0 \sim 10^4$  cm/seg.

Tampoco el efecto del desperdigamiento se limita a partículas libres. Para estados ligados, la función de onda es  $\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi_E(\mathbf{r})$ , así que éstos permanecen localizados al pasar el tiempo; pero, para estados de dispersión, en los que a gran  $t$  las partículas se separan mucho unas de otras y, por tanto, el potencial entre ellas puede despreciarse, (21.1.4) sigue valiendo.

## 21.2. Experimentos de colisión

Idealmente, para estudiar experimentos de *colisión*<sup>1</sup> de partículas uno querría tener un choque entre dos partículas (*proyectil* y *blanco*), y medir después del choque la probabilidad de que el proyectil fuese desviado en una dirección determinada (figura 21.2.1; despreciamos de momento el retroceso del blanco). En la práctica, por supuesto, la situación es muy diferente; dada la pequeñez de las partículas, tenemos que lanzar muchos proyectiles y utilizar muchos blancos (fig. 21.2.2) para tener una probabilidad razonable de choques. En esta sección vamos a discutir las condiciones necesarias para poder aproximar los experimentos reales por las colisiones idealizadas.

El dispositivo experimental es del tipo del mostrado en la figura 21.2.2. Lanzamos una andanada de  $N_P$  partículas (proyectiles) contra un blanco, típicamente una lámina como en la figura 21.2.2, en el que hay  $N_B$  puntos dispersores. Denotamos por  $d_B$  la distancia media entre las partículas del blanco; si queremos que los proyectiles las vean individualizadas una primera condición es que la longitud de onda de de Broglie de los proyectiles,  $\lambda_P$ , sea mucho menor que  $d_B$  para que no haya fenómenos de interferencia. Por tanto, tenemos que tener

$$p_{in} \gg \hbar/d_B, \quad (21.2.1a)$$

donde  $p_{in} = \hbar/\lambda_P$  es el momento medio de los proyectiles incidentes. Además, para tener buena definición en momentos (y poder suponer, por tanto, que los proyectiles tienen momento bien definido) pedimos

$$(\Delta p_{in})^2 \ll |p_{in}|. \quad (21.2.1b)$$

Para poder idealizar el proceso como un conjunto de colisiones independientes es también necesario que la probabilidad de colisiones múltiples sea pequeña.

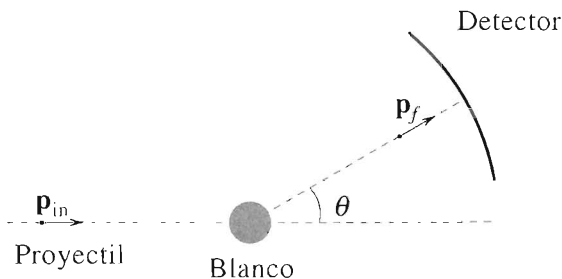


FIGURA 21.2.1. Colisión con un blanco infinitamente pesado (o un centro de dispersión)

<sup>1</sup> Los términos *dispersión*, *colisión* y *difusión* se utilizarán prácticamente como sinónimos.

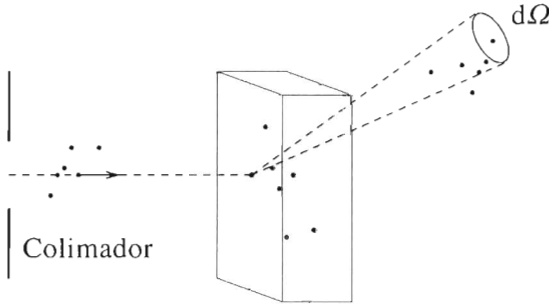


FIGURA 21.2.2. Experimento típico de dispersión.

Consideremos el conjunto de los  $N_P$  proyectiles. El área que cada partícula del blanco presenta, su *sección eficaz*, la denotamos por  $\sigma$ .  $j_{in}$  es la corriente de probabilidad de cada partícula incidente, y  $dN_f$  el número de partículas dispersadas por unidad de tiempo en una superficie  $R^2 d\Omega$  alejada del blanco (a distancia  $R$ , y subtendida por el ángulo sólido  $d\Omega$ ; ver fig. 21.2.2). Entonces tenemos

$$dN_f = N_P N_B j_{in} \frac{d\sigma}{d\Omega}; \quad \sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}. \quad (21.2.2)$$

Debido a la buena definición en momentos, podemos aproximar la función de onda de los proyectiles por una onda plana, con lo que  $j_{in} = p_{in}/m$ , con  $m$  la masa de los proyectiles. La superficie que presenta el blanco, para una partícula ya dispersada una vez, es la sección eficaz multiplicada por el número de partículas del blanco en un volumen  $\sim (4\pi\delta^3/3)$ , donde hemos denotado por  $\delta$  al semiespesor del blanco. Si  $\rho_B$  es la densidad de partículas esto se puede escribir como  $(4\pi\delta^3\rho_B/3)\sigma$ . Para poder despreciar las colisiones múltiples, este área ha de ser mucho menor que la superficie por la que los proyectiles pueden “escapar,”  $\sim 4\pi\delta^2$ . Por tanto, hay que tener

$$\delta\rho_B \ll 1. \quad (21.2.3)$$

Típicamente, para un blanco sólido,  $\rho_B \sim N_A(\text{cm})^{-3}$ , con  $N_A$  el número de Avogadro. Para colisiones, por ejemplo, con núcleos,  $\sigma \sim 10^{-24} \text{ cm}^2$ . (21.2.3) se satisfará, en este caso, si  $\delta \ll 1$  centímetro, lo que explica la razón por la que se trabaja con láminas delgadas.

Finalmente, pedimos que las interacciones entre los proyectiles puedan considerarse despreciables: la nube de proyectiles ha de ser pues muy rarificada de forma que, si  $d_P$  es la distancia media entre proyectiles y  $r_0$  el alcance medio de las interacciones entre ellos, se tenga  $r_0 \ll d_P$ . Esta condición es fácil de satisfacer.

Si las condiciones anteriores se cumplen, podemos aproximar la situación real (muchos proyectiles y muchos blancos, fig. 21.2.2) por la idealizada de un solo proyectil, y un solo centro dispersor, fig. 21.2.1.

Todavía podemos ir más allá. No basta con tener un proyectil y un blanco; queremos que la situación real se aproxime bien a la idealización de dispersión de una partícula con momento bien definido y queremos, además, poder distinguir entre las partículas que han sido dispersadas y las que llegan al detector sin interaccionar. Para ello tenemos que cumplir, además de los ya citados, los siguientes requisitos.

I) Para empezar, necesitamos poco desperdigamiento; de lo contrario, en particular, no podemos saber si la partícula detectada colisionó o, simplemente, se desparramó. Suponemos que la distancia de la fuente de proyectiles al blanco,  $R$ , es similar a la distancia de éste al detector. Basta por tanto pedir poco desperdigamiento al llegar al blanco. El tiempo transcurrido desde que colimamos los proyectiles y su llegada al blanco es  $t \sim R/v_{in} = Rm/p_{in}$ . Si  $l$  es la anchura del colimador (fig. 21.2.2),  $(\Delta Q)_0 \sim l$ . Para que  $(\Delta Q)_t \sim (\Delta Q)_0$  debemos tener, pues,

$$p_{in} \gtrsim \frac{R\hbar}{2ml^2}, \quad (21.2.4)$$

y hemos utilizado (21.1.4).

II) El paquete de onda incidente no es, por supuesto, una onda plana; pero diferirá tanto menos de ella cuanto más ancho sea el colimador cuyos bordes la distorsionan. Para que esta distorsión sea despreciable frente al tamaño del blanco es necesario que  $l \gg \sigma$ , lo que en la práctica siempre se cumple ya que  $l$  es macroscópico.

III) La incertidumbre en posición es  $(\Delta Q) \sim l$ ; por tanto, en momento,  $\Delta P \sim \hbar/l$ . Dado que  $l$  es macroscópico, la condición (21.2.1b), que se convierte en  $\hbar/l \ll p_{in}$  se satisface sin problemas. Finalmente,

IV) Para distinguir las partículas dispersadas de las que llegan sin dispersión hace falta que que no se solapen. Las partículas no dispersadas llegarán al detector en una región de anchura  $(\Delta Q)_t$  alrededor del eje que, debido a la condición de poco desperdigamiento, es del orden de  $l$ . La distancia del eje a la que llega una partícula dispersada en el ángulo  $\theta$  es  $R|\sin \theta|$ . Debemos por tanto requerir

$$l \ll R|\sin \theta|. \quad (21.2.5)$$

Esta ecuación nos limita los ángulos  $\theta$  a los que podemos hacer medidas. Si, por ejemplo,  $R =$  un metro y  $v_{in} = 10^8$  centímetros por segundo, (21.2.4) nos implica que, para electrones,  $l \gtrsim 7 \times 10^{-4}$  cm. Escogiendo  $l =$  una décima de milímetro, (21.2.5) se cumplirá al 1% si  $|\theta| > 10^{-2}$  radianes. La región  $\theta \simeq 0$  es siempre inaccesible, experimentalmente, a medidas directas.

### 21.3 Colisiones de dos partículas: sistemas de referencia lab y c.m.

En la sección anterior hemos ignorado el retroceso del blanco pero, por supuesto, hay que tenerlo en cuenta. La cinemática es análoga en el caso clásico y en el cuántico y, por tanto, utilizaremos una imagen clásica para discutirla.

Antes del choque tenemos dos partículas, proyectil (que denotaremos por la letra  $A$ ) y blanco, denotado por  $B$ . Sus momentos y masas respectivas son  $\mathbf{p}_A$ ,  $m_A$  y  $\mathbf{p}_B$ ,  $m_B$ . A veces la naturaleza de las partículas no cambia en la colisión; decimos entonces que el choque es *elástico*. Si la naturaleza de las partículas cambia, o se crean partículas nuevas en el estado final, decimos que el choque es *inelástico*. Salvo mención expresa de lo contrario, sólo trataremos aquí choques elásticos y, por tanto, suponemos que, en el estado final, tenemos de nuevo las partículas  $A$  y  $B$  con momentos  $\mathbf{p}'_A$  y  $\mathbf{p}'_B$ .

En la mayor parte de experimentos de colisión el blanco  $B$  está, antes de la colisión, en reposo en el sistema de referencia del laboratorio (sistema "lab", que denotaremos con el índice  $l$ ; ver fig. 21.3.1a). Podemos, sin embargo, trabajar en el sistema de referencia en el que el centro de masas de  $A$  y  $B$  está en reposo (sistema c.m.; fig. 21.3.1b). De hecho, los cálculos teóricos los realizaremos sistemáticamente en el sistema de referencia c.m. El ángulo entre los vectores  $\mathbf{p}_A$  y  $\mathbf{p}'_A$  (llamado *ángulo de dispersión*) suele denotarse por  $\theta_l$ , en el lab, y  $\theta_{c.m.}$  o, simplemente,  $\theta$ , en el c.m.

Las relaciones entre los momentos antes y después de la colisión vienen dadas por conservación de momento y energía. Mucho antes de la colisión, y mucho después, las partículas pueden considerarse como libres. Entonces, en cualquier sistema de referencia,

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_A + \mathbf{p}_B &= \mathbf{p}'_A + \mathbf{p}'_B; \\ \frac{1}{2m_A} \mathbf{p}_A^2 + \frac{1}{2m_B} \mathbf{p}_B^2 &= \frac{1}{2m_A} \mathbf{p}'_A{}^2 + \frac{1}{2m_B} \mathbf{p}'_B{}^2. \end{aligned} \quad (21.3.1)$$

En términos de los momentos el coseno del ángulo de dispersión viene dado por

$$\cos \frac{\mathbf{p}_A \mathbf{p}'_A}{p_A p'_A}. \quad (21.3.2)$$

En el sistema lab, la velocidad del centro de masas es  $\mathbf{V}$  con

$$\mathbf{V} = \frac{m_A}{m_A + m_B} \mathbf{v}_{A,l}; \quad (21.3.3)$$

la relación entre los momentos en ambos sistemas de referencia es, por tanto,

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_{A,c.m.} &= \mathbf{p}_{A,l} - m_A \mathbf{V}, & \mathbf{p}_{B,c.m.} &= \mathbf{p}_{B,l} + m_B \mathbf{V} = m_B \mathbf{V}; \\ \mathbf{p}'_{A,c.m.} &= \mathbf{p}'_{A,l} - m_A \mathbf{V}, & \mathbf{p}'_{B,c.m.} &= \mathbf{p}'_{B,l} + m_B \mathbf{V}. \end{aligned} \quad (21.3.4)$$



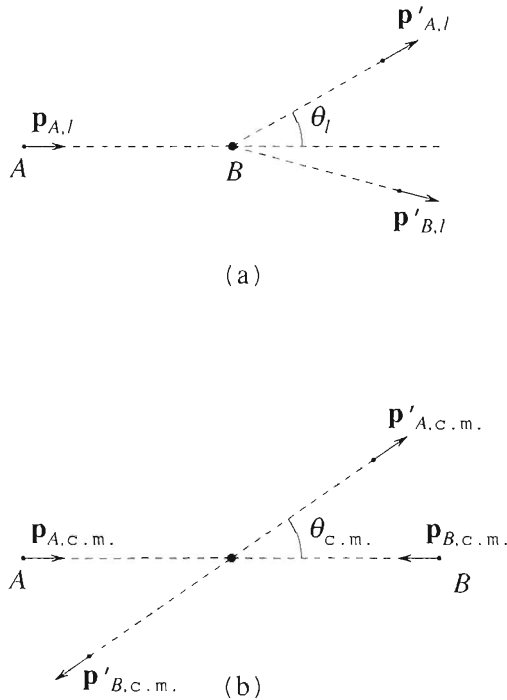


FIGURA 21.3.1. (a) Colisión en el sistema de referencia del lab;  
(b) Colisión en el c.m.

De aquí, y con un poco de trabajo, se obtiene la relación entre los ángulos de dispersión

$$\tan \theta_l = \frac{\text{sen } \theta_{c.m.}}{\cos \theta_{c.m.} + m_A/m_B}. \quad (21.3.5)$$

Una relación útil que se obtiene de ésta es

$$\frac{d \cos \theta_l}{d \cos \theta_{c.m.}} = \frac{1 + (m_A/m_B) \cos \theta_{c.m.}}{[1 + 2(m_A/m_B) \cos \theta_{c.m.} + m_A^2/m_B^2]^{3/2}}. \quad (21.3.6)$$

Como sabemos, y como se puede comprobar de estas fórmulas, los sistemas lab y c.m. se confunden en el límite  $m_A \ll m_B$ .

EJERCICIO: Demostrar que, en el c.m. y para colisiones elásticas,

$$|\mathbf{p}_A| = |\mathbf{p}'_A|, \quad |\mathbf{p}_B| = |\mathbf{p}'_B| \quad \bullet \quad (21.3.7)$$

Tal como vimos en la sección 16.1, el problema de dos partículas puede reducirse al movimiento del centro de masa (que lo hace como una partícula libre) y el movimiento relativo, que es como el de una partícula, con masa igual a la masa reducida del sistema, moviéndose en un potencial con origen en el centro de masas. Por tanto, el problema de la colisión de dos partículas puede reducirse al de la dispersión de una única partícula por un centro de dispersión fijo, el cual interacciona con ella a través del potencial relativo. Ésta es la situación que nosotros consideramos en adelante; teniendo en cuenta que, en los experimentos reales, se suelen medir las cantidades observables (secciones eficaces) en el sistema de referencia del lab. Por ello, para comparar experimentos con la teoría es muchas veces necesario convertir estas cantidades al sistema del c.m., que es en el que realizamos el análisis teórico.

#### 21.4. Secciones eficaces. Amplitud de dispersión

Tal y como discutimos en las secciones 21.2, 3, podemos, en circunstancias apropiadas, reducir el problema de colisiones al de dispersión de una partícula con momento inicial bien definido, que denotaremos por  $\mathbf{p}_{\text{in}}$  o, si no hay peligro de confusión, simplemente  $\mathbf{p}$ , por un centro dispersor, del que sale con momento  $\mathbf{p}_f$  (fig. 21.4.1). Anteriormente denotamos por  $d\mathcal{N}_f$  al número de partículas dispersadas por unidad de tiempo a través de la superficie  $r^2 d\Omega$  subtendida por el ángulo sólido  $d\Omega$ ; en el caso de una sola partícula,  $d\mathcal{N}_f$  es la *probabilidad* de que la partícula salga dispersada en la región especificada.

$d\mathcal{N}_f$  será, a gran distancia, proporcional a la corriente incidente,  $j_{\text{in}}$ , y a  $d\Omega$  (como veremos, para  $r$  grande,  $d\mathcal{N}_f$  es independiente de  $r$ ); el factor de proporcionalidad se define como la *sección eficaz diferencial*,  $d\sigma/d\Omega$ :

$$d\mathcal{N}_f = \frac{d\sigma}{d\Omega} j_{\text{in}} d\Omega. \quad (21.4.1a)$$

Pero, por otra parte, y de su misma definición, resulta que  $d\mathcal{N}_f$  coincide con el producto de la corriente de partículas dispersadas,  $j_{\text{disp}}$ , por la superficie  $r^2 d\Omega$ :

$$d\mathcal{N}_f = j_{\text{disp}} r^2 d\Omega. \quad (21.4.1b)$$

Por tanto, tenemos que

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r^2 j_{\text{disp}}}{j_{\text{in}}}. \quad (21.4.1c)$$

La función de onda del proyectil,  $\psi^+(\mathbf{r})$  (la razón de esta notación la veremos en el próximo capítulo) será una superposición de una onda plana (parte no

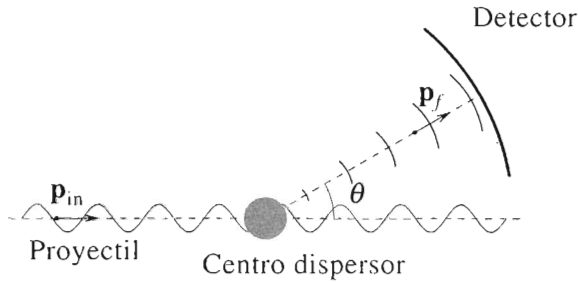


FIGURA 21.4.1. Onda plana y onda esférica dispersada.

dispersada) y una parte dispersada que a grandes distancias, cuando pueda despreciarse la interacción con el centro dispersor, será una onda esférica saliente<sup>2</sup> (fig 21.4.1). Escogemos la constante arbitraria en  $\psi^+(\mathbf{r})$  de manera que la onda plana sea, simplemente,  $\exp i\mathbf{p}_{in}\mathbf{r}/\hbar$  y escribimos pues

$$\psi^+(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} e^{i\mathbf{p}_{in}\mathbf{r}/\hbar} + f \frac{e^{ip_f r/\hbar}}{r}.$$

Para colisiones elásticas, que son las que vamos a considerar aquí, las fórmulas de la sección precedente muestran que  $p_f \equiv |\mathbf{p}_f| = |\mathbf{p}_{in}|$ . Escribiendo también  $\mathbf{p}$  por  $\mathbf{p}_{in}$  tenemos pues

$$\psi^+(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} + f \frac{e^{ipr/\hbar}}{r} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (21.4.2)$$

la segunda expresión en función del vector número de ondas,  $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ . La cantidad  $f$ , que se conoce como *amplitud de dispersión*, *difusión* o *colisión*, y tiene dimensiones de longitud, puede depender de los ángulos de  $\mathbf{p}_f$ ,  $\theta$ ,  $\phi$  y, por supuesto, de la energía de la colisión, pero *no* de  $r$ ; podemos escribir, pues,

$$f = f(\theta, \phi) = f(E; \theta, \phi) = f(k; \theta, \phi);$$

omitiremos la dependencia en la energía,  $E$ , cuando no sea relevante.

La corriente incidente se calcula sólo con el término  $\exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar)$  en (21.4.2):

$$j_{in} = \left| \frac{-i\hbar}{2m} \left\{ e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} \nabla e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} - e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} \nabla e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} \right\} \right| = \frac{p}{m} \quad (21.4.3a)$$

<sup>2</sup> Esta afirmación es intuitivamente evidente; recuérdese el principio de Huygens. Una discusión rigurosa de procesos de dispersión implica utilizar paquetes de onda normalizables, y seguir su evolución en el tiempo. El lector interesado puede encontrar los detalles de este procedimiento en Gottfried (1966) o Goldberger y Watson (1966).

como era de esperar por tratarse de una onda plana. La corriente dispersada se calcula sólo con el término  $f e^{i\rho r/\hbar}/r$  de  $\psi^+$ . El cálculo puede obtenerse fácilmente del problema P.4.1, y se tiene

$$j_{\text{disp}} = \frac{p}{mr^2} |f|^2 + O(r^{-3}) \quad (21.4.3b)$$

A gran  $r$ , insertando (21.4.3) en (21.4.1) nos resulta una sencilla relación entre sección eficaz y amplitud de dispersión:

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{c.m.}} = |f|^2. \quad (21.4.4)$$

Hemos escrito el índice “c.m.” (que, a partir de ahora omitiremos) para recordar que, en el caso realista de colisión de dos partículas, la fórmula (21.4.4) es válida en el sistema de referencia del centro de masas.

## 21.5. Ondas parciales; desfases. Teorema óptico. Aproximación semiclásica

### 21.5.1. Ondas parciales y desfases. Teorema óptico

La ecuación (21.4.2) nos permite encontrar la amplitud de dispersión conocida la función de onda para grandes distancias  $r$  del centro dispersor. Esta función de onda está caracterizada (en particular) por la condición de contorno correspondiente, a orden cero en  $1/r$ , a una partícula libre de momento  $\mathbf{p}$ .

En lugar de esta especificación podíamos haber considerado amplitudes de dispersión correspondientes a estados con valor propio bien definido no de  $\hat{\mathbf{P}}$  y  $\hat{H}$ , sino de  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$  y  $\hat{L}_z$ . A estas amplitudes se les llama *amplitudes de ondas parciales*.

Para comenzar con este desarrollo, consideramos partículas sin espín (o cuyo espín no interacciona con el centro dispersor); entonces, si escogemos el eje  $OZ$  a lo largo de la dirección de  $\mathbf{p}$ , el sistema tiene simetría cilíndrica alrededor de este eje y, por tanto, podemos suponer  $f$  independiente del ángulo  $\phi$ . Desarrollamos entonces  $f$  en polinomios de Legendre,

$$f(k, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) f_l(k); \quad (21.5.1a)$$

$f_l(k)$  son las ondas parciales, y hemos cambiado ligeramente la notación,

$$f \rightarrow f(k, \theta), \quad \mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar.$$

Debido a las propiedades de ortogonalidad de los polinomios de Legendre,

$$\int_{-1}^{+1} dx P_l(x) P_n(x) = 2(2l+1)^{-1} \delta_{nl},$$

podemos invertir (21.5.1a):

$$f_l(k) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} d \cos \theta P_l(\cos \theta) f(k, \theta). \quad (21.5.1b)$$

Consideremos ahora toda la función  $\psi^+$ . Utilizando el desarrollo en polinomios de Legendre de la exponencial, (16.3.7), (21.4.2) nos da

$$\begin{aligned} \psi^+(\mathbf{r}) &\underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \left\{ \frac{i^l}{k} \sin \left( kr - \frac{\pi l}{2} \right) + e^{ikr} f_l(k) \right\} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{i^{l-1}}{2kr} \left\{ [1 + 2ik f_l] e^{ikr - i\pi l/2} - e^{ikr - i\pi l/2} \right\}. \end{aligned} \quad (21.5.2)$$

Ahora bien: en la sección 16.3 resolvimos la ecuación de Schrödinger para valores bien definidos de  $l$  y  $M = 0$  (el último valor, por la simetría axial del problema); ver las ecuaciones (16.3.8, 10). La solución la encontramos en función de los desfases,  $\delta_l(k)$ . Trabajando un poco las citadas ecuaciones tenemos,

$$\begin{aligned} \psi^+(\mathbf{r}) &\underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) i^l e^{i\alpha_l} \sin(kr + \delta_l - \pi l/2) \\ &= \frac{1}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) e^{i(\alpha_l - \delta_l)} i^{l-1} \left\{ e^{2i\delta_l} e^{i(kr - \pi l/2)} - e^{-i(kr - \pi l/2)} \right\}. \end{aligned}$$

Para que esto coincida con (21.5.2) hace falta que

$$1 + 2ik f_l(k) = e^{2i\delta_l(k)} \quad (21.5.3)$$

y, además, que la fase de la función de onda sea igual al desfase:

$$\alpha_l = \delta_l. \quad (21.5.4)$$

La ecuación (21.5.3) nos permite expresar las amplitudes de dispersión en ondas parciales en términos de los desfases; aquí damos tres expresiones equivalentes que son útiles:

$$f_l(k) = \frac{1}{k} \sin \delta_l(k) e^{i\delta_l(k)} = \frac{1}{k(\cot \delta_l(k) - i)} = \frac{e^{2i\delta_l(k)} - 1}{2ik}. \quad (21.5.5)$$

La amplitud de dispersión se obtiene sustituyendo esto en (21.5.1a):

$$f(k, \theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \sin \delta_l(k) e^{i\delta_l(k)}. \quad (21.5.6)$$

Si sustituimos en (21.4.4), integramos a todos los ángulos, y utilizamos las propiedades de ortogonalidad de los polinomios de Legendre, obtenemos la *sección eficaz total (elástica)*,

$$\sigma_{\text{tot}}(k) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} d\cos\theta \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \text{sen}^2 \delta_l(k) \equiv \sum_l \sigma_l. \quad (21.5.7)$$

La cantidad  $\sigma_l = (4\pi/k^2)(2l+1) \text{sen}^2 \delta_l$  es la llamada *sección eficaz en onda l*. De (21.5.6) es inmediato comprobar el llamado *teorema óptico*,

$$\sigma_{\text{tot}}(k) = \frac{4\pi}{k} \text{Im } f(k, \theta = \phi = 0). \quad (21.5.8)$$

Una generalización, que incluye colisiones inelásticas, se verá en la sección 22.4.

### 21.5.2. Desfases en la aproximación WKB

Los desfases  $\delta_l$  pueden determinarse explícitamente en la aproximación semi-clásica, con el método WKB. Al orden más bajo escribimos las funciones de onda radiales  $rR_{kl}(r)$  como una combinación apropiada de las soluciones WKB de (8.3.3),

$$R_{kl}(r) = \frac{e^{i\delta_l}}{2ikr} \left\{ e^{i\sigma_0(r)/\hbar} - e^{-i\sigma_0(r)/\hbar} \right\} = \frac{1}{kr} e^{i\delta_l} \text{sen} \frac{\sigma_0(r)}{\hbar} \quad (21.5.9a)$$

donde

$$\sigma_0(r) = \int_{r_0}^r dr' \sqrt{2m(E - V_l(r'))}; \quad E = \hbar^2 k^2 / 2m \quad (21.5.9b)$$

y  $V_l(r) = V(r) + \hbar^2 l(l+1)/2mr^2$  es el potencial efectivo. Escogemos  $r_0 = \sqrt{l(l+1)}/k$ , el punto a partir del cual el movimiento clásico de una partícula libre es posible; tenemos que, para una partícula libre,  $\sigma_0^{(0)}$  es

$$\frac{\sigma_0^{(0)}}{\hbar} = \int_{r_0}^r dr' \sqrt{k^2 - l(l+1)/r'^2} \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} kr - \frac{\pi l}{2} + \pi \frac{l - \sqrt{l(l+1)}}{2}.$$

Identificando (21.5.9) con (16.3.8) obtenemos entonces el desfase WKB:

$$\delta_l^{\text{WKB}}(k) = \lim_{r \rightarrow \infty} \left( \frac{\sigma_0(r)}{\hbar} - \frac{\sigma_0^{(0)}(r)}{\hbar} - \pi \frac{l - \sqrt{l(l+1)}}{2} \right),$$

esto es,

$$\delta_l^{\text{WKB}}(k) = \int_{r_0}^{\infty} dr \left\{ \sqrt{k^2 - \frac{2V(r)}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}} - \sqrt{k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}} \right\} - \frac{\pi}{2} \left( \sqrt{l(l+1)} - l - \frac{1}{2} \right). \quad (21.5.10)$$

Esta expresión toma una forma particularmente sencilla cuando  $r_0$ ,  $l$  son grandes, que es cuando esperamos que la aproximación semiclásica funcione. Si  $V(r)$  decrece en el infinito más rápidamente que  $1/r$  y es menos singular en el origen que  $1/r^2$ , podemos desarrollar (21.5.10) y obtener

$$\delta_l^{\text{WKB}}(k) \simeq -\frac{m}{\hbar^2} \int_{r_0}^{\infty} dr \frac{rV(r)}{[k^2r^2 - l(l+1)]^{1/2}} \quad (21.5.11)$$

y el error cometido se anula para  $r_0 \rightarrow \infty$ ,  $l \rightarrow \infty$ .

## 21.6. Aproximación de Born. Serie de Born

En pocos casos puede resolverse exactamente la ecuación de Schrödinger y, por lo tanto, raramente se tendrá una expresión exacta para la amplitud de dispersión,  $f$ . Hay, sin embargo, la posibilidad de obtener  $f$  en teoría de perturbaciones en la intensidad de la interacción. En esta sección damos una primera discusión, bastante superficial, del tema; en el capítulo próximo lo veremos con más rigor y detalle.

Para escribir la serie perturbativa (*serie de Born*) comenzamos por reescribir la función de onda de un estado de colisión (21.4.2) como

$$\psi_{\mathbf{k}}^{\dagger}(\mathbf{r}) = \psi_{0\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \chi(\mathbf{k}, \mathbf{k}_f; \mathbf{r}) \quad (21.6.1a)$$

donde, como antes,  $\hbar\mathbf{k} = \mathbf{p}$ ,  $\hbar\mathbf{k}_f = \mathbf{p}_f$  son los vectores número de ondas antes y después de la colisión, y

$$\psi_{0\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \chi(\mathbf{k}, \mathbf{k}_f; \mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} f(k; \theta, \phi) \frac{e^{i\mathbf{k}_f\mathbf{r}}}{r}. \quad (21.6.1b)$$

La función  $\psi_{\mathbf{k}}^{\dagger}$  es solución de la ecuación de Schrödinger

$$\hat{H}\psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} = E\psi_{\mathbf{k}}^{\dagger}; \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}, \quad (21.6.2)$$

$E = \hbar^2k^2/2m$ ,  $\hat{H}_0 = -(\hbar^2/2m)\Delta$  es el hamiltoniano libre y hemos introducido una constante  $\lambda$  en la interacción para hacer el desarrollo en potencias de  $\lambda$ . Sustituyendo (21.6.1) en (21.6.2) y teniendo en cuenta que  $\psi_{0\mathbf{k}}$  es solución de la ecuación de Schrödinger libre<sup>3</sup>

$$\hat{H}_0\psi_{0\mathbf{k}} = E\psi_{0\mathbf{k}}$$

nos queda una ecuación para  $\chi$ :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - E\right)\chi = -\lambda V(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \lambda V(\mathbf{r})\chi. \quad (21.6.3)$$

<sup>3</sup> La energía aquí es la misma que en (21.6.2) debido a que la energía se conserva.

Esta ecuación es exacta. Si  $\lambda$  fuese cero, también  $\chi$  lo sería; luego  $\chi$  es de orden  $\lambda$ . Podemos desarrollar en potencias de  $\lambda$  y escribir

$$\chi = \lambda\chi^{(1)} + \lambda^2\chi^{(2)} + \dots \quad (21.6.4)$$

El primer término,  $\lambda\chi^{(1)} \equiv \chi_B$  es la llamada *aproximación de Born*. Sustituyendo (21.6.4) en (21.6.3) y trabajando a orden  $\lambda$  nos queda la ecuación para  $\chi_B$ ,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - E\right)\chi_B = -\lambda V(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (21.6.5)$$

La condición para que esto sea una buena aproximación es que, en la región en la que el potencial es apreciable,  $|V\chi_B| \ll |V|$ .

Para resolver (21.6.5), comenzamos por tomar el límite  $r \rightarrow \infty$ , de manera que podemos sustituir

$$\chi_B(\mathbf{r}) \rightarrow f_B e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}/r,$$

multiplicamos los dos miembros por  $e^{-i\mathbf{k}_f\mathbf{r}}$  e integramos en  $d^3r$ : obtenemos

$$\int d^3r e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_f)\mathbf{r}} \lambda V(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r e^{-i\mathbf{k}_f\mathbf{r}} (\Delta + \mathbf{k}^2) f_B(k; \theta, \phi) \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r}.$$

La integral de la derecha puede realizarse por métodos similares a los que producen la ecuación, familiar en la teoría de funciones de Green,

$$(\Delta + k^2)e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}/r = -4\pi\delta(\mathbf{r}),$$

pero nosotros daremos simplemente el resultado; en el próximo capítulo presentaremos una deducción alternativa, y más rigurosa, en particular de la aproximación de Born. Tenemos,

$$\int d^3r e^{-i\mathbf{k}_f\mathbf{r}} (\Delta + \mathbf{k}^2) f_B(k; \theta, \phi) \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r} = -2\pi f_B, \quad (21.6.6)$$

con lo que la amplitud de colisión en la aproximación de Born,  $f_B$ , resulta ser

$$f_B(k; \theta_f, \phi_f) = \frac{-m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_f)\mathbf{r}} \lambda V(\mathbf{r}) : \quad (21.6.7)$$

$f_B$  es la transformada de Fourier del potencial (salvo una constante). En (21.6.7)  $\theta_f, \phi_f$  son los ángulos polares de  $\mathbf{k}_f$ .

Esta fórmula (21.6.7) nos sugiere la notación (en general, no sólo en la aproximación de Born)

$$f(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}_f)$$

para la amplitud de dispersión. En efecto, si una partícula ha sido detectada en  $\mathbf{r}$ , a gran distancia del blanco, su momento después de la colisión,  $\hbar\mathbf{k}_f$ , ha de haber sido paralelo a  $\mathbf{r}$ :  $f$  es, salvo constantes, la amplitud de probabilidad de que una partícula con momento inicial  $\hbar\mathbf{k}$  tenga momento  $\hbar\mathbf{k}_f$  después de haber sido dispersada.



Volvamos a la ecuación (21.6.3). Escribiéndola como

$$(\hat{H}_0 - E + \lambda V)\chi = -\lambda V\psi_{0\mathbf{k}},$$

vemos que una solución formal de ella es, obviamente,

$$\chi = -(\hat{H}_0 - E + \lambda V)^{-1}\lambda V\psi_{0\mathbf{k}}.$$

Desarrollando en potencias de  $\lambda$  obtenemos la *serie de Born*,

$$\chi = \frac{1}{E - \hat{H}_0} \sum_{n=0}^{\infty} \left( \lambda V \frac{1}{E - \hat{H}_0} \right)^n \lambda V\psi_{0\mathbf{k}}. \quad (21.6.8)$$

Esta serie es formal; el inverso  $(E - \hat{H}_0)^{-1}$  es singular y no está definido. En la sección 22.1 veremos que hay que definirlo como el límite de  $(E - \hat{H}_0 + i\epsilon)^{-1}$  cuando  $\epsilon > 0$ ,  $\epsilon \rightarrow 0$ .

Cuando  $E \rightarrow \infty$ , cada término en (20.6.8) es de orden  $1/E$  con respecto al anterior. Por tanto,

$$\chi \xrightarrow{E \rightarrow \infty} \frac{1}{E - \hat{H}_0} \lambda V\psi_{0\mathbf{k}}.$$

Esta ecuación es equivalente a (21.6.5) y nos muestra que, a gran energía, la amplitud de dispersión tiende a la aproximación de Born,<sup>4</sup>

$$f(k; \theta, \phi) \xrightarrow{E \rightarrow \infty} f_B(k; \theta, \phi). \quad (21.6.9)$$

## 21.7. Dispersión por un pozo esférico constante.

Longitud de difusión. Resonancias.

Teorema del alcance efectivo

Como un ejemplo importante y sencillo, consideramos la dispersión por un pozo esférico constante:

$$V(r) = \begin{cases} -a, & r < L \\ 0, & r \geq L. \end{cases}$$

Aunque el problema puede resolverse para cualquier onda sin excesiva dificultad utilizando los resultados de la sección 16.4, sólo consideraremos en detalle el caso  $l = 0$  (onda  $S$ ). De (16.2.7) para  $l = 0$  (ver también (6.5.11)) tenemos

$$\cot \delta_0(k) = \frac{k_a + k \tan kL \tan k_a L}{k \tan k_a L - k_a \tan kL}, \quad (21.7.1)$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k_a = \frac{\sqrt{2m(E+a)}}{\hbar}.$$

<sup>4</sup> En mecánica cuántica no relativista; esto no es cierto en teoría relativista debido a la posibilidad de crear partículas, que estamos ignorando.

Escribimos

$$f_0(k) = \frac{1}{k(\cot \delta_0(k) - i)}. \quad (21.7.2)$$

De (21.7.1) obtenemos que, para  $k \rightarrow 0$ ,

$$k \cot \delta_0(k) \xrightarrow{k \rightarrow 0} \frac{1}{\alpha_0}, \quad \alpha_0 \approx \frac{\hbar \tan \frac{L\sqrt{2ma}}{\hbar}}{\sqrt{2ma}} - L. \quad (21.7.3)$$

A  $\alpha_0$  se le llama *longitud de difusión* en onda  $S$  y, de (21.7.2), resulta que

$$f_0(k) \xrightarrow{k \rightarrow 0} \alpha_0. \quad (21.7.4)$$

Un cálculo similar para las demás ondas nos dice que las amplitudes  $f_l(k)$  con  $l > 0$  se anulan para  $k \rightarrow 0$ . Por tanto,

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{k=0} = \alpha_0^2; \quad \sigma_{\text{tot}} \xrightarrow{k \rightarrow 0} 4\pi\alpha_0^2.$$

En la sección 6.9 vimos que el pozo sólo producía estados ligados si

$$L \geq \frac{\pi\hbar}{2\sqrt{2ma}}. \quad (21.7.5)$$

Cuando se tiene igualdad hay un estado ligado justo a  $k = 0$ . De (21.7.3) resulta que la longitud de difusión se hace infinita. Esto es una propiedad general de cualquier potencial; si hay un estado ligado a  $E = 0$ , la longitud de difusión se hace infinita.

Si disminuimos  $L$  por debajo de la cota (21.7.5), esto es, si

$$\frac{L\sqrt{2ma}}{\hbar} < \frac{\pi}{2},$$

no hay estado ligado. Sin embargo, éste se convierte en un estado que se llama *metastable* o *resonancia*, que se encuentra a una energía  $E_R > 0$ . Esta energía  $E_R$  viene dada por la condición

$$\delta_0(k_R) = \pi/2, \quad k_R = \frac{\sqrt{2mE_R}}{\hbar}; \quad (21.7.6a)$$

por tanto,  $\cot \delta_0(k_R) = 0$  y, de (21.7.1),

$$\frac{k_{aR}}{k_R} = -\tan k_R L \tan k_{aR} L, \quad k_{aR} = \frac{\sqrt{2m(E_R + a)}}{\hbar}. \quad (21.7.6b)$$

En la vecindad de  $k_R$ , y desarrollando en la diferencia  $E - E_R$ ,

$$k \cot \delta_0(k) \simeq k \cot \delta_0(k_R) + (E - E_R)k_R \frac{-d\delta_0(k_R)/dE_R}{\text{sen}^2 \delta_0(k_R)} = -k_R \delta'_0(k_R)(E - E_R).$$

En consecuencia,

$$f_0(k) \underset{E \approx E_R}{\simeq} \frac{1}{(E_R - E)k_R \delta'_0(k_R) - ik_R} = \frac{\Gamma/2k_R}{E_R - E - i\Gamma/2} \quad (21.7.7a)$$

y hemos definido

$$\Gamma \equiv \frac{2}{\delta'_0(k_R)}. \quad (21.7.7b)$$

Nótese que, de (21.7.1), resulta que  $\Gamma$  es positiva. La expresión (21.7.7) se conoce como *fórmula de Breit–Wigner* para colisiones resonantes, y  $\Gamma$  es la *anchura de la resonancia*. La sección eficaz (en onda  $S$ ), proporcional a  $|f_0(k)|^2$ , alcanza su máximo en  $k = k_R$  y la anchura del máximo es  $\Gamma$ . Es posible demostrar que esto corresponde a un estado metastable de vida media  $\tau = \hbar/\Gamma$ .

Una demostración rigurosa de estas afirmaciones se sale del marco de este texto; ver por ejemplo el tratado de Goldberger y Watson (1965). Una indicación heurística se encuentra si asignamos la energía compleja  $\bar{E} = E_R - i\Gamma/2$  al estado metastable. La evolución temporal de un estado con esta energía es

$$\psi_{\bar{E}} \sim \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \bar{E}t\right),$$

con lo que

$$|\psi_{\bar{E}}| \sim e^{-\Gamma t/\hbar}$$

como corresponde a un estado que se desintegra.

Aunque las fórmulas (21.7.7) las hemos deducido para un pozo esférico constante, su validez es general para cualquier potencial de corto alcance. Para estos potenciales de corto alcance tenemos una serie de resultados, que enunciaremos sin demostración (para el caso de un pozo cuadrado, ver los problemas P.21.2 y P.21.3).

**TEOREMA 1.** Para todo potencial de alcance finito,

$$f_l(k) \underset{k \rightarrow 0}{\simeq} \alpha_l k^{2l}, \quad (21.7.8)$$

y  $\alpha_l$ , conocida como la *longitud de difusión* en onda  $l$ , es finita salvo que haya un estado ligado en onda  $l$  a  $E = 0$  (algunos textos definen  $\alpha_l$  con el signo opuesto).

**TEOREMA 2. (Teorema del alcance efectivo).** Para todo potencial de alcance finito, y si no hay estado ligado a energía cero, la función  $k^{2l+1} \cot \delta_l(k)$  se puede escribir como

$$k^{2l+1} \cot \delta_l(k) = \frac{1}{\alpha_l} + \sum_{n=1}^{\infty} r_{ln} k^{2n}. \quad (21.7.9)$$

El desarrollo es convergente para  $k$  pequeño.

**TEOREMA 3. (Conexión de estados ligados/resonancias con polos).** Consideradas como función de la variable compleja  $z$ , las amplitudes  $f_l(z)$  tienen polos cuando el potencial tiene estados ligados en los puntos  $z = z_n = \hbar^{-1} \sqrt{2mE_n}$ , con  $E_n$  la energía del estado ligado  $n$ . Si hay una resonancia, el polo está en la segunda hoja de Riemann, en el valor de la energía  $\bar{E} = E_R + i\Gamma/2$ .

EJERCICIO: Comprobar los tres teoremas para un pozo esférico constante •

## 21.8. Dispersión por un potencial coulombiano

El potencial coulombiano es de largo alcance; la condición  $\lim_{r \rightarrow \infty} rV(r) = 0$  no se satisface para él y, por tanto, los desarrollos realizados hasta ahora no sirven para este potencial. Afortunadamente, el problema de dispersión por un potencial coulombiano es de los pocos que pueden resolverse exactamente. Nosotros lo haremos de dos maneras; en primer lugar, considerando un potencial apantallado. Después pasaremos al caso sin apantallar.

### 21.8.1. Dispersión por un potencial coulombiano apantallado

El método del potencial apantallado se basa en que, en muchos casos, la dispersión no se realiza por cargas eléctricas totalmente aisladas; dado, por ejemplo, un protón razonablemente aislado, casi siempre hay, a una cierta distancia, un electrón que compensa su carga. Esto lo simularemos con un modelo crudo reemplazando el potencial de Coulomb,  $V_C(r) = e_1 e_2 / r$ , por el potencial apantallado<sup>5</sup>  $V_L(r)$ ,

$$V_L(r) = \begin{cases} V_C(r) = e_1 e_2 / r, & r \leq L \\ 0, & r > L. \end{cases} \quad (21.8.1)$$

Suponemos que la distancia de apantallamiento,  $L$ , es muy grande en comparación con las dimensiones del problema coulombiano,  $a_0$  y  $1/k$ . Este potencial  $V_L$  es manifiestamente de alcance finito y, por tanto, todo el aparato que hemos desarrollado es válido.

Cuando  $r$  es muy grande, pero  $r < L$ ,  $V_L$  coincide con  $V_C$ ; por tanto, el cálculo de la sec. 17.3 es válido y tenemos, para las funciones radiales,

$$R_{kl}^L(r) \underset{a_0 \ll r < L}{\simeq} e^{i\varphi_l} \frac{\text{sen}(kr + (\sigma/a_0 k) \log 2kr - l\pi/2 + \delta_l)}{kr}. \quad (21.8.2)$$

Hemos definido, como en 17.3,  $\sigma = +1$  si el potencial es atractivo y  $-1$  si es repulsivo,  $a_0 = \hbar/m|e_1 e_2|$ , y  $m$  es la masa reducida.  $\varphi$  es una fase a determinar y, finalmente,  $\delta_l = \arg \Gamma(l + 1 - i\sigma/a_0 k)$ . Para  $r > L$ , según la teoría general, tenemos

$$R_{kl}^L(r) = e^{i\delta_l^L} \frac{\text{sen}(kr - l\pi/2 + \delta_l^L)}{kr}, \quad r > L. \quad (21.8.3a)$$

Empalmándola con (21.8.2) a  $r = L$  nos queda que

$$\delta_l^L = \delta_l + \frac{\sigma}{a_0 k} \log 2kL, \quad \varphi_l = \delta_l^L. \quad (21.8.3b)$$

<sup>5</sup> Este apantallamiento es, efectivamente, muy crudo; algo más realista sería utilizar el potencial  $V_{C,L}(r) = e^{-r/L} e_1 e_2 / r$ . Sin embargo, nosotros trabajaremos de momento con (21.8.1) por su sencillez.

Utilizando ahora (21.5.3) obtenemos las amplitudes en ondas parciales,

$$f_l^L(k) = \frac{1}{2ik} \left( e^{2i\delta_l^L} - 1 \right)$$

y la amplitud de colisión,  $f^L(k; \theta) = \sum (2l+1) P_l(\cos \theta) f_l^L$ , es

$$f^L(k; \theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) e^{2i\delta_l^L} - \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta). \quad (21.8.3c)$$

Vamos a realizar el cálculo para  $\theta \neq 0$ ; el punto  $\theta = 0$  es singular, en el límite de gran  $L$ , como veremos después. Ahora bien: para  $\theta \neq 0$ ,  $\cos \theta \neq 1$  y se tiene (problema P.21.8)

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) = 0, \quad \cos \theta \neq 1.$$

Por tanto, y sustituyendo ya el valor de  $\delta_l^L$ ,

$$f^L(k; \theta) = e^{i\beta} \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) e^{2i\delta_l}, \quad \beta = \frac{2\sigma}{a_0 k} \log 2kL.$$

Hemos encontrado que, salvo la fase *global*  $e^{i\beta}$ ,  $f_L(k; \theta)$  coincide con lo que hubiéramos obtenido sustituyendo ingenuamente  $\delta_l \equiv \arg \Gamma(l+1 - i\sigma/a_0 k)$  en las fórmulas de las secciones anteriores. Definimos según esto la amplitud Coulombiana,  $f_C(k; \theta)$ , como  $f^L$ , pero sin la fase  $e^{i\beta}$ . Tenemos pues

$$f_C(k; \theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{\Gamma(l+1 - i\sigma/a_0 k)}{\Gamma(l+1 + i\sigma/a_0 k)}, \quad (21.8.4)$$

y hemos escrito

$$e^{2i\delta_l} = \frac{\Gamma(l+1 - i\sigma/a_0 k)}{\Gamma(l+1 + i\sigma/a_0 k)}.$$

la suma en (21.8.4) puede realizarse explícitamente (ver el problema P.21.7). El resultado es,

$$\begin{aligned} f_C(k; \theta) &= \frac{\sigma}{2k^2 a_0} \left( \frac{1 - \cos \theta}{2} \right)^{i\sigma/a_0 k - 1} \frac{\Gamma(1 - i\sigma/a_0 k)}{\Gamma(1 + i\sigma/a_0 k)} \\ &= \frac{\sigma}{2k^2 a_0 \sin^2 \frac{\theta}{2}} e^{2i\delta_0} \exp \left( \frac{2i\sigma}{a_0 k} \log \sin \frac{\theta}{2} \right), \end{aligned} \quad (21.8.5)$$

resultado que es singular para  $\theta = 0$ , como anunciábamos.

La sección eficaz que se sigue de (21.8.5),

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4a_0^2 k^4 \sin^2 \theta / 2}, \quad (21.8.6)$$

tiene la curiosa propiedad de coincidir con la sección eficaz sin apantallamiento, con la sección eficaz clásica (fórmula de Rutherford) y con la sección eficaz calculada en la aproximación de Born. En efecto, en esta,

$$f_{\text{C:B}}(k; \theta) = \frac{\sigma}{2a_0 k^2 \sin^2 \theta / 2}. \quad (21.8.7)$$

EJERCICIO: Demostrar (21.8.7). Para evaluar una integral singular, tómesese el potencial apantallado  $V_{\text{C,L}}(r) = e^{-r/L} e_1 e_2 / r$  y el límite  $L \rightarrow \infty$  después de evaluada la integral •

Para  $\theta = 0$  la sección eficaz es infinita; también lo es la sección eficaz total. Esto está relacionado con la llamada *catástrofe infrarroja*, de lo que veremos más en la sección 23.1. Físicamente, este infinito es aceptable; como vimos en la sección 21.2, la sección eficaz a  $\theta = 0$  no es medible, experimentalmente.

### 21.8.2. Solución exacta de la dispersión coulombiana

Como hemos comentado, el problema de la dispersión coulombiana puede resolverse exactamente. Según la ecuación (17.3.11), la función de onda con simetría cilíndrica alrededor del eje  $OZ$  y correspondiente a momento bien definido asintóticamente, es

$$\psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}) = C \frac{\Gamma(1 - i\sigma/a_0 k)}{(2\pi)^{3/2}} e^{\pi\sigma/2a_0 k} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} M\left(\frac{i\sigma}{a_0 k}, 1, i(kr - \mathbf{k}\mathbf{r})\right).$$

A gran  $r$ , utilizando las propiedades asintóticas de las funciones de Kummer (Apéndice IV) y ajustando de forma apropiada la constante  $C$ , tenemos

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} & \exp i \left\{ \mathbf{k}\mathbf{r} - \frac{\sigma}{a_0 k} \log(kr - \mathbf{k}\mathbf{r}) \right\} \\ & + \frac{f_{\text{C}}(k; \theta)}{r} \exp i \left\{ kr + \frac{\sigma}{a_0 k} \log 2kr \right\}. \end{aligned} \quad (21.8.8)$$

$\theta = \angle(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  y  $f_{\text{C}}$  es la dada en (21.8.5). El alcance infinito del potencial coulombiano es patente en que la interacción distorsiona no sólo la onda esférica saliente (el factor  $\exp i(\sigma/a_0 k) \log 2kr$  en el segundo término en el miembro de la derecha de (21.8.8)) sino también la onda plana, que ya no es tan plana, también con un término logarítmico, que puede escribirse como  $\exp(-i\sigma/a_0 k) \log[kr(1 - \cos \theta)]$ . Sin embargo, estos términos resultan bastante inofensivos. Debido a lo lentamente variable del logaritmo, los valores tanto de la corriente dispersada, que se calcula con el segundo término del miembro de la derecha en (21.8.8), como de la incidente (que se calcula con el primero) tienen el mismo valor que si no hubiese términos logarítmicos, es decir, lo mismo que se obtendría con

$$\psi_{\mathbf{k}; \text{efectivo}}^+(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \frac{f_{\text{C}}}{r} e^{ikr}.$$

por tanto, la sección eficaz, también en este cálculo sin apantallamiento, viene dada por (21.8.6).

### 21.9. Nota sobre colisiones de partículas idénticas

En todos los desarrollos anteriores hemos supuesto que las partículas que colisionaban eran *distinguibles*. Si fuesen idénticas, la función (21.4.2) no tendría las propiedades de simetría apropiadas. Si denotamos con los índices 1, 2 a las partículas que colisionamos, el intercambio  $1 \leftrightarrow 2$  es equivalente, en el c.m., a intercambiar

$$\phi \leftrightarrow \pi + \phi, \quad \theta \leftrightarrow \pi - \theta;$$

esto es evidente si nos referimos a la fig. 21.3.1b. Por tanto, hay que sustituir (21.4.2) por

$$\begin{aligned} \psi^+(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{1}{\sqrt{2!}} \left( e^{ipz/\hbar} + \eta e^{-ipz/\hbar} \right) + \frac{e^{ipr/\hbar}}{r} f_{\text{sim}}, \\ f_{\text{sim}} = \frac{f(k; \theta, \phi) + \eta f(k; \pi - \theta, \pi + \phi)}{\sqrt{2!}}. \end{aligned} \quad (21.9.1a)$$

Para bosones,  $\eta = 1$ ; para fermiones,  $\eta = -1$ . Hemos tomado  $\mathbf{p}$  a lo largo del eje  $OZ$ . Repitiendo cálculos anteriores, obtenemos la sección eficaz, para partículas idénticas (*fórmula de Mott*),

$$\frac{d\sigma_{\text{c.m.}}}{d\Omega} = |f(k; \theta, \phi) + \eta f(k; \pi - \theta, \pi + \phi)|^2. \quad (21.9.1b)$$

Nótese que la expresión de la sección eficaz total también cambia; los ángulos  $\theta$ ,  $\phi$  y  $\pi - \theta$  y  $\pi + \phi$  representan situaciones idénticas. Por tanto, para no contar doble, debemos escribir

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{1}{2!} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} d \cos \theta \frac{d\sigma_{\text{c.m.}}}{d\Omega}. \quad (21.9.2)$$

Finalmente, el desarrollo en ondas parciales es

$$f_{\text{sim}} = \frac{2}{k} \sum_{l=\text{par/impar}} (2l+1) P_l(\cos \theta) \text{sen } \delta_l e^{i\delta_l}, \quad (21.9.3)$$

con  $l = \text{par}$  para bosones y  $l = \text{impar}$  para fermiones.

## PROBLEMAS

P.21.1. Hallar el desperdigamiento de los electrones en un televisor. Supóngase que la distancia recorrida es de 10 cm, la energía de 100 eV, y la colimación inicial de 0.1 mm.

P.21.2. Al describir un proceso de dispersión diciendo el lugar al que llega la partícula dispersada,  $\mathbf{r}$ , o el vector de ondas con que llega,  $\mathbf{k}_f$ , estamos en aparente contradicción con el principio de incertidumbre de Heisenberg que nos dice que  $\Delta r \Delta k_f \sim \frac{1}{2}$ . Comprobar que, con las condiciones prácticas de detección de partículas dispersadas esto no representa un problema

*Solución.* Consideremos el caso muy desfavorable de un electrón. El error  $\Delta r$  típico, por ejemplo de una emulsión, es del orden del tamaño de unas cuantas moléculas; digamos,  $\Delta r \sim 10^{-6}$  cm. Entonces, con  $E_f = \hbar^2 k_f^2 / 2m$ ,

$$\Delta E_f \simeq 2\hbar^2 k_f \Delta k_f / 2m \sim \frac{\hbar}{2\Delta r} \sqrt{\frac{2E_f}{m}}$$

luego

$$\frac{\Delta E_f}{E_f} \sim \frac{10^{-2}}{\sqrt{E_f(\text{eV})}},$$

$E_f(\text{eV})$  la energía del electrón en electronvoltios. Incluso para energías de un sólo eV,  $\Delta E_f/E_f \simeq 1\%$ .

P.21.3. Demostrar, para el pozo esférico, que  $f_l(k) \sim k^{2l} \alpha_l$ . Calcular las  $\alpha_l$ .

P.21.4. Calcúlese  $f_l(k)$  para  $l \rightarrow \infty$  para un potencial de Yukawa,

$$V_Y(r) = -ge^{br}/r.$$

*Solución.* para  $l \rightarrow \infty$  vale la aproximación semiclassical. Por tanto, de (21.5.11),

$$\begin{aligned} \delta_l(k) \underset{l \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{-mg}{\hbar^2} \int_{l/k}^{\infty} dr \frac{e^{-br}}{\sqrt{k^2 r^2 - l^2}} &\simeq \frac{-mge^{-bl/k}}{\hbar^2 k} \int_0^{\infty} dx \frac{e^{-(bl/k)x}}{\sqrt{x(x+2)}} \\ &= \frac{-mg}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{2bkl}} e^{-bl/k}, \end{aligned}$$

esta fórmula vale para  $l \gg kb^{-1}$ . El resultado  $\delta_l \sim e^{-bl/k}$  es, de hecho, válido para cualquier potencial de corto alcance.

P.21.5. (**Cota de Froissart**) Utilizando el resultado del problema anterior, calcúlese, para un potencial de Yukawa, una cota para  $\sigma_{\text{tot}}(k)$  para gran  $k$ .

*Solución.* Se tiene

$$\sigma_{\text{tot}}(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \text{sen}^2 \delta_l.$$

Evidentemente,  $\text{sen}^2 \delta_l \leq 1$  luego, para cualquier  $n$ ,

$$\sigma_{\text{tot}}(k) \leq \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^n (2l+1) + \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=n+1}^{\infty} (2l+1) \text{sen}^2 \delta_l.$$



Tomando  $n \gg k/b$ , por el resultado del problema anterior,

$$\sigma_{\text{tot}}(k) \leq \frac{4\pi}{k^2} n(n+2) + \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=n+1}^{\infty} (2l+1) \frac{m^2 g^2}{\hbar^4} \frac{\pi}{2kbl} e^{-2bl/k}.$$

Escogiendo  $n = kb^{-1} \log kb^{-1}$ , el segundo término tiende a cero, a gran  $k$ , y nos queda

$$\sigma_{\text{tot}}(k) \leq 4\pi b^{-2} \log^2 \frac{k}{b}, \quad k \gg b.$$

Esta cota (*cota de Froissart*) tiene validez para cualquier interacción de alcance  $b^{-1}$ . Para  $b^{-1} \sim 1$  fm, la cota da  $(0.1)$  (barn)  $\log^2 k/b$ . Experimentalmente, la sección eficaz protón-neutrón es de unos 0.06 barn; la cota es razonablemente ajustada.

**P.21.6.** (*Dispersión por estados ligados*). Considérese un conjunto de partículas,  $a = 1, \dots, n$  que forman un estado ligado con función de onda  $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)$ . La interacción con un proyectil, situado en  $\mathbf{r}$ , se hace a través de un potencial suma de los  $V_a(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a|)$ . Calcular la amplitud de dispersión  $f(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}_f)$  del proyectil con el racimo de partículas, en la aproximación de Born, en función de la interacción del proyectil con cada una de las partículas. Para evitar problemas con los sistemas de referencia, supóngase que las partículas del blanco son mucho más pesadas que el proyectil.

*Solución.* El potencial creado por el racimo de partículas en el punto  $\mathbf{r}$  es

$$V(\mathbf{r}) = \sum_a \int d^3 r_1 \dots d^3 r_n |\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)|^2 V_a(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a|).$$

De (21.6.7),

$$f_{\text{B}}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}_f) = \frac{-m}{2\pi\hbar^2} \sum_a \int d^3 r \int d^3 r_1 \dots d^3 r_n e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_f)\cdot\mathbf{r}} V_a(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a|) |\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)|^2.$$

Si denotamos las amplitudes individuales por  $f_{a\text{B}}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}_f)$ ,

$$f_{a\text{B}}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}_f) = \frac{-m}{2\pi\hbar^2} \int d^3 r e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_f)\cdot\mathbf{r}} V_a(\mathbf{r}),$$

tenemos

$$f_{\text{B}}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}_f) = \sum_a \widetilde{W}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_f) f_{a\text{B}}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}_f), \quad \widetilde{W}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_f) \equiv \int d^3 r e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} W_a(\mathbf{r}),$$

$$W_a(\mathbf{r}_a) = \int d^3 r_1 \dots d^3 r_{a-1} d^3 r_{a+1} \dots d^3 r_n |\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)|^2.$$

**P 21.7.** Demostrar (21.8.5).

*Solución.* la fórmula a demostrar es

$$\frac{\Gamma(1-\eta)\eta}{2\Gamma(1+\eta)} \int_{-1}^{+1} dx \left( \frac{1-x}{2} \right)^{\eta-1} P_l(x) = \frac{\Gamma(l+1-\eta)}{\Gamma(l+1+\eta)}.$$

Cambiando de variable,  $(1-x)/2 = z$  y con operaciones sencillas, el miembro de la izquierda da

$$\frac{\Gamma(l+1-\eta)}{\Gamma(\eta)l!} \int dz z^{\eta-1} (1-z)^l = \frac{\Gamma(l+1-\eta)}{\Gamma(\eta)\eta!} \frac{\Gamma(\eta)\Gamma(l+1)}{\Gamma(\eta+l+1)},$$

que, efectivamente, coincide con  $\Gamma(l+1-\eta)\Gamma(l+1+\eta)$ . En el último paso hemos utilizado la fórmula de Euler,

$$\int_0^1 dx x^\alpha (1-x)^\beta = \Gamma(\alpha+1)\Gamma(\beta+1)/\Gamma(\alpha+\beta+2).$$

P.21.8. Demostrar que

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)P_l(x) \equiv S(x) = 2\delta_{|x-1|}(x-1).$$

*Solución.* Tenemos que considerar la integral

$$\int_{-1}^{+1} dx S(x)\varphi(x)$$

para cualquier función “suave”,  $\varphi$ . Consideramos que una función es “suave” si se puede desarrollar en polinomios de Legendre. Escribimos, pues, el desarrollo  $\varphi(x) = \sum_l (2l+1)P_l(x)\varphi_l$ ; utilizando las relaciones de ortogonalidad tenemos inmediatamente

$$\int_{-1}^{+1} dx S(x)\varphi(x) = 2 \sum_l (2l+1)\varphi_l$$

que en efecto coincide con  $2\varphi(1)$ . La demostración de que, para  $x \neq 1$ ,  $S(x) = 0$  se puede hacer también directamente. Se tiene la relación  $(2l+1)P_l = P'_{l+1} - P'_{l-1}$ , para  $l \geq 1$ . Sustituyendo en  $S$ , obtenemos

$$S(x) = P_0 + \sum_{l=1} P'_{l+1} - \sum_{l=1} P'_{l-1} = P_0 - P'_1 = 0,$$

siempre que se pueda dar sentido a las sumas (lo que no ocurre para  $x = 1$  ya que la suma  $S(1) = \sum (2l+1)$  es divergente).

P.21.9. Calcular la amplitud de difusión y sección eficaz, en la aproximación de Born, para un potencial de Yukawa  $V_Y = -ge^{br}/br$

*Solución.*

$$f_B = \frac{2mg/\hbar^2 b}{4k^2 \sin^2 \theta / 2 + b^2}.$$

## Teoría formal de colisiones

### 22.1. Ecuación de Lippmann–Schwinger. Función de Green. Aproximación iconal

#### 22.1.1. Ecuación de Lippmann–Schwinger

Recordamos que, en un proceso de dispersión, la función de ondas tiene un comportamiento a grandes distancias dado por (21.6.1). Reescribimos esto ahora en la forma

$$\psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}) = \psi_{0\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \chi^+, \quad (22.1.1a)$$

$$\psi_{0\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \chi^+ \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} f(k; \theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (22.1.1b)$$

$\psi_{\mathbf{k}}^+$  es la solución exacta de la ecuación de Schrödinger,

$$\hat{H}\psi_{\mathbf{k}}^+ = E_{\mathbf{k}}\psi_{\mathbf{k}}^+, \quad E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}. \quad (22.1.1c)$$

Para deducir las ecuaciones de Lippmann–Schwinger es conveniente trabajar con el formalismo de Dirac; en efecto, estas ecuaciones son válidas para estados de dispersión incluso en casos como colisiones inelásticas en los que el formalismo de funciones de onda no es apropiado. Sea pues  $|\psi^+\rangle$  el estado de dispersión al que, en el caso elástico, correspondería la función de onda  $\psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r})$ ; tenemos las ecuaciones de Schrödinger,

$$(\hat{H} - E_{\mathbf{k}})|\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle = 0, \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (22.1.2)$$

y la libre,

$$(\hat{H}_0 - E_{\mathbf{k}})|\psi_{0\mathbf{k}}\rangle = 0. \quad (22.1.3)$$

La normalización la escogemos tal que la función de onda de  $|\psi_{0\mathbf{k}}\rangle$  sea  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ . Finalmente, definimos  $|\chi^+\rangle$  por

$$|\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle \equiv |\psi_{0\mathbf{k}}\rangle + |\chi^+\rangle. \quad (22.1.4)$$

Añadiendo a (22.1.2) un término  $(E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0)|\psi_{0\mathbf{k}}\rangle$ , nulo debido a (22.1.3), y reemplazando  $E_{\mathbf{k}}$  por  $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} E_{\mathbf{k}} + i\epsilon$ , con  $\epsilon > 0$ , tenemos

$$\lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ \epsilon > 0}} (E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 + i\epsilon)|\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ \epsilon > 0}} (E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 + i\epsilon)|\psi_{0\mathbf{k}}\rangle + \hat{V}|\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle.$$

Como veremos, el escoger  $\epsilon > 0$  es esencial para obtener la condición de contorno correcta. Multiplicando ahora los dos miembros por el inverso,

$$(E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 + i\epsilon)^{-1},$$

que está perfectamente definido mientras  $\epsilon$  no se anule, obtenemos la *ecuación de Lippmann–Schwinger*,

$$|\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle = |\psi_{0\mathbf{k}}\rangle + \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ \epsilon > 0}} \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V}|\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle. \quad (22.1.5a)$$

A veces escribiremos este límite de manera simbólica como

$$|\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle = |\psi_{0\mathbf{k}}\rangle + \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 + i0} \hat{V}|\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle. \quad (22.1.5b)$$

### 22.1.2. La ecuación de Lippmann–Schwinger en el formalismo de funciones de onda; función de Green y condiciones de contorno

Que (22.1.5) implica la ecuación de Schrödinger es evidente; falta por demostrar que las  $|\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle$  solución de (22.1.5) corresponden a funciones de onda que satisfacen la condición de contorno (22.1.b), apropiada para estados de colisión, en el caso elástico. Pasamos a hacerlo.

Multiplicando (22.1.5) por la izquierda por  $\langle \mathbf{r} |$ , tenemos

$$\psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi_{\mathbf{k}}^+\rangle = \psi_{0\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \lim \langle \mathbf{r} | \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} | \psi_{\mathbf{k}}^+\rangle.$$

El cálculo del último término de la derecha es algo latoso. Escribimos

$$\langle \mathbf{r} | \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} | \psi_{\mathbf{k}}^+\rangle = \int d^3p' \langle \mathbf{r} | \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 + i\epsilon} | \mathbf{p}'\rangle \langle \mathbf{p}' | \hat{V} | \psi_{\mathbf{k}}^+\rangle.$$

Ahora bien,  $\hat{H}_0 | \mathbf{p}'\rangle = (p'^2/2m) | \mathbf{p}'\rangle$ , luego

$$\frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 + i\epsilon} | \mathbf{p}'\rangle = \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - p'^2/2m + i\epsilon} | \mathbf{p}'\rangle$$

luego, en términos de  $\mathbf{k}' = \mathbf{p}'/\hbar$  y recordando el valor de  $E_{\mathbf{k}}$ ,

$$\langle \mathbf{r} | \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} | \psi_{\mathbf{k}}^+\rangle = 2m\hbar \int d^3k' \frac{1}{k^2 - k'^2 + i\epsilon} \langle \mathbf{r} | \mathbf{p}'\rangle \langle \mathbf{p}' | \hat{V} | \psi_{\mathbf{k}}^+\rangle.$$

Finalmente, utilizamos que

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p}'\rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}, \quad \langle \mathbf{r} | \hat{V} = V(\mathbf{r}') \langle \mathbf{r} |$$

para obtener

$$\langle \mathbf{p}' | \hat{V} | \psi_{\mathbf{k}}^+\rangle = \int d^3r' \langle \mathbf{p}' | \mathbf{r}'\rangle \langle \mathbf{r}' | \hat{V} | \psi_{\mathbf{k}}^+\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r' e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}').$$

Sustituyendo, obtenemos la ecuación de Lippmann–Schwinger en el formalismo de funciones de onda:

$$\psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}) = \psi_{0\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \frac{2m\hbar}{(2\pi\hbar)^3} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int d^3k' d^3r' \frac{e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{k^2 - k'^2 + i\epsilon} V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}'). \quad (22.1.6)$$

La integral en  $d^3k'$  se puede hacer explícitamente (problema P.22.3):

$$G_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k' \frac{e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{k^2 - k'^2 + i\epsilon} = \frac{-1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (22.1.7)$$

A  $G_{\mathbf{k}}^+$  se le llama *función de Green*.<sup>1</sup> La forma (22.1.7) depende esencialmente de haber definido  $1/(k^2 - k'^2 + i\epsilon)$  con  $\epsilon > 0$ ; de haber hecho otra elección, (22.1.7) hubiera cambiado y no habríamos encontrado la condición de contorno correcta, como comprobaremos pronto.

Sustituyendo (22.1.7) en (22.1.6) tenemos la ecuación integral explícita

$$\psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3r' G_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}'). \quad (22.1.8)$$

Para comprobar que  $\psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r})$  obedece la condición de contorno correcta, tomamos el límite de (22.1.8) para  $r$  grande. Si consideramos que el potencial es de corto alcance, el valor de  $r'$  en la integral en (22.1.8) puede considerarse acotado, es decir, podemos considerar  $r'/r$  pequeño; escribimos entonces,

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = r - \mathbf{r}\mathbf{r}'/r + O(1/r), \quad \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{r} e^{ikr - i\mathbf{k}\mathbf{r}\mathbf{r}'/r} + O(1/r^2).$$

Sustituyendo esto en la forma explícita de  $G_{\mathbf{k}}^+$ , la ec. (22.1.8) nos da

$$\psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3r' e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}\mathbf{r}'/r} V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}') \quad (22.1.9)$$

que, efectivamente, es de la forma (22.1.1) con

$$f(k; \theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}\mathbf{r}'/r} V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}'). \quad (22.1.10)$$

<sup>1</sup> Efectivamente,  $G_{\mathbf{k}}^+$  es la solución de  $(\Delta + k^2)G_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ , como se comprueba fácilmente transformando Fourier.

## 22.1.3. Aproximación de Born; aproximación iconal

Consideramos ahora el vector  $\mathbf{k}_f = k\mathbf{r}/r$ ; la amplitud de dispersión, en la notación  $f(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}_f)$  se escribe, de (22.1.10), como

$$f(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}_f) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r e^{i\mathbf{k}_f \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}), \quad (22.1.11)$$

y hemos cambiado el nombre de la variable de integración a  $d^3r$ . Esta expresión es muy útil en cálculos aproximados. Por ejemplo, para hallar la aproximación de Born basta sustituir en (22.1.11)  $\psi_{\mathbf{k}}^+$  por su expresión a orden cero,  $\psi_{0\mathbf{k}}$ , con lo que tenemos

$$f_B(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}_f) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r e^{i\mathbf{k}_f \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \mathbf{r}}$$

que, efectivamente, coincide con (21.6.7), que queda así demostrada.

Otra aproximación sencilla de encontrar con (22.1.11) es la semiclásica, directamente para amplitudes de dispersión. En tres dimensiones podemos escribir la acción clásica, calculada a lo largo de la trayectoria clásica, como

$$A_{cl} = \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} d\boldsymbol{\ell} \mathbf{p}_{cl}(\mathbf{r}');$$

por tanto, la función de onda en la aproximación semiclásica WKB la podemos escribir como

$$\psi_{WKB}^+(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_0} \exp \frac{i}{\hbar} \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} d\boldsymbol{\ell} \mathbf{p}_{cl}(\mathbf{r}') \quad (22.1.12)$$

(comparar con (8.3.3)). Hemos tomado las constantes arbitrarias en la expresión WKB de manera que, cuando ponemos la interacción a cero, recobremos una onda plana,  $\psi_{0\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_0}$ , y  $\mathbf{k} \equiv \mathbf{p}_{cl}(\mathbf{r}_0)/\hbar$  es el vector número de ondas inicial. En (22.1.12) tomamos  $\mathbf{r}_0$  de manera que esté fuera de la región donde hay interacción apreciable; y lo mismo con  $\mathbf{r}$ , ver fig. 22.1.1.

Según (22.1.11), la amplitud de dispersión correspondiente a (22.1.12) será

$$f_{WKB}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}_f) = -\frac{me^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_0}}{2\pi\hbar^2} \int d^3r e^{-i\mathbf{r}\mathbf{k}_f} V(\mathbf{r}) e^{iA_{cl}(\mathbf{r})/\hbar},$$

$$A_{cl} = \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} d\boldsymbol{\ell} \mathbf{p}_{cl}(\mathbf{r}').$$

Esta aproximación, a este orden y, en especial, para pequeños ángulos, suele llamarse *aproximación iconal*; en óptica corresponde a la aproximación de óptica geométrica.

Más detalles sobre las aproximaciones iconal, de Born, etc., y, en general, sobre teoría de colisiones, puede verse en el tratado de Goldberger y Watson (1965).

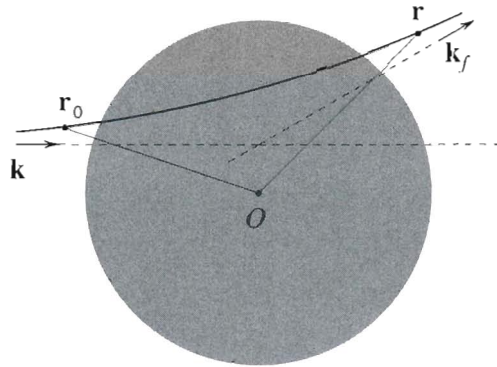


FIGURA 21.1.1. Trayectoria. Área sombreada: región en la que la interacción es apreciable.

#### 22.1.4. Otras ecuaciones del tipo Lippmann–Schwinger; soluciones

Además de los estados  $|\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle$  son útiles para ciertos problemas los  $|\psi_{\mathbf{k}}^-\rangle$ , definidos por

$$|\psi_{\mathbf{k}}^-\rangle = |\psi_{0\mathbf{k}}\rangle + \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ \epsilon > 0}} \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 - i\epsilon} \hat{V} |\psi_{\mathbf{k}}^-\rangle. \quad (22.1.14a)$$

EJERCICIO: Demostrar que, a gran  $r$ , las funciones de onda correspondientes a soluciones de (22.1.14) son

$$\psi_{\mathbf{k}}^-(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f^*(k; \theta, \phi) \frac{e^{-ikr}}{r}, \quad (22.1.14b)$$

esto es, una onda plana más una esférica *colapsando* hacia el origen •

EJERCICIO: Demostrar que  $\psi_{\mathbf{k}}^{-}(\mathbf{r}) = \{\psi_{-\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{r})\}^* \bullet$

Damos ahora dos soluciones a las ecuaciones de tipo Lippmann–Schwinger. La primera es iterativa, y nos proporciona la definición precisa de la *serie de Born* que ya vimos en (21.6.8). Iterando (22.1.5) o (22.1.14),

$$|\psi_{\mathbf{k}}^{\pm}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \left( \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ \epsilon > 0}} \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} \hat{V} \right)^n |\psi_{0\mathbf{k}}\rangle. \quad (22.1.15)$$

La segunda solución es formal. De (22.1.5), multiplicando por  $E_{\mathbf{k}} - \hat{H} + i\epsilon$  y reagrupando,

$$\lim(E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 - \hat{V} + i\epsilon)|\psi_{\mathbf{k}}^{+}\rangle = \lim(E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 + i\epsilon)|\psi_{0\mathbf{k}}\rangle = \lim i\epsilon|\psi_{0\mathbf{k}}\rangle,$$

luego

$$|\psi_{\mathbf{k}}^{+}\rangle = \lim \frac{i\epsilon}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H} + i\epsilon} |\psi_{0\mathbf{k}}\rangle, \quad (22.1.16)$$

que nos relaciona la solución del problema de la dispersión de partículas con el de invertir el operador  $\hat{H} - E$ .

## 22.2. Estados asintóticos. Matriz $S$ .

### Amplitud de transición

#### 22.2.1. Estados asintóticos, matriz $S$ y amplitud de transición

En esta sección vamos a dar una descripción abstracta de procesos de colisión y una nueva serie de aproximaciones, de gran importancia para aplicaciones, en especial para teoría relativista. Consideramos que en un tiempo, que denotamos por  $t_1$ , que haremos tender a  $-\infty$ , muy anterior al tiempo en que tiene lugar la interacción ( $t \sim 0$ ), preparamos un sistema de dos partículas<sup>2</sup> con momentos  $\mathbf{p}_1$  y  $\mathbf{p}_2$  y otros números cuánticos (por ejemplo, terceras componentes de espín)  $\alpha_1, \alpha_2$ , normalizados a

$$\langle \mathbf{p}, \alpha | \mathbf{p}', \alpha' \rangle = \delta_{\alpha\alpha'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}').$$

El estado inicial será

$$|i\rangle = |\mathbf{p}_1, \alpha_1; \mathbf{p}_2, \alpha_2\rangle. \quad (22.2.1a)$$

Dejamos evolucionar al estado; las partículas interaccionarán y, al cabo del tiempo, se volverán a separar. Consideramos un tiempo final  $t_2$ , muy grande y que haremos tender a  $+\infty$ . En este tiempo el estado evolucionado del (22.2.1a) será el

$$\hat{U}(t_2, t_1) |\mathbf{p}_1, \alpha_1; \mathbf{p}_2, \alpha_2\rangle \quad (22.2.1b)$$

<sup>2</sup> El formalismo puede extenderse fácilmente a colisiones de cualquier número de partículas, o a desintegraciones.



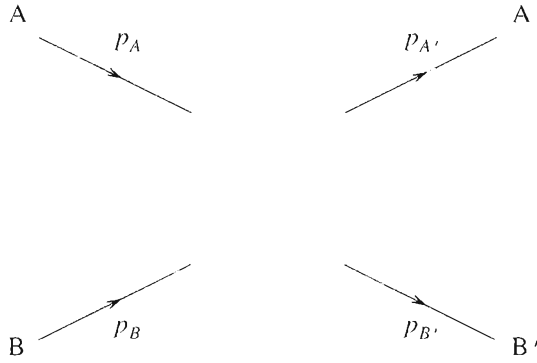


FIGURA 22.2.1. La matriz  $S$  como una “caja negra”.

A los estados (22.2.1), para  $t_1 \rightarrow -\infty$ ,  $t_2 \rightarrow +\infty$  se les llama *estados asintóticos*.

Dado un estado arbitrario, *estado final*,

$$|f\rangle = |\mathbf{p}'_1, \alpha'_1; \dots; \mathbf{p}'_n, \alpha'_n\rangle, \quad (22.2.2)$$

la amplitud de probabilidad de encontrar el sistema que, en  $t = t_1$  estaba en el estado  $|i\rangle$  en el  $|f\rangle$ , a tiempo  $t = t_2$  es, evidentemente, el producto escalar

$$\langle f|\hat{U}(t_2, t_1)|i\rangle = \langle \mathbf{p}'_1, \alpha'_1; \dots; \mathbf{p}'_n, \alpha'_n|\hat{U}(t_2, t_1)|\mathbf{p}_1, \alpha_1; \mathbf{p}_2, \alpha_2\rangle. \quad (22.2.3)$$

Para  $t_1 \rightarrow -\infty$ ,  $t_2 \rightarrow +\infty$  podemos tomar  $|i\rangle, |f\rangle$  como *libres*. Al operador

$$\hat{S} = \lim_{\substack{t_1 \rightarrow -\infty \\ t_2 \rightarrow +\infty}} \hat{U}(t_2, t_1) \quad (22.2.4)$$

se le conoce por motivos históricos como *matriz-S*; fue introducido por primera vez por Wheeler (1937) y Heisenberg (1943). En términos de este operador las amplitudes de probabilidad de transición  $i \rightarrow f$  (22.2.3) son sus elementos de matriz,

$$\langle f|\hat{S}|i\rangle. \quad (22.2.5)$$

La matriz  $S$  actúa como una “caja negra”, que nos lleva de estados incidentes a estados finales (figura 22.2.1); midiendo la probabilidad de obtener determinados estados finales podemos deducir lo que ocurrió en la caja.



Está claro que, si no hubiera interacción, se tendría<sup>3</sup>  $\hat{S} = 1$ . Por otra parte, en el proceso de colisión se conservan energía y momento totales. Es por tanto útil escribir

$$\hat{S} = 1 + i\hat{\mathcal{M}}, \quad (22.2.6)$$

y separar deltas de conservación de energía y momento definiendo

$$\langle f|\hat{\mathcal{M}}|i\rangle = \delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i)\delta(E_f - E_i)T(i \rightarrow f), \quad (22.2.7)$$

con  $\mathbf{P}_{i,f}$  los momentos inicial, final y  $E_{i,f}$  las energías inicial, final.  $T$  contiene la parte no trivial de  $\hat{S}$  (la que depende de la interacción) y se la conoce como *amplitud de transición*.

Si suponemos que los momentos iniciales no son iguales a los finales (el caso  $|i\rangle = |f\rangle$  lo podemos obtener como un límite del anterior) tenemos  $\langle f|i\rangle = 0$  y encontramos la relación

$$\langle f|\hat{S}|i\rangle = \delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i)\delta(E_f - E_i)T(i \rightarrow f). \quad (22.2.8)$$

Tenemos ahora que resolver dos cuestiones. En primer lugar, expresar los observables, específicamente las secciones eficaces, en términos de  $T$ ; esto lo veremos en la próxima sección. En segundo lugar, debemos calcular  $T$  en términos de la interacción, lo que veremos a continuación.

Consideramos el hamiltoniano del sistema, que suponemos dado en la imagen de Schrödinger,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I;$$

$\hat{H}_0$  es el hamiltoniano libre y  $\hat{H}_I$  la interacción, que coincide con el potencial si la interacción viene dada por un potencial. En la imagen de Dirac (sec. 9.5) el operador evolución temporal  $\hat{U}_D(t_2, t_1)$  viene dado por (9.5.12). Por tanto, en esta imagen,

$$\begin{aligned} \hat{S}_D &= T \exp \frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \hat{H}_{DI}(t); \\ \hat{H}_{DI}(t) &= e^{i\hbar H_0 t/\hbar} \hat{H}_I e^{-i\hbar H_0 t/\hbar}. \end{aligned} \quad (22.2.9)$$

Los estados  $|i\rangle$ ,  $|f\rangle$  podemos suponerlos en la imagen de Dirac, o la de Schrödinger, según sea más cómodo. En efecto, al ser libres, la ecuación (9.5.7) nos dice que no dependen del tiempo. Las dos imágenes coinciden a  $t = 0$ , luego podemos suponer que  $|i\rangle$ ,  $|f\rangle$  están en la imagen de Dirac, o en la de Schrödinger a tiempo fijo  $t = 0$ . Suprimiendo el índice  $D$  en  $|i\rangle$ ,  $|f\rangle$  tenemos pues

$$\langle f|\hat{S}|i\rangle = \langle f|T \exp \frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\hbar H_0 t/\hbar} \hat{H}_I e^{-i\hbar H_0 t/\hbar} |i\rangle, \quad (22.2.10)$$

lo que, en principio, nos resuelve el cálculo de la matriz- $S$  en términos de la interacción a cualquier orden de aproximación deseado.

<sup>3</sup> Esto no es estrictamente cierto;  $\hat{S}$  podría ser una fase. Ajustamos la fase arbitraria de los estados (22.2.1,2) de forma que esta fase sea la unidad.

### 22.2.2. Conexión con la amplitud de dispersión para el caso de dos partículas

Consideramos ahora el caso de colisiones elásticas de dos partículas sin espín de manera que

$$|i\rangle = |\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2\rangle; \quad |f\rangle = |\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2\rangle.$$

Trabajaremos además en la “aproximación de Born”, esto es, escribimos

$$T \exp \frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \hat{H}_{DI}(t) \simeq 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \hat{H}_{DI}(t).$$

Tenemos pues, suponiendo a  $|f\rangle$ ,  $|i\rangle$  ortogonales, y con  $\hat{H}_I = \hat{V}$ ,

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{S} | i \rangle_B &= \frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2 | e^{i\hbar H_0 t / \hbar} \hat{V} e^{-i\hbar H_0 t / \hbar} | \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 \rangle \\ &= \frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2 | e^{i(E'_1 + E'_2)t / \hbar} \hat{V} e^{-i(E_1 + E_2)t / \hbar} | \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 \rangle \\ &= \frac{-i}{\hbar} 2\pi\hbar\delta(E_f - E_i) \langle \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2 | \hat{V} | \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 \rangle \\ &= -2i\pi\delta(E_f - E_i) \int d^3r_1 d^3r_2 \frac{e^{-i\mathbf{r}_1\mathbf{p}'_1/\hbar - i\mathbf{r}_2\mathbf{p}'_2/\hbar}}{(2\pi\hbar)^3} V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \frac{e^{i\mathbf{r}_1\mathbf{p}_1/\hbar + i\mathbf{r}_2\mathbf{p}_2/\hbar}}{(2\pi\hbar)^3} \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned} E_i &= E_1 + E_2 = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} \\ E_f &= E'_1 + E'_2 = \frac{\mathbf{p}'_1{}^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}'_2{}^2}{2m_2} \end{aligned}$$

y  $m_a$  son las masas de las partículas que colisionan. Utilizamos ahora las coordenadas del centro de masas,

$$\mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$$

y los momentos

$$\mathbf{P}_i = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \quad \mathbf{P}_f = \mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2.$$

En términos de ellos, las variables se separan y tenemos

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{S} | i \rangle_B &= \frac{-2\pi i}{(2\pi\hbar)^6} \delta(E_f - E_i) \\ &\times \int d^3R d^3r e^{i(\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f)/\hbar} V(\mathbf{r}) \exp i \frac{m_2\mathbf{p}_1 - m_1\mathbf{p}_2 - m_2\mathbf{p}'_1 + m_1\mathbf{p}'_2}{\hbar(m_1 + m_2)} \cdot \mathbf{r} \\ &= \frac{-2\pi i}{(2\pi\hbar)^3} \delta(E_f - E_i) \delta(\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f) \\ &\times \int d^3r V(\mathbf{r}) \exp i \frac{m_2\mathbf{p}_1 - m_1\mathbf{p}_2 - m_2\mathbf{p}'_1 + m_1\mathbf{p}'_2}{\hbar(m_1 + m_2)} \cdot \mathbf{r}. \end{aligned} \tag{22.2.11}$$

Esta ecuación es válida en cualquier sistema de referencia. En el c.m.,  $\mathbf{P}_i = 0$ ,  $\mathbf{p}_1 = -\mathbf{p}_2 \equiv \hbar\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{p}'_1 = -\mathbf{p}'_2 \equiv \hbar\mathbf{k}'$  y (22.2.11) se simplifica a

$$\langle f | \hat{S} | i \rangle_B = i\delta(E_f - E_i)\delta(\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f) \frac{-2\pi}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \quad (22.2.12)$$

lo que, comparando con (22.2.8), nos dice que, en la aproximación de Born,

$$T_B(i \rightarrow f) = \frac{-1}{\hbar(2\pi\hbar)^2} \int d^3r e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} V(\mathbf{r}). \quad (22.2.13)$$

Este resultado nos permite relacionar  $T$  y  $f$ ; recordando (21.6.7) tenemos

$$T(i \rightarrow f) = \frac{1}{2\pi\hbar m} f(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'); \quad (22.2.14)$$

aunque sólo lo hemos demostrado en la aproximación de Born es posible comprobar que la relación (22.2.14) vale a todos los órdenes. Utilizando (22.2.14) y (22.1.11) obtenemos también una expresión para  $T$  en términos de los estados de Lippmann-Schwinger:

$$T(i \rightarrow f) = \frac{-1}{\hbar^3(2\pi)^2} \langle \psi_{0f} | \hat{H}_I | \psi_i^+ \rangle \quad (22.2.15)$$

y recordamos que la normalización en el formalismo de Lippmann-Schwinger la escogimos tal que

$$\langle \psi_{0f} | \psi_{0f'} \rangle = (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_{f'}).$$

### 22.3. Secciones eficaces en términos de la matriz $S$

La probabilidad de que un sistema inicialmente en el estado  $|i\rangle$  acabe, después de colisionar, en el  $|f\rangle$  es, según las reglas de la mecánica cuántica,

$$W(i \rightarrow f) = |\langle f | \hat{S} | i \rangle|^2. \quad (22.3.1a)$$

De hecho a nosotros nos va a interesar la *probabilidad por unidad de tiempo*, que denotaremos por  $\bar{w}(i \rightarrow f)$ ; si el tiempo que transcurre desde que se prepara el sistema hasta que se detectan los resultados es  $\tau$ ,

$$\bar{w}(i \rightarrow f) = \frac{W(i \rightarrow f)}{\tau}. \quad (22.3.1b)$$

Si sustituimos en (22.3.1a) (22.2.8) nos encontramos con el resultado, aparentemente absurdo, de que<sup>4</sup>

$$W(i \rightarrow f) = [\delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i)]^2 [\delta(E_f - E_i)] |T(i \rightarrow f)|^2 = \infty. \quad (22.3.2)$$

<sup>4</sup> Suponemos que  $\langle f | i \rangle = 0$ .

Por supuesto, esto se debe a que hemos utilizado estados no normalizables; la probabilidad por unidad de tiempo es, realmente,

$$\bar{w}(i \rightarrow f) = \frac{W(i \rightarrow f)}{\|i\|^2 \|f\|^2 \tau},$$

que es de la forma  $\infty/\infty$ . Los infinitos del denominador se deben a la norma infinita de los estados, y también a que, en el límite que estamos trabajando,  $\tau = t_2 - t_1 \rightarrow \infty$ .

Para resolver este problema tenemos que hacer dos cosas. En primer lugar, tomar un tiempo finito en la definición de  $\bar{w}(i \rightarrow f)$  y el límite  $\tau \rightarrow \infty$  después; en segundo lugar, tenemos que reemplazar los estados no normalizables por estados normalizables.

Con respecto a lo segundo, un procedimiento riguroso sería formar paquetes de onda y dejarlos evolucionar con el tiempo; este tipo de discusión puede verse en los textos de Gottfried (1966) o Goldberger y Watson (1965). Aquí daremos una discusión simplificada, basada en el cálculo explícito que hicimos en la subsección 22.2.2 en la aproximación de Born. Recordamos pues cómo aparecía allí la delta de conservación de energía: lo hacía al integrar en  $dt$  la expresión  $\exp i(E_f - E_i)t/\hbar$  en los límites de la evolución temporal,  $t_2 = +\infty$  y  $t_1 = -\infty$ . Si los dejamos finitos, tenemos que reemplazar

$$\delta(E_f - E_i) \rightarrow \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{t_1}^{t_2} dt \exp i(E_f - E_i)t/\hbar.$$

Por tanto,

$$\frac{[\delta(E_f - E_i)]^2}{\tau} \rightarrow \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{t_1}^{t_2} dt e^{i(E_f - E_i)t/\hbar} \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\int_{t_1}^{t_2} dt e^{i(E_f - E_i)t/\hbar}}{\tau}.$$

En el límite  $\tau \rightarrow \infty$  el primer término en el miembro de la derecha tiende a la delta de energías; por lo tanto, en el segundo podemos poner  $E_f = E_i$ . En consecuencia, tenemos (nótese la similitud del método con el empleado para obtener (11.4.13))

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{t_1}^{t_2} dt e^{i(E_f - E_i)t/\hbar} \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\int_{t_1}^{t_2} dt e^{i(E_f - E_i)t/\hbar}}{\tau} \\ & \rightarrow \delta(E_f - E_i) \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\tau}{\tau} = \frac{1}{2\pi\hbar} \delta(E_f - E_i): \end{aligned}$$

hemos eliminado uno de los infinitos y hemos obtenido que

$$\bar{w}(i \rightarrow f) = [\delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i)]^2 \frac{1}{2\pi\hbar} \delta(E_f - E_i) |T(i \rightarrow f)|^2. \quad (22.3.3)$$

Para eliminar el segundo infinito, debemos considerar la probabilidad de transición por unidad de centro dispersor,

$$w(i \rightarrow f) = \bar{w}(i \rightarrow f)/N,$$

con  $N$  el número de centros dispersores: recordemos que, cuando definíamos la sección eficaz en la sección 21.4, considerábamos una onda plana incidente sobre *un* centro dispersor. Un estado con momento bien definido,  $|\mathbf{p}\rangle$  tiene, con nuestra normalización, la función de onda  $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar$ . Podemos sustituir esto por  $\psi_{\mathbf{p}}^V$  con

$$\psi_{\mathbf{p}}^V(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^2}, & \mathbf{r} \text{ en } V \\ 0, & \mathbf{r} \text{ fuera de } V. \end{cases} \quad (22.3.4)$$

$V$  es un volumen grande, pero finito. El número de centros dispersores que corresponden a  $\psi_{\mathbf{p}}^V$  es

$$N = \int d^3r |\psi_{\mathbf{p}}^V(\mathbf{r})|^2 = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3};$$

la delta de conservación de momento se convierte ahora en

$$\delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i) \rightarrow \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_V d^3r e^{i(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i)\mathbf{r}/\hbar}.$$

Con un cálculo similar al que utilizamos para eliminar el infinito debido a la delta de conservación de energías tenemos ahora

$$\begin{aligned} \frac{[\delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i)]^2}{N} &\rightarrow \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_V d^3r e^{i(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i)\mathbf{r}/\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\int_V d^3r' e^{i(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i)\mathbf{r}'/\hbar}}{V/(2\pi\hbar)^3} \\ &\rightarrow \delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i). \end{aligned}$$

Finalmente,

$$w(i \rightarrow f) = \frac{1}{2\pi\hbar} \delta(E_f - E_i) \delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i) |T(i \rightarrow f)|^2. \quad (22.3.6)$$

Ésta es la llamada *regla de platino* de Fermi. En el caso en que utilizásemos para  $T$  la aproximación de Born, esto se convierte en la *regla de oro de Fermi*,

$$w(i \rightarrow f) \simeq \frac{1}{2\pi\hbar} \delta(E_f - E_i) \delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i) |T_B(i \rightarrow f)|^2.$$

Para hallar la sección eficaz para dispersión en estados finales con momentos en un entorno  $d^3p'_1, \dots, d^3p'_n$  de los valores  $\mathbf{p}'_1, \dots, \mathbf{p}'_n$  multiplicamos la cantidad  $w(i \rightarrow f)$  por el número de estados en este entorno,  $d^3p'_1 \dots d^3p'_n$ , y dividimos por la corriente de probabilidad incidente,  $j$ :

$$d\sigma = \frac{w(i \rightarrow f)}{j} d^3p'_1 \dots d^3p'_n.$$

EJERCICIO: Comprobar que, en el caso de dispersión elástica, esta definición coincide con la de la sec. 21.4 •

La corriente relativa es igual al producto de la densidad de partículas por unidad de volumen,  $|\psi_{\mathbf{p}}|^2 = (2\pi\hbar)^{-3}$ , multiplicado por la velocidad relativa,  $v_{12}$ , en el centro de masas. Por tanto, la diferencial de sección eficaz será

$$d\sigma = \frac{(2\pi\hbar)^3}{v_{12}} |T(i \rightarrow f)|^2 \delta(E_f - E_i) \delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i) d^3p'_1 \dots d^3p'_n. \quad (22.3.7a)$$

La ecuación (22.3.7a) es también válida para colisiones relativistas; en particular, cuando el proyectil tiene masa cero (como el fotón),  $v_{12} = c$ , la velocidad de la luz. En términos de los momentos, y en el caso no relativista,

$$v_{12} = \frac{|\mathbf{p}_{1c.m.}|}{m}, \quad m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \quad (22.3.7b)$$

Como una aplicación concreta de (22.3.7) consideramos las colisiones elásticas de dos partículas,  $|f\rangle = |\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2\rangle$  y calculamos la sección eficaz diferencial,  $d\sigma/d\Omega$ , en el centro de masas. Para ello hay que integrar (22.3.7) a todos los momentos finales sujetos a la condición de que el ángulo de  $\mathbf{p}'_1$  y  $\mathbf{p}_1$  sea  $\theta$ , es decir

$$\frac{\mathbf{p}'_1 \mathbf{p}_1}{p'_1 p_1} = \cos \theta$$

y que el ángulo azimutal de  $\mathbf{p}'_1$ ,  $\phi_{\mathbf{p}'_1}$ , sea  $\phi$ . Esto se puede implementar multiplicando por las deltas de Dirac

$$\delta\left(\frac{\mathbf{p}'_1 \mathbf{p}_1}{p'_1 p_1} - \cos \theta\right), \quad \delta(\phi_{\mathbf{p}'_1} - \phi)$$

e integrando sin ninguna limitación (que ya impondrán automáticamente las deltas). Tenemos pues,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \int d\sigma \delta\left(\frac{\mathbf{p}'_1 \mathbf{p}_1}{p'_1 p_1} - \cos \theta\right) \delta(\phi_{\mathbf{p}'_1} - \phi)$$

y, sustituyendo (22.3.7),

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(2\pi\hbar)^2}{v_{12}} |T(i \rightarrow f)|^2 I.$$

La integral  $I$  es<sup>5</sup>

$$I = \int d^3p'_1 d^3p'_2 \delta(E_f - E_i) \delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i) \delta\left(\frac{\mathbf{p}'_1 \mathbf{p}_1}{p'_1 p_1} - \cos \theta\right) \delta(\phi_{\mathbf{p}'_1} - \phi).$$

<sup>5</sup> A integrales del tipo de la  $I$  se las conoce como *integrales de espacio de fases*.

El cálculo de  $I$  no es difícil, aunque presenta algunos puntos de interés. En el c.m.,  $\mathbf{P}_i = 0$  luego podemos integrar  $\int d^3 p'_2$  con ayuda de la delta de conservación de momento sin más que poner  $\mathbf{p}'_2 = -\mathbf{p}'_1$ . Sustituyendo además las energías,

$$I = \int d^3 p'_1 \delta \left( \frac{\mathbf{p}'_1 \mathbf{p}_1}{p'_1 p_1} - \cos \theta \right) \delta(\phi_{\mathbf{p}'_1} - \phi) \delta \left( \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_1^2}{2m_2} - \frac{p'^2_1}{2m_1} - \frac{p'^2_1}{2m_1} \right).$$

Escogiendo el eje  $OZ$  a lo largo de  $\mathbf{p}_1$  y pasando a polares,

$$I = \int_0^{2\pi} d\phi_{\mathbf{p}'_1} \int_{-1}^{+1} d \cos \theta_{\mathbf{p}'_1} \int_0^\infty dp'_1 p'^2_1 \\ \times \delta \left( \frac{\mathbf{p}'_1 \mathbf{p}_1}{p'_1 p_1} - \cos \theta \right) \delta(\phi_{\mathbf{p}'_1} - \phi) \delta \left( \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_1^2}{2m_2} - \frac{p'^2_1}{2m_1} - \frac{p'^2_1}{2m_1} \right).$$

Todas las integrales se realizan trivialmente con las deltas y nos queda

$$I = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} p_1 = m p_1.$$

Por tanto,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (2\pi\hbar m)^2 |T(i \rightarrow f)|^2, \quad (22.3.8)$$

como era de esperar, dada la relación (22.2.14), que queda así comprobada.

EJERCICIO: Rehacer el cálculo cuando las partículas finales tienen masas  $m'_a$  distintas de las iniciales (en este caso, se dice que el choque es *casi-elástico*). Comprobar que el resultado es, en el c.m.,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (2\pi\hbar m')^2 \frac{v'}{v_{12}} |T(i \rightarrow f)|^2, \quad \frac{m'_1 m'_2}{m'_1 + m'_2}, \quad v' = p'_2/m' \quad \bullet \quad (22.3.8)$$



### 23.4. Unitariedad de la matriz $S$ . Teorema óptico generalizado

Dado que la matriz  $S$  es el límite del operador evolución temporal, y que éste es unitario, la matriz  $S$  también lo será:

$$\hat{S}^\dagger = \hat{S}^{-1}. \quad (22.4.1)$$

Veamos ahora cómo esto nos lleva a una generalización del teorema óptico. Escribiendo (22.4.1) en términos de  $\hat{\mathcal{M}}$  (definido en (22.2.6)), y tomando elementos de matriz entre estados  $|i\rangle$ ,  $|i'\rangle$  tenemos

$$\frac{1}{i} \langle i' | (\hat{\mathcal{M}} - \hat{\mathcal{M}}^\dagger) | i \rangle = \langle i' | \hat{\mathcal{M}}^\dagger \hat{\mathcal{M}} | i \rangle. \quad (22.4.2)$$

Consideramos ahora todos los estados finales posibles  $|f\rangle$  de forma que

$$\sum_f |f\rangle \langle f| = 1.$$

Por supuesto esta notación es simbólica; los  $|f\rangle$  forman un continuo y la suma es en realidad una integral múltiple. Insertando esta suma en el miembro de la derecha de (22.4.2), y con algunas manipulaciones sencillas, obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{i} \langle i' | (\hat{\mathcal{M}} - \hat{\mathcal{M}}^\dagger) | i \rangle &= \frac{1}{i} \delta(E_{i'} - E_i) \delta(\mathbf{P}_{i'} - \mathbf{P}_i) \{T(i \rightarrow i') - T^*(i \rightarrow i')\} \\ &= \langle i' | \hat{\mathcal{M}}^\dagger \hat{\mathcal{M}} | i \rangle = \sum_f \langle i' | \hat{\mathcal{M}}^\dagger | f \rangle \langle f | \hat{\mathcal{M}} | i \rangle \\ &= \sum_f \delta(E_{i'} - E_f) \delta(\mathbf{P}_{i'} - \mathbf{P}_f) \delta(E_f - E_i) \delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i) T^*(i' \rightarrow f) T(i \rightarrow f) \\ &= \delta(E_{i'} - E_i) \delta(\mathbf{P}_{i'} - \mathbf{P}_i) \sum_f T^*(i' \rightarrow f) T(i \rightarrow f) \delta(E_f - E_i) \delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i). \end{aligned}$$

Cancelando las deltas comunes,

$$\frac{1}{2i} \{T(i \rightarrow i') - T^*(i \rightarrow i')\} = \frac{1}{2} \sum_f T^*(i' \rightarrow f) T(i \rightarrow f) \delta(E_f - E_i) \delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i). \quad (22.4.3)$$

Tomando  $i = i'$ , esto se convierte en la generalización del teorema óptico:

$$\text{Im } T(i \rightarrow i) = \frac{1}{2} \sum_f |T(i \rightarrow f)|^2 \delta(E_f - E_i) \delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i). \quad (22.4.4)$$

Podemos escribir esto de forma más útil considerando que los estados  $|f\rangle$  son estados multiparticulares  $|\mathbf{p}'_1, \dots, \mathbf{p}'_n\rangle$  de forma que

$$\sum_f \leftrightarrow \sum_n \int d^3 p'_1 \dots d^3 p'_n.$$

De (22.3.7a) vemos que la *sección eficaz total*, esto es, la sección eficaz para que  $i$  vaya a cualquier estado final posible, es

$$\sigma_{\text{tot}} = \sum_f d\sigma = \frac{(2\pi\hbar)^2}{v_{12}} \sum_{\pi} \int d^3p'_1 \dots d^3p'_n \delta(E_f - E_i) \delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i) |T(i \rightarrow f)|^2. \quad (22.4.5)$$

Comparando con (22.4.4), tenemos que

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{2(2\pi\hbar)^2}{v_{12}} \text{Im} T(i \rightarrow i). \quad (22.4.6)$$

**EJERCICIO:** Considerar el caso en que los únicos estados finales son aquellos con las mismas partículas que las iniciales, esto es, un choque elástico, de manera que

$$\sum_f = \int d^3p'_1 d^3p'_1.$$

Comprobar que, en este caso, el teorema óptico (22.4.6) se reduce al dado por la ecuación (21.5.8) •

La conexión física entre ambas versiones del teorema óptico, (21.5.8) y (22.4.6) es como sigue. La ecuación (22.4.6) se ha obtenido de la unitariedad de  $\hat{S}$  que, a su vez, se debe a la del operador evolución temporal,

$$\hat{U}(t_2, t_1) = \exp \frac{i}{\hbar} (t_1 - t_2) \hat{H}.$$

Esta última es equivalente al carácter hermitico del hamiltoniano,  $\hat{H}$ . El teorema óptico (21.5.8) se obtuvo porque los desfases  $\delta_l$  son reales, lo que también se debe a que el hamiltoniano es hermitico.

## 22.5. Invariancia bajo inversión temporal.

### Balance detallado

Si la interacción responsable de un proceso de dispersión es invariante bajo inversión temporal (sec. 15.3), esto tiene consecuencias para la matriz  $S$ . La condición de invariancia del hamiltoniano,  $\hat{T}\hat{H}\mathcal{T}^{-1} = \hat{H}$ , implica

$$\hat{\mathcal{T}} e^{-i(t_2-t_1)\hat{H}/\hbar} \mathcal{T}^{-1} = e^{+i(t_2-t_1)\hat{H}/\hbar},$$

dado el carácter *antiunitario* de  $\mathcal{T}$ . Por tanto,

$$\hat{\mathcal{T}} \hat{S} \mathcal{T}^{-1} = \hat{S}^{-1} = \hat{S}^\dagger. \quad (22.5.1a)$$

y para  $\mathcal{M}$ ,

$$\hat{\mathcal{T}} \hat{\mathcal{M}} \mathcal{T}^{-1} = -\hat{\mathcal{M}}^\dagger. \quad (22.5.1b)$$

Recordando las propiedades de transformación bajo  $\mathcal{T}$  del momento y del espín, ecuaciones (15.2.4, 5), tenemos

$$\hat{\mathcal{T}}|\mathbf{p}, s_3\rangle = \eta_T|-\mathbf{p}, -s_3\rangle. \quad (22.5.2)$$

Según esto, y considerando colisiones de dos partículas dando dos partículas,

$$|i\rangle = |\mathbf{p}_1, s_{13}; \mathbf{p}_2, s_{23}\rangle, \quad |f\rangle = |\mathbf{p}'_1, s'_{13}; \mathbf{p}'_2, s'_{23}\rangle$$

encontramos que

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}'_1, s'_{13}; \mathbf{p}'_2, s'_{23} | \hat{S} | \mathbf{p}_1, s_{13}; \mathbf{p}_2, s_{23} \rangle &= \langle f | \hat{\mathcal{T}}^{-1} \hat{\mathcal{T}} \hat{S} \hat{\mathcal{T}}^{-1} \hat{\mathcal{T}} | i \rangle = \langle \hat{\mathcal{T}}(f) | \hat{S}^\dagger | \hat{\mathcal{T}}(i) \rangle^* \\ &= \eta_{T_1}^* \eta_{T_2}^* \eta'_{T_1} \eta'_{T_2} \langle -\mathbf{p}'_1, -s'_{13}; -\mathbf{p}'_2, -s'_{23} | \hat{S}^\dagger | -\mathbf{p}_1, -s_{13}; -\mathbf{p}_2, -s_{23} \rangle^* \\ &= \eta_{T_1}^* \eta_{T_2}^* \eta'_{T_1} \eta'_{T_2} \langle -\mathbf{p}_1, -s_{13}; -\mathbf{p}_2, -s_{23} | \hat{S} | -\mathbf{p}'_1, -s'_{13}; -\mathbf{p}'_2, -s'_{23} \rangle. \end{aligned} \quad (22.5.3)$$

Hemos usado (22.5.2) así como la definición del adjunto para operadores antiunitarios,

$$\langle \Phi | \hat{\mathcal{T}}^\dagger | \Psi \rangle = \langle \hat{\mathcal{T}}(\Phi) | \Psi \rangle^*.$$

Si tenemos en cuenta (22.2.8), que escribimos explícitamente como

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}'_1, s'_{13}; \mathbf{p}'_2, s'_{23} | \hat{S} | \mathbf{p}_1, s_{13}; \mathbf{p}_2, s_{23} \rangle \\ = i\delta(E_f - E_i)\delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i)T(\mathbf{p}_1, s_{13}; \mathbf{p}_2, s_{23} \rightarrow \mathbf{p}'_1, s'_{13}; \mathbf{p}'_2, s'_{23}), \end{aligned}$$

la ecuación (22.5.3) nos dice que

$$\begin{aligned} T(\mathbf{p}_1, s_{13}; \mathbf{p}_2, s_{23} \rightarrow \mathbf{p}'_1, s'_{13}; \mathbf{p}'_2, s'_{23}) \\ = \eta T(-\mathbf{p}'_1, -s'_{13}; -\mathbf{p}'_2, -s'_{23} \rightarrow -\mathbf{p}_1, -s_{13}; -\mathbf{p}_2, -s_{23}); \end{aligned} \quad (22.5.4)$$

$\eta = \eta_{T_1}^* \eta_{T_2}^* \eta'_{T_1} \eta'_{T_2}$  es una fase. Hemos encontrado que, salvo esta fase, la amplitud para la colisión  $i \rightarrow f$  es la misma que para la colisión  $\bar{f} \rightarrow \bar{i}$  donde en  $\bar{i}$ ,  $\bar{f}$  hemos cambiado el signo de los momentos y terceras componentes del espín. Este resultado se conoce como *principio del balance detallado*.

## 22.6. Dispersión por varias interacciones

En prácticamente todo lo que precede hemos supuesto que en un proceso de dispersión tanto el proyectil como el blanco se encontraban libres de interacción mucho antes y mucho después de la colisión; pero hay situaciones en las que esto no es así. Por ejemplo, en el problema P.21.6 aparece un caso sencillo de dispersión por estados ligados. Pero, incluso cuando proyectil y blanco son asintóticamente libres, puede ser útil modificar nuestro formalismo en situaciones en las que la interacción consta de dos términos,  $\hat{H}_I = \hat{V} + \hat{H}_1$ , especialmente si somos capaces de resolver exactamente el hamiltoniano  $\hat{H}^{(0)} = \hat{H}_0 + \hat{V}$  ( $\hat{H}_0$  es el hamiltoniano libre) y al término  $\hat{H}_1$  lo consideramos como una perturbación. Este tipo de procesos (dispersión por dos interacciones) es el que vamos a estudiar ahora; en el próximo capítulo lo aplicaremos a dos procesos importantes, el conocido como *Bremsstrahlung* y el efecto fotoeléctrico.

Consideramos la ecuación de Lippmann-Schwinger, que escribimos como

$$|\psi^\pm\rangle = |\psi_0\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i0} \hat{H}_I |\psi^\pm\rangle. \quad (22.6.1)$$

En términos de los  $|\psi^+\rangle$  tenemos la amplitud de transición (cf. (22.2.15))

$$T(i \rightarrow f) = \frac{-1}{\hbar^3 (2\pi)^2} \langle \psi_{0f} | \hat{H}_I | \psi^+ \rangle. \quad (22.6.2)$$

Junto con (22.6.1), consideramos las ecuaciones de Lippmann-Schwinger que se obtendrían si omitimos la interacción  $\hat{H}_1$  de  $\hat{H}_I = \hat{V} + \hat{H}_1$ :

$$|\varphi^\pm\rangle = |\psi_0\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i0} \hat{V} |\varphi^\pm\rangle. \quad (22.6.3)$$

*Ex hypothesi* somos capaces de resolver (22.6.3) y, por tanto, suponemos conocidas las  $|\varphi^\pm\rangle$ .

Recordando la solución iterativa de (22.6.1), ecuación (22.1.5), tenemos

$$\begin{aligned} T(i \rightarrow f) &= \frac{-1}{\hbar^3 (2\pi)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \langle \psi_{0f} | (\hat{V} + \hat{H}_1)^n \left\{ \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0} (\hat{V} + \hat{H}_1) \right\}^n |\psi_{0i}\rangle \\ &= \frac{-1}{\hbar^3 (2\pi)^2} \sum_{n=1}^{\infty} \langle \psi_{0f} | (E - \hat{H}_0 + i0) \left\{ \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0} (\hat{V} + \hat{H}_1) \right\}^n |\psi_{0i}\rangle. \end{aligned}$$

Trabajamos a primer orden en la perturbación  $\hat{H}_1$ . En este caso escribimos

$$\begin{aligned} T(i \rightarrow f) &\simeq T^{(0)}(i \rightarrow f) + T^{(1)}(i \rightarrow f), \\ T^{(0)}(i \rightarrow f) &= \frac{-1}{\hbar^3 (2\pi)^2} \langle \psi_{0f} | \hat{V} | \varphi_i^+ \rangle \end{aligned} \quad (22.6.4a)$$

y

$$\begin{aligned}
 T^{(1)}(i \rightarrow f) &= \frac{-1}{\hbar^3(2\pi)^2} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\nu=0}^{n-1} \langle \psi_{0f} | (E - \hat{H}_0 + i0) \left( \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0} \hat{V} \right)^{\nu} \\
 &\quad \times \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0} \hat{H}_1 \left( \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0} \hat{V} \right)^{n-\nu-1} | \psi_{0i} \rangle \\
 &= \frac{-1}{\hbar^3(2\pi)^2} \\
 &\quad \times \sum_{\nu,\nu'} \left\langle \left( \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0} \hat{V} \right)^{\nu} \psi_{0f} | \hat{H}_1 | \left( \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0} \hat{V} \right)^{n-\nu-1} \psi_{0i} \right\rangle
 \end{aligned}$$

y hemos utilizado que

$$\left( \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0} \right)^{\dagger} = \left( \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 - i0} \right).$$

Rearreglando la suma,

$$\begin{aligned}
 T^{(1)}(i \rightarrow f) &= \frac{-1}{\hbar^3(2\pi)^2} \\
 &\quad \times \left\langle \sum_{\nu} \left( \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0} \hat{V} \right)^{\nu} \psi_{0f} | \hat{H}_1 | \sum_{\mu} \left( \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0} \hat{V} \right)^{\mu} \psi_{0i} \right\rangle.
 \end{aligned}$$

Identificando los vectores del *sandwich* con los  $|\varphi_{i,f}^{\pm}\rangle$  de (22.6.3), obtenemos finalmente

$$T^{(1)}(i \rightarrow f) = \frac{-1}{\hbar^3(2\pi)^2} \langle \varphi_f^- | \hat{H}_1 | \varphi_i^+ \rangle, \quad (22.6.4b)$$

un resultado muy intuitivo. Los órdenes siguientes se calcularían de un modo similar; los detalles pueden encontrarse en el texto de Goldberger y Watson (1965), p. 202.

## 22.7. Colisiones relativistas

El formalismo desarrollado en las secciones precedentes es fácilmente generalizable a colisiones relativistas. Consideremos una partícula con momento  $\mathbf{p}$ ; suprimimos otros posibles números cuánticos, que no juegan ningún papel aquí. Hasta ahora hemos tomado una normalización no-relativista,

$${}_{\text{NR}}\langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle_{\text{NR}} = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \quad (22.7.1)$$

Si normalizamos los estados de forma invariante relativista,

$${}_{\text{R}}\langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle_{\text{R}} = 2p_0 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \quad (22.7.2)$$

donde  $p^0$  es la energía relativista. En unidades naturales,  $\hbar = c = 1$  en las que trabajamos en esta sección,  $p^0 = \sqrt{m^2 + \mathbf{p}^2}$ . (22.7.2) es invariante Lorentz.

Podemos tomar elementos de matriz de la matriz  $S$  entre estados no-relativistas, y definimos

$${}_{\text{NR}}\langle f | \hat{S} | i \rangle_{\text{NR}} = {}_{\text{NR}}\langle f | i \rangle_{\text{NR}} + i\delta(E_f - E_i)\delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i)T_{\text{NR}}(i \rightarrow f) \quad (22.7.3)$$

o entre estados relativistas y entonces

$${}_{\text{R}}\langle f | \hat{S} | i \rangle_{\text{R}} = {}_{\text{R}}\langle f | i \rangle_{\text{R}} + i\delta(E_f - E_i)\delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i)F(i \rightarrow f) \quad (22.7.4)$$

(en el caso relativista llamamos  $F$  a la amplitud de transición). De (22.7.3,4) y (22.7.1,2),

$$|\mathbf{p}\rangle_{\text{R}} \equiv (2p^0)^{1/2}|\mathbf{p}\rangle_{\text{NR}}$$

y

$$\begin{aligned} & F(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 \rightarrow \mathbf{p}'_1, \dots, \mathbf{p}'_n) \\ &= \sqrt{2p_1^0} \sqrt{2p_2^0} \sqrt{2p_1'^0} \dots \sqrt{2p_n'^0} T_{\text{NR}}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 \rightarrow \mathbf{p}'_1, \dots, \mathbf{p}'_n). \end{aligned} \quad (22.7.5)$$

La deducción de (22.4.5) sigue siendo válida; únicamente debemos tener en cuenta que la velocidad relativa  $v_{12}$  tiene un valor distinto que en el caso no-relativista. Concretamente tenemos que tomar, en el c.m.,

$$v_{12} = \frac{\lambda^{1/2}(s, m_1^2, m_2^2)}{2p_1^0 p_2^0}$$

donde la forma cuadrática  $\lambda$  se define por

$$\lambda(a, b, c) = a^2 + b^2 + c^2 - 2ab - 2ac - 2bc$$

y  $s = (p_1^0 + p_2^0)_{\text{c.m.}}^2$  es el cuadrado de la energía en el centro de masas. De aquí,

$$d\sigma = \frac{2\pi^2}{\lambda^{1/2}(s, m_1^2, m_2^2)} |F(i \rightarrow f)|^2 \delta(E_f - E_i) \delta(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i) \frac{d^3 p'_1}{p_1'^0} \dots \frac{d^3 p'_n}{p_n'^0}. \quad (22.7.6)$$

Escritos de esta manera, tanto  $F$  como  $d\sigma$  son invariantes relativistas.

La sección eficaz diferencial para colisión de dos partículas de masas  $m_a$  produciendo otras dos, de masas  $m'_a$ ,  $a = 1, 2$ , es

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{c.m.} = \frac{\pi^2}{4s} \frac{\lambda^{1/2}(s, m_1', m_2')}{\lambda^{1/2}(s, m_1^2, m_2^2)} |F(i \rightarrow f)|^2; \quad (22.7.7)$$

si sólo hay posibilidad de choque elástico, se puede expresar  $F$  en términos de desfases; para partículas sin espín,

$$F(i \rightarrow f) = \frac{2s^{1/2}}{\pi k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \text{sen } \delta_l(k) e^{i\delta_l(k)}, \quad (22.7.8)$$

$$k = \frac{\lambda^{1/2}(s, m_1^2, m_2^2)}{2s^{1/2}}.$$

De una forma análoga se puede evaluar la diferencial de anchura de desintegración en el caso relativista, obteniendo, para desintegración de una partícula de masa  $m$  en el sistema de referencia en el que está en reposo,

$$d\Gamma(i \rightarrow f) = \frac{1}{4\pi m} |F(i \rightarrow f)|^2 \delta(E_f - m) \delta(\mathbf{P}_f) \frac{d^3 p'_1}{p_1'^0} \dots \frac{d^3 p'_n}{p_n'^0} \quad (22.7.9)$$

Finalmente, la fórmula

$$\hat{S} = T \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \hat{H}_{DI}(t) \right\}$$

es también válida en el caso relativista.

### PROBLEMAS

P.22.1. Calcular la amplitud de transición para un potencial separable,  $\hat{V} = \lambda|\xi\rangle\langle\xi|$ , definido por

$$\hat{V}\psi(\mathbf{r}) = \lambda \left( \int d^3 r' \xi^*(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \right) \xi(\mathbf{r}).$$

$\xi$  es una función dada, que podemos suponer normalizada a  $\|\xi\| = 1$ .

*Solución.* De (22.1.5),

$$|\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle = |\psi_{0\mathbf{k}}\rangle + \lambda c_+ \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H} + i0} |\xi\rangle; \quad c_+ = \langle\xi|\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle.$$

Multiplicando escalarmente por  $\langle\xi|$  podemos resolver para  $c_+$ :

$$c_+ = \left\{ 1 - \lambda \langle\xi| (E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 + i0)^{-1} |\xi\rangle \right\}^{-1} \langle\xi|\psi_{0\mathbf{k}}\rangle.$$

Sustituyendo más arriba, tenemos  $|\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle$  y, por tanto,  $T(i \rightarrow f)$  en término de cantidades conocidas.

P.22.2. Calcúlese la probabilidad de absorción de fotones por el átomo de hidrógeno en el estado fundamental.

*Solución.* Utilícese el principio del balance detallado (debidamente generalizado a nuestro caso) y el cálculo de la amplitud de desintegración de las secciones 20.4,5.

P.22.3. Demuéstrese (22.1.7).

*Solución.* El cálculo de  $G_{\mathbf{k}}^+$  es de interés por su similitud con otros cálculos de funciones de Green y de propagadores. Definiendo  $\rho = |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|$  y pasando a polares con el eje  $OZ$  paralelo a  $\mathbf{r}' - \mathbf{r}$ , la integral en las variables angulares es inmediata y nos queda

$$G_{\mathbf{k}}^+(\rho) = \frac{1}{i\rho(2\pi)^2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty dk' k' \frac{e^{ik'\rho} - e^{-ik'\rho}}{k'^2 - k^2 + i\epsilon}.$$

Cambiando a la variable  $z = k'\rho$  y utilizando la simetría del integrando para extender la integral de  $-\infty$  a  $+\infty$ ,

$$G_{\mathbf{k}}^+(\rho) = \frac{1}{2i\rho(2\pi)^2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dz \frac{ze^{iz}}{\rho^2 k^2 - z^2 + i\epsilon} + \int_{-\infty}^{+\infty} dz \frac{ze^{-iz}}{\rho^2 k^2 - z^2 + i\epsilon} \right\}$$

En la primera integral podemos cerrar un circuito,  $C_+$ , añadiendo un semicírculo de gran radio en el semiplano superior; en la segunda, cerramos por el semiplano inferior a  $C_-$ . Por el teorema de los residuos tenemos, para la primera integral,  $\int_{C_+} = 2\pi i \text{Res}_{\text{Im } z > 0}$  y  $\text{Res}_{\text{Im } z > 0}$  es el residuo en el (único) polo situado en el semiplano superior, en  $z_+ = k\rho + i\epsilon$ . En éste,  $\text{Res}_{\text{Im } z > 0} = -\rho k e^{i\rho k} / 2\rho k$ . La contribución de  $C_-$  es idéntica a esta. Por tanto, y como queríamos demostrar,

$$G_{\mathbf{k}}^+(\rho) = -\frac{1}{i\rho(2\pi)^2} \pi i e^{i\rho k} = \frac{-1}{4\pi\rho} e^{i\rho k}.$$



## Colisiones con emisión y absorción de radiación

### 23.1. Bremsstrahlung

La palabra *Bremsstrahlung* quiere decir *radiación de frenado* en alemán, y se utiliza universalmente para describir procesos en los que una partícula cargada emite radiación al interactuar con un centro dispersor (en particular, al frenarse). Supondremos que este centro dispersor interactúa con la partícula a través de un potencial,  $V$ , al que consideraremos suficientemente débil para poderlo tratar en la aproximación de Born. El estado inicial contendrá la partícula (que, de momento, suponemos sin espín) y queremos calcular la probabilidad de que, al interactuar con el centro dispersor, el proyectil radie un fotón. Denotamos por  $\mathbf{k}$  al vector número de ondas del proyectil antes de interactuar, por  $\mathbf{k}'$  al vector número de ondas de dicho proyectil después de interactuar, y después de emitir el fotón,  $\mathbf{k}_\gamma, \eta$  serán, respectivamente, el vector número de ondas y la helicidad del fotón emitido. Suponemos al centro de dispersión, o blanco, muy pesado con respecto al proyectil, de forma que no tengamos que distinguir entre sistemas de referencia lab y c.m.

Tenemos aquí un caso típico de dispersión con dos interacciones. El hamiltoniano de interacción total, en efecto, consta de dos piezas: el potencial,  $V$ , y la interacción de la radiación con la materia. De (20.3.3) tenemos, con  $Qe$  la carga de la partícula (aquí  $e$  denota la carga del protón), y  $\mu$  su momento magnético,

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{P}} - \frac{Qe}{c} \hat{\mathbf{A}} \right)^2 + V - \frac{2\mu}{\hbar} \mathbf{S} \hat{\mathbf{B}} + \hat{H}_{\text{rad}}. \quad (23.1.1)$$

Si despreciamos, como hacemos en un principio, la interacción con el espín, tenemos la interacción efectiva (en el gauge de Coulomb)

$$\hat{H}_{I,\text{ef}} = V + \hat{H}_1, \quad (23.1.2a)$$

$$\hat{H}_1 = -\frac{Qe}{mc} \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{P}}_e = -\frac{Qe}{mc} \hat{\mathbf{P}}_e \hat{\mathbf{A}}. \quad (23.1.2b)$$

Vamos a aplicar el formalismo desarrollado en la sección 22.6. El estado final será de la forma

$$|\varphi_f^-\rangle = \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_\gamma, \eta) |\varphi_{\mathbf{k}'}^-\rangle; \quad (23.1.3)$$

por tanto, el término  $T^{(0)}(i \rightarrow f)$  en (22.6.4) se anula ya que  $V$  no puede producir un fotón y nos queda, simplemente,

$$T(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}' + \gamma(\mathbf{k}_\gamma, \eta)) \simeq T^{(1)}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}' + \gamma(\mathbf{k}_\gamma, \eta)) \quad (23.1.4)$$

donde, de (22.6.4),

$$T^{(1)}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}' + \gamma(\mathbf{k}_\gamma, \eta)) = \frac{Qe}{(2\pi)^2 \hbar^3 mc} \langle \varphi_{\mathbf{k}'}^- | \hat{a}(\mathbf{k}_\gamma, \eta) \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{P}} | \varphi_{\mathbf{k}}^+ \rangle, \quad (23.1.5)$$

y recordamos que las  $\varphi^\pm$  son las soluciones de las ecuaciones de Lippmann-Schwinger con sólo la interacción dada por  $V$ .

Después de un cálculo similar al de la sección 20.4, (23.1.5) se convierte en

$$T^{(1)}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}' + \gamma(\mathbf{k}_\gamma, \eta)) = \frac{Qe}{(2\pi)^3 m \hbar^2 \sqrt{E_\gamma}} \epsilon^*(\mathbf{k}_\gamma, \eta) \times \int d^3r \varphi_{\mathbf{k}'}^-(\mathbf{r})^* e^{-i\mathbf{k}_\gamma \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{P}} \varphi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}); \quad (23.1.6)$$

$$E_\gamma = \hbar c k_\gamma.$$

Para calcular las  $\varphi^\pm$  trabajamos, como ya dijimos, en la aproximación de Born para  $V$ . Escribimos  $\varphi_{\mathbf{k}}^\pm = \psi_{0\mathbf{k}} + \chi_{\mathbf{k}}^\pm$ . Esto produce tres tipos de términos en (23.1.6). Tenemos términos con  $\dots \psi_{0\mathbf{k}'} \dots \psi_{0\mathbf{k}}$ . Es fácil ver que éstos son nulos. Los términos con  $\dots \chi_{\mathbf{k}}^\pm \dots \chi_{\mathbf{k}}^\pm$  son de segundo orden en  $V$  y, por tanto, los despreciamos. Sólo nos quedan los términos mixtos, tipo  $\dots \psi_{0\mathbf{k}'} \dots \chi_{\mathbf{k}}^\pm$ . Por tanto, en esta aproximación tenemos

$$T \simeq T^{(1)} \simeq T_B(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}' + \gamma(\mathbf{k}_\gamma, \eta)) = \frac{Qe}{(2\pi)^3 m \hbar^2 \sqrt{E_\gamma}} \epsilon^*(\mathbf{k}_\gamma, \eta) \left\{ \Phi_1 + \Phi_2 \right\} \quad (23.1.7a)$$

y hemos definido

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= \int d^3r \psi_{0\mathbf{k}'}(\mathbf{r})^* e^{-i\mathbf{k}_\gamma \cdot \mathbf{r}} (-i\hbar \nabla) \chi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}), \\ \Phi_2 &= \int d^3r \chi_{\mathbf{k}'}^-(\mathbf{r})^* e^{-i\mathbf{k}_\gamma \cdot \mathbf{r}} (-i\hbar \nabla) \psi_{0\mathbf{k}}(\mathbf{r}); \quad \psi_{0\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (23.1.7b)$$

A primer orden en  $V$ ,

$$|\chi_{\mathbf{k}}^\pm\rangle \simeq \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} V |\psi_{0\mathbf{k}}\rangle$$

y, por tanto, haciendo actuar  $\hat{H}_0$  a la izquierda en  $\Phi_1$  y a la derecha en  $\Phi_2$ ,

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= \hbar(\mathbf{k}' + \mathbf{k}_\gamma) \frac{(2\pi)^2 \hbar^3}{E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}' + \mathbf{k}_\gamma)} T_B^{(0)}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}' + \mathbf{k}_\gamma), \\ \Phi_2 &= \hbar(\mathbf{k}' - \mathbf{k}_\gamma) \frac{(2\pi)^2 \hbar^3}{E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}' - \mathbf{k}_\gamma)} T_B^{(0)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_\gamma \rightarrow \mathbf{k}'). \end{aligned} \quad (23.1.7c)$$

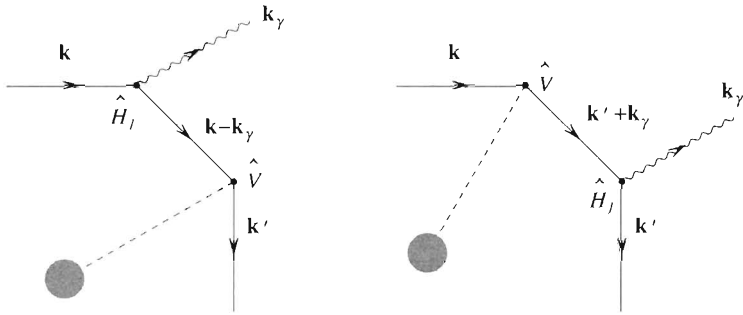


FIGURA 23.1.1. Representación gráfica del Bremsstrahlung.  
Línea de puntos: actuación del potencial  $V$ .

Hemos definido  $E(\mathbf{k}) = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$  y  $T_B^{(0)}$  es la amplitud de dispersión de los proyectiles en el potencial  $V$  como si no hubiesen emitido radiación, en la aproximación de Born:

$$T_B^{(0)}(\mathbf{k}_1 \rightarrow \mathbf{k}_2) = -\frac{1}{\hbar^3 (2\pi)^2} \langle \psi_{0\mathbf{k}_2} | V | \psi_{0\mathbf{k}_1} \rangle.$$

En esta aproximación las dos  $T_B^{(0)}$  de (23.1.7c) son, de hecho, iguales ya que  $T_B^{(0)}(\mathbf{k}_1 \rightarrow \mathbf{k}_2)$  sólo depende de  $\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$ .

Las expresiones (23.1.7) pueden visualizarse de forma muy gráfica (ver la figura 23.1.1): la amplitud de dispersión se factoriza en la dispersión por  $V$ , y la emisión de radiación. Podemos tener que primero actúa  $V$ , y luego se emite el fotón a través de  $\hat{H}_1$  (término en  $\Phi_1$ ) o que primero se emite el fotón, y luego la partícula interacciona con  $V$  (término en  $\Phi_2$ ). La amplitud de transición es la suma de ambas posibilidades. A diagramas como los de la figura 23.1.1 se les llama *diagramas de Feynman*.

Si sustituimos ahora las expresiones explícitas para las energías tenemos la expresión final para la amplitud de Bremsstrahlung,

$$T_B(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}' + \gamma(\mathbf{k}_\gamma, \eta)) = T_B^{(0)}(\mathbf{k}_\gamma + \mathbf{k}' - \mathbf{k}) \Phi_{\text{rad}},$$

$$\Phi_{\text{rad}} = \frac{Qe\hbar^2}{2\pi m E_\gamma^{3/2}} \epsilon^*(\mathbf{k}_\gamma, \eta) \left\{ \frac{\mathbf{k}}{D'} - \frac{\mathbf{k}'}{D} \right\}, \quad (23.1.8)$$

$$D' = 1 - \hbar \frac{k_\gamma + 2k' \cos \theta'_\gamma}{2mc}, \quad D = 1 + \hbar \frac{k_\gamma - 2k \cos \theta_\gamma}{2mc}.$$

Aquí  $\theta_\gamma$ ,  $\theta'_\gamma$  son los ángulos que  $\mathbf{k}_\gamma$  forma con, respectivamente,  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{k}'$ .

La sección eficaz diferencial viene dada por (23.1.7), teniendo en cuenta que el estado del fotón está normalizado a  $\langle \mathbf{k}', \eta' | \mathbf{k}, \eta \rangle = \delta_{\eta\eta'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ . Tenemos pues, con  $E_b$  denotando la energía y  $\mathbf{P}_b$  el momento del blanco antes de la colisión y con lo mismo con primas después de la colisión,

$$d\sigma(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}' + \gamma(\mathbf{k}_\gamma, \eta); b) = \frac{(2\pi\hbar)^2}{v} |T|^2 \delta \left( \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + \hbar c k_\gamma + E'_b - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_b \right) \\ \times \delta(\hbar \mathbf{k} + \mathbf{P}_b - \hbar \mathbf{k}' - \hbar \mathbf{k}_\gamma - \mathbf{P}'_b) d^3 \hbar k' d^3 k_\gamma d^3 P'_b.$$

Si no medimos los momentos del blanco y lo suponemos muy pesado de manera que  $E'_b \simeq E_b$ , la integral en  $d^3 P'_b$  es inmediata y se obtiene

$$d\sigma(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}' + \gamma(\mathbf{k}_\gamma, \eta)) \\ = \left\{ \frac{(2\pi\hbar)^2 \hbar^3}{v} |T_B^{(0)}(\mathbf{k}' + \mathbf{k}_\gamma - \mathbf{k})|^2 \delta(E_{k'} + E_\gamma - E_k) d^3 k' \right\} |\Phi_{\text{rad}}|^2 d^3 k_\gamma$$

donde hemos sustituido ya (23.1.8) y hemos vuelto a la notación  $E_k$  para las energías. Para  $k_\gamma$  pequeño, el término en corchetes coincide con la sección eficaz diferencial de dispersión por el potencial  $V$ , *sin emitir fotones*, que denotamos por  $d\sigma^{(0)}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')/d\Omega$ : también la sección eficaz se factoriza. Sustituyendo  $\Phi_{\text{rad}}$ :

$$\frac{d\sigma(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}' + \gamma(\mathbf{k}_\gamma, \eta))}{d\Omega_{k'}} \underset{k_\gamma \ll 1}{\simeq} \frac{d\sigma^{(0)}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')}{d\Omega_{k'}} \\ \times \frac{Q^2 e^2 \hbar^4}{(2\pi)^2 m^2 E_\gamma^3} \sum_{ij} \epsilon_i^*(\mathbf{k}_\gamma, \eta) \epsilon_j(\mathbf{k}_\gamma, \eta) \left( \frac{k_j}{D'} - \frac{k'_j}{D} \right) \left( \frac{k_j}{D'} - \frac{k'_j}{D} \right) d^3 k_\gamma.$$

En el límite de velocidades pequeñas en comparación con la de la luz, podemos aproximar  $D \simeq D' \simeq 1$ ; nótese que, por ejemplo,  $\hbar k/m$  es  $v_{\text{in}}$ , la velocidad del proyectil antes de la colisión. Si no medimos la helicidad del fotón emitido, ni su dirección, tenemos que sumar sobre  $\eta$  e integrar sobre  $d\Omega_\gamma$ . Si escribimos

$$d^3 k_\gamma = k_\gamma^2 dk_\gamma d\Omega_\gamma = \frac{E_\gamma}{\hbar^3 c^3} E_\gamma^2 dE_\gamma d\Omega_\gamma$$

y utilizamos

$$\sum_{\eta} \epsilon_i^*(\mathbf{k}, \eta) \epsilon_j(\mathbf{k}, \eta) = \delta_{ij} - k_i k_j / k^2,$$

entonces (23.1.9) nos da

$$\frac{d\sigma(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}' + \gamma(E_\gamma))}{d\Omega_{k'} dE_\gamma} \underset{v_{\text{in}} \ll c}{\simeq} \frac{d\sigma^{(0)}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')}{d\Omega_{k'}} \frac{8Q^2 \alpha}{3\pi E_\gamma} \left( \frac{v_{\text{in}}}{c} \right)^2 \sin^2 \frac{\theta_p}{2}, \quad (23.1.10)$$

donde  $\theta_p = \angle(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  y  $v_{\text{in}} = \hbar k/m$ .

Antes de discutir las implicaciones de (23.1.10), vamos a generalizarlo al caso en que las partículas tengan espín  $1/2$ , como ocurre cuando los proyectiles son electrones, protones o neutrones. Esto implica dos modificaciones. En

primer lugar, las funciones de onda tienen una parte espacial y una de espín, lo que escribimos como

$$\varphi^\pm = \varphi^\pm(\mathbf{r})\chi^{(s_3)}$$

con  $s_3$  la tercera componente del espín. En segundo lugar, hay que tener en cuenta el término de interacción con el espín, esto es, reemplazar

$$\hat{H}_1 = -\frac{Qe}{mc} \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{P}}_e \rightarrow \hat{H}_1 = -\frac{Qe}{mc} \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{P}}_e - \frac{2\mu}{\hbar} \underline{\mathbf{S}} \hat{\mathbf{B}}.$$

Para espín  $1/2$ ,  $\underline{\mathbf{S}} = \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma}$ . Escribimos, además,

$$\mu = ge/2mc, \quad \hat{\mathbf{B}} = \nabla \times \hat{\mathbf{A}}.$$

Entonces, y después de un cálculo similar al que hemos hecho, obtenemos que (23.1.8) sigue valiendo reemplazando  $\Phi_{\text{rad}}$  por

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{rad}}^{(s'_3, s_3)} &= \frac{\hbar^2}{2\pi m E_\gamma^{3/2}} \boldsymbol{\epsilon}^*(\mathbf{k}_\gamma, \eta) \\ &\times \chi^{(s'_3)\dagger} \left\{ \left( \frac{\mathbf{k}}{D'} - \frac{\mathbf{k}'}{D} \right) Qe - \frac{i\mu g}{2} \left( \frac{1}{D'} - \frac{1}{D} \right) \mathbf{k}_\gamma \times \boldsymbol{\sigma} \right\} \chi^{(s_3)}. \end{aligned}$$

Si no medimos la polarización ni la dirección del fotón, (23.1.10) se modifica a

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}' + \gamma(E_\gamma))}{d\Omega_{\mathbf{k}'} dE_\gamma} &\underset{v_{\text{in}} \ll c}{\simeq} \frac{d\sigma^{(0)}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')}{d\Omega_{\mathbf{k}'}} \\ &\times \frac{8\alpha}{3\pi E_\gamma} \left\{ Q^2 + g^2 \left( \frac{E_\gamma}{mc^2} \right)^2 \right\} \left( \frac{v_{\text{in}}}{c} \right)^2 \text{sen}^2 \frac{\theta_p}{2}. \end{aligned} \quad (23.1.11)$$

El término proveniente del espín (el que contiene  $g^2$  en esta ecuación) es, como anunciamos, despreciable frente al que no depende del espín, excepto en casos como el de neutrones para los que  $Q_n = 0$  pero  $\mu_n \simeq -1.91\mu_N \neq 0$ .

Volvamos ahora a la expresión (23.1.10); vamos a hacer unos pocos comentarios al respecto. En primer lugar, si intentamos integrar esta expresión a todos los valores de  $E_\gamma$ , obtendremos un resultado divergente, debido al factor  $E_\gamma$  en el denominador. Ésta es la llamada *catástrofe infrarroja*, menos catastrófica si nos damos cuenta de que cualquier detector real tiene un umbral,  $E_{\text{min}}$  de energía mínima de los fotones para que éstos sean detectados. Lo que tiene que ser finito, y lo es, es la sección eficaz *observable*

$$\begin{aligned} \int_{E_{\text{min}}}^{E_{\text{max}}} dE_\gamma \frac{d\sigma(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}' + \gamma(E_\gamma))}{d\Omega_{\mathbf{k}'} dE_\gamma} &\underset{v_{\text{in}} \ll c}{\simeq} \frac{d\sigma^{(0)}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')}{d\Omega_{\mathbf{k}'}} \\ &\times \frac{8Q^2\alpha}{3\pi} \left( \frac{v_{\text{in}}}{c} \right)^2 \left[ \log \frac{E_{\text{max}}}{E_{\text{min}}} \right] \text{sen}^2 \frac{\theta_p}{2}. \end{aligned} \quad (23.1.12)$$

En segundo lugar, (23.1.10, 12) nos dicen que la sección eficaz de radiación es cero para  $\theta_p = 0$  y máxima para  $\theta_p = \pi$ : cuanto más se tuerce la trayectoria

debido a la interacción con  $V$ , más probabilidad hay de emitir radiación (esto explica el nombre de “radiación de frenado”).

Finalmente, se radian sobre todo fotones de baja frecuencia. Si hubiéramos insistido en escribir interacciones en términos de  $\hat{\mathcal{E}}$ ,  $\hat{\mathcal{B}}$  (en lugar de  $\hat{\mathbf{A}}$ ) se pueden dar argumentos generales que prueban que, en este caso, la probabilidad de emitir fotones sería proporcional a  $E_\gamma$ ; un ejemplo de esto lo hemos visto en (23.1.12), donde la contribución del término  $\mu\hat{\mathcal{S}}\hat{\mathcal{B}}$  es de orden relativo  $E_\gamma^2$ . Ésta es una indicación más de que hay que formular la mecánica cuántica en términos de los potenciales.

## 23.2. Efecto fotoeléctrico

### 23.2.1. Efecto fotoeléctrico a baja energía

En el caso de Bremsstrahlung la interacción con el potencial  $V$  se calculó en la aproximación de Born; vamos a estudiar ahora un caso en el que es esencial resolver la interacción con  $V$  exactamente. Concretamente, consideramos el efecto fotoeléctrico en hidrógeno, que representamos simbólicamente por

$$\gamma(\mathbf{k}, \eta) + H(1S) \rightarrow p + e(\mathbf{k}'). \quad (23.2.1)$$

Consideramos que el hidrógeno está en el estado fundamental,  $1S$  y, de momento, hacemos el cálculo para electrones de baja energía,  $\mathbf{k}' \sim 0$ . Consideramos, además, que se puede despreciar el movimiento del protón,  $p$ , ya que su masa es muy grande en comparación con la del electrón, y suponemos que las energías son pequeñas incluso en comparación con la energía en reposo del electrón,  $m_e c^2$  (aproximación no-relativista).

El hamiltoniano del sistema es

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}^{(0)} + \hat{H}_1; \\ \hat{H}^{(0)} &= \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{P}}^2 - \frac{e^2}{r}, \\ \hat{H}_1 &= -\frac{e}{mc} \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{P}}_e. \end{aligned} \quad (23.2.2)$$

Despreciamos la interacción con el espín, y el término cuadrático (en  $\hat{\mathbf{A}}^2$ ).

La fórmula (22.6.4) nos dice ahora que

$$T(i \rightarrow f) \simeq \frac{-1}{\hbar^3 (2\pi)^2} \langle \varphi_{\mathbf{k}'}^- | \hat{H}_1 (2\pi)^{3/2} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \eta) | \psi_{1S} \rangle. \quad (23.2.3a)$$

El término  $T^{(0)}$  también es nulo aquí. El factor  $(2\pi)^{3/2}$  lo hemos incluido para que el estado del fotón, que definimos ahora como

$$|\gamma(\mathbf{k}, \eta)\rangle = (2\pi)^{3/2} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \eta) |0\rangle$$

esté normalizado a la Lippmann–Schwinger,

$$\langle \gamma(\mathbf{k}', \eta') | \gamma(\mathbf{k}, \eta) \rangle = (2\pi)^3 \delta_{\eta\eta'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}');$$

$\psi_{1S}$  es la función de onda del estado fundamental del átomo de hidrógeno.

En (23.2.3a) tenemos, sustituyendo  $\hat{H}_1$  y operando,

$$\langle \varphi_{\mathbf{k}'}^- | \hat{H}_1 \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \eta) | \psi_{1S} \rangle = -\frac{e\sqrt{\hbar}c}{2\pi mc\sqrt{k}} \epsilon(\mathbf{k}, \eta) \langle \varphi_{\mathbf{k}'}^- | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{\mathbf{P}}_e | \psi_{1S} \rangle, \quad (23.2.3b)$$

una expresión ya familiar. A pequeñas energías podemos tomar, como en el cálculo de la desintegración del nivel  $2P$ ,  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \simeq 1$ . La función de onda  $\psi_{1S}$  es

$$\psi_{1S}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi} a_B^{3/2}} e^{-r/a_B}.$$

$\varphi_{\mathbf{k}'}^-$  es la función de onda del electrón final, en el campo coulombiano del protón. Si escogemos el eje  $OZ$  a lo largo de  $\mathbf{k}'$ , podemos usar (16.3.10) y (17.3.9) para escribir

$$\begin{aligned} \varphi_{\mathbf{k}'}^- (\mathbf{r}) &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) R_{k'l}^*(r), \\ R_{k'l}^*(r) &= e^{-2i\delta_l} (2k'r)^l e^{ik'r} e^{\pi/2\alpha_B k'} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(l+1 - ia_B k' + n)}{n! \Gamma(2l+2+n)} (-2ik'r)^n. \end{aligned} \quad (23.2.4)$$

Sustituyendo  $\hat{\mathbf{P}}_e = -i\hbar\nabla$  y  $\psi_{1S}$ ,  $\varphi_{\mathbf{k}'}^-$ , y calculando en polares tenemos,

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{\mathbf{k}'}^- | \hat{\mathbf{P}}_e | \psi_{1S} \rangle &= 2\pi i \hbar \int_{-1}^{+1} d\cos \theta \int_0^{\infty} dr r^2 \varphi_{\mathbf{k}'}^-(\mathbf{r})^* \frac{\mathbf{r}}{a_B r} \psi_{1S}(\mathbf{r}) \\ &= \frac{2\pi i \hbar}{a_B} \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l (2l+1) \int_0^{\infty} dr r R_{k'l}(r) \psi_{1S}(r) \int_{-1}^{+1} d\cos \theta r P_l(\cos \theta). \end{aligned}$$

Escribiendo los componentes de  $\mathbf{r}$  en polares, y utilizando las propiedades de ortogonalidad de los polinomios de Legendre, vemos que sólo el término  $l=1$  en la suma, y la componente  $z$  de  $\mathbf{r}$ , sobreviven y, por tanto,

$$\epsilon(\mathbf{k}, \eta) \langle \varphi_{\mathbf{k}'}^- | \hat{\mathbf{P}}_e | \psi_{1S} \rangle = \epsilon_3(\mathbf{k}, \eta) \frac{4\pi i \hbar}{a_B} \int_0^{\infty} dr r^2 R_{k'1}(r) \psi_{1S}(r). \quad (23.2.5)$$

En esta forma está claro por qué la aproximación de Born es una catástrofe a bajas energías: en efecto,  $R_{k'1}(r)$  contiene un término de la forma  $\exp \pi/2\alpha_B k' = \exp \pi m e^2 / 2\hbar^2 k'$  (cf. (23.2.4)) que, en la aproximación de Born, se reemplaza por la unidad, cuando en el límite  $k' \rightarrow 0$  tiende a infinito. Tenemos pues que utilizar la expresión exacta. De (23.2.4), y para  $k' \rightarrow 0$ ,

$$R_{k'1}(r) \underset{k' \rightarrow 0}{\simeq} e^{i\delta_1} \frac{2r}{a_B^{3/2}} \sqrt{\frac{2\pi}{k'}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-2r/a_B)^n}{n! \Gamma(n+4)}; \quad (23.2.6)$$

con esta expresión la integral de (23.2.5) se realiza trivialmente y tenemos

$$\begin{aligned} \epsilon(\mathbf{k}, \eta) \langle \varphi_{\mathbf{k}'}^- | \hat{\mathbf{P}}_e | \psi_{1S} \rangle &= \epsilon_3(\mathbf{k}, \eta) \frac{4\pi\hbar}{a_B} \frac{4}{\sqrt{4\pi} a_B^{3/2}} e^{i\delta_1} \frac{2\sqrt{2\pi}}{a_B^{3/2} \sqrt{k'}} \\ &\times \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n! \Gamma(n+4)} \int_0^{\infty} dr r^3 \left( \frac{-2r}{a_B} \right)^n e^{-r/a_B} \\ &= \hbar \epsilon_3(\mathbf{k}, \eta) \frac{16\pi}{\sqrt{2k'}} e^{i\delta_1} \frac{1}{e^2}. \end{aligned}$$

Esperamos que no haya confusión entre el número  $e \simeq 2.718$  y la carga del electrón,  $e$ . Sustituyendo en (23.2.3) y denotando por  $E_\gamma = \hbar ck$  a la energía del fotón,

$$T(i \rightarrow f) \simeq e^{i\delta_1} \frac{4}{e^2 \sqrt{\pi}} \frac{e}{m\hbar \sqrt{k'} E_\gamma} \epsilon_3(\mathbf{k}, \eta).$$

la sección eficaz se obtiene de (22.3.9) con  $v_{12} = c$ ,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}} = \frac{(2\pi)^2 \hbar^3 m k'}{c} |T|^2$$

y por tanto hemos encontrado que

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}} \underset{k' \rightarrow 0}{\simeq} \frac{64\pi\alpha}{e^4} \frac{\hbar^2}{m E_\gamma} |\epsilon_3(\mathbf{k}, \eta)|^2.$$

Para  $k'$  pequeña, la energía del fotón será la de ionización del estado fundamental,  $E_\gamma \simeq 1$  Ry. Por otra parte, y según la fórmula explícita<sup>1</sup> para  $\epsilon_3$  que dimos en el problema P.14.3,  $|\epsilon_3(\mathbf{k}, \eta)|^2 = \frac{1}{2} \sin^2 \theta_{\gamma e}$ , donde  $\theta = \theta_{\gamma e}$  es el ángulo de  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{k}'$ . Con ello encontramos la fórmula final

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}} \underset{k' \rightarrow 0}{\simeq} \frac{64\pi\alpha}{e^4} a_B^2 \sin^2 \theta. \quad (23.2.7)$$

Nótese lo esencial que es utilizar la fórmula exacta para  $\varphi_{\mathbf{k}'}^-$  a bajas energías; como veremos en un momento, la aproximación de Born da una sección eficaz que se anula a  $k' = 0$ , mientras que la expresión correcta (23.2.7), es finita a energía cero (y, de hecho, bastante grande;  $d\sigma/d\Omega \simeq 6 \times 10^{-18}$  cm<sup>2</sup>).

Para  $k'$  pequeño, pero no despreciable, se tiene (problema P.23.1)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}} \underset{k' \rightarrow 0}{\simeq} \left( 64\pi\alpha a_B^2 \sin^2 \theta \right) \left( \frac{\text{Ry}}{E_\gamma} \right)^4 \frac{\exp[-(4/k' a_B) \arctan k' a_B]}{1 - \exp(-2\pi/k' a_B)}. \quad (23.2.8)$$

Esta expresión empalma suavemente con la obtenida a energía cero, (23.2.7), y con la que vamos a calcular en un momento con la aproximación de Born a altas energías.

<sup>1</sup> Si hubiéramos especificado el estado del fotón por su polarización lineal, con vector  $\mathbf{e}$ , entonces  $\epsilon_3$  se sustituye por  $\mathbf{e}\mathbf{k}'/k'$  y  $\frac{1}{2} \sin^2 \theta$  por  $|\mathbf{e}\mathbf{k}'|^2/k'^2$ .



### 23.2.2. Efecto fotoeléctrico a alta energía

Cuando  $k'$  es grande (con relación a  $1/a_B$ ) podemos utilizar la aproximación de Born y, por tanto, escribir

$$T(i \rightarrow f) \simeq T_B(i \rightarrow f) = \frac{-1}{(2\pi)^2 \hbar^3} \langle \varphi_{0k'} | \hat{H}_1(2\pi)^{3/2} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \eta) | \psi_{1S} \rangle,$$

esto es, reemplazamos  $\varphi_{\mathbf{k}'}$  por una onda plana,  $\varphi_{0k'} = e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}$ . Sustituyendo y operando,

$$\langle \varphi_{0k'} | \hat{H}_1 \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \eta) | \psi_{1S} \rangle = \frac{e\sqrt{\hbar c}}{2\pi m c \sqrt{k}} \epsilon \int d^3r e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \hat{\mathbf{P}}_e e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \psi_{1S}(r).$$

El resto del cálculo es elemental. El resultado es,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}} \underset{\text{Born}}{\simeq} \left( 64\pi\alpha a_B^2 \sin^2\theta \right) \left( \frac{R_V}{E_\gamma} \right) \frac{a_B^3 k'^3}{2(1 + a_B^2 |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2)^4}. \quad (23.2.9)$$

Esta fórmula es válida, en principio, y como ya comentamos, sólo para  $k'a_B \gg 1$  aunque proporciona todavía una buena aproximación para  $k'a_B \sim 1$ .

### 23.3. Colisión Compton

Consideramos ahora la dispersión de un fotón por una partícula que, para fijar ideas, tomaremos como un electrón (con carga  $e$ ), conocida como *colisión Compton*. El proceso lo podemos describir como sigue:

$$e(\mathbf{p}) + \gamma(\mathbf{k}, \eta) \rightarrow e(\mathbf{p}') + \gamma(\mathbf{k}', \eta').$$

Tomamos como estados iniciales y finales los

$$|i\rangle = \hbar^{-3/2} |\mathbf{p}; \mathbf{k}, \eta\rangle; \quad |f\rangle = \hbar^{3/2} |\mathbf{p}'; \mathbf{k}', \eta'\rangle,$$

donde los factores  $\hbar^{3/2}$  se introducen para tener  $\langle f|i\rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')\delta(\mathbf{p}_\gamma - \mathbf{p}'_\gamma)$  con  $\mathbf{p}_\gamma = \hbar\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{p}'_\gamma = \hbar\mathbf{k}'$ ; pero los estados de los fotones los seguimos considerando normalizados a  $\langle \mathbf{k}'|\mathbf{k}\rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ .

El nuevo aspecto de este proceso es que tenemos que ir a segundo orden en la perturbación. Escribimos, por tanto

$$\begin{aligned} \hat{H}_I &= \hat{H}'_I + \hat{H}''_I, \\ \hat{H}'_I &= -\frac{e}{mc} \hat{\mathbf{P}}_e \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}); \quad \hat{H}''_I = \frac{e^2}{2mc^2} \hat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (23.3.1)$$

Para calcular la matriz  $S$ , el orden más bajo no trivial es el primer orden en  $\hat{H}'_I$  o el segundo orden en  $\hat{H}'_I$ . Por tanto, tenemos

$$\begin{aligned} \langle f|\hat{S}|i\rangle &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^t dt' \langle f|\hat{H}'_{ID}(t)\hat{H}'_{ID}(t')|i\rangle \\ &+ \frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle f|\hat{H}''_{ID}(t)|i\rangle + \text{órdenes superiores} \\ &\equiv \langle f|\hat{S}'|i\rangle + \langle f|\hat{S}''|i\rangle + \text{órdenes superiores,} \end{aligned} \quad (23.3.2)$$

con notación obvia. Los  $\hat{H}'_{ID}$  son

$$\hat{H}'_{ID}(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{H}'_{IS} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}.$$

Comenzaremos por evaluar  $\langle f|\hat{S}''|i\rangle$ , que resultará ser el término dominante a bajas energías:

$$\begin{aligned} \langle f|\hat{S}''|i\rangle &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(E_f - E_i)t/\hbar} \langle f|\hat{H}''_{IS}|i\rangle \\ &= \frac{\pi i e^2}{mc^2} \delta(E_f - E_i) \langle p'|\hat{a}(\mathbf{k}', \eta') \hat{A}^2(\mathbf{r}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \eta)|\mathbf{p}\rangle \hbar^{-2}. \end{aligned}$$

Podemos representar este trozo por un “diagrama de Feynman”, el de la figura 23.3.1 (A); los dos fotones se emiten y absorben en el mismo punto,  $\mathbf{r}$ , y en el mismo instante de tiempo,  $t$ .

Substituyendo  $\hat{\mathbf{A}}$ ,

$$\begin{aligned} \langle f|\hat{S}''|i\rangle &= -\frac{ie^2}{4\pi mc\hbar^2} \delta(E_f - E_i) \sum_{\eta_1 \eta_2} \int \frac{d^3 k_1 d^3 k_2}{\sqrt{k_1 k_2}} \langle \mathbf{p}|\hat{a}(\mathbf{k}', \eta') \\ &\times \left\{ \epsilon(\mathbf{k}_1, \eta_1) e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}} \hat{a}(\mathbf{k}_1, \eta_1) \epsilon^*(\mathbf{k}_2, \eta_2) e^{-i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2, \eta_2) \right. \\ &\left. + (k_1, \eta_1 \leftrightarrow k_2, \eta_2) \right\} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \eta)|\mathbf{p}\rangle \\ &= -\frac{ie^2}{2\pi mc\hbar^2} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\sqrt{kk'}} \epsilon^*(\mathbf{k}', \eta') \epsilon(\mathbf{k}, \eta) \delta(E_f - E_i) \langle \mathbf{p}'|e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}}|\mathbf{p}\rangle, \end{aligned}$$

y hemos usado repetidamente que

$$\langle \mathbf{p}|\hat{a}^\dagger = \hat{a}|\mathbf{p}\rangle = 0.$$

Con nuestra normalización actual, la función de onda del estado  $|\mathbf{p}\rangle$  resulta ser  $(2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}$ , de manera que,

$$\langle \mathbf{p}'|e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}}|\mathbf{p}\rangle = (2\pi\hbar)^3 \int d^3 r e^{i(\mathbf{p}+\hbar\mathbf{k}-\mathbf{p}'-\hbar\mathbf{k}')\mathbf{r}/\hbar} = \delta(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k} - \mathbf{p}' - \hbar\mathbf{k}').$$

Finalmente,

$$T''(i \rightarrow f) = -\frac{\alpha}{2\pi m\hbar\sqrt{kk'}} \epsilon^*(\mathbf{k}', \eta') \epsilon(\mathbf{k}, \eta). \quad (23.3.3a)$$

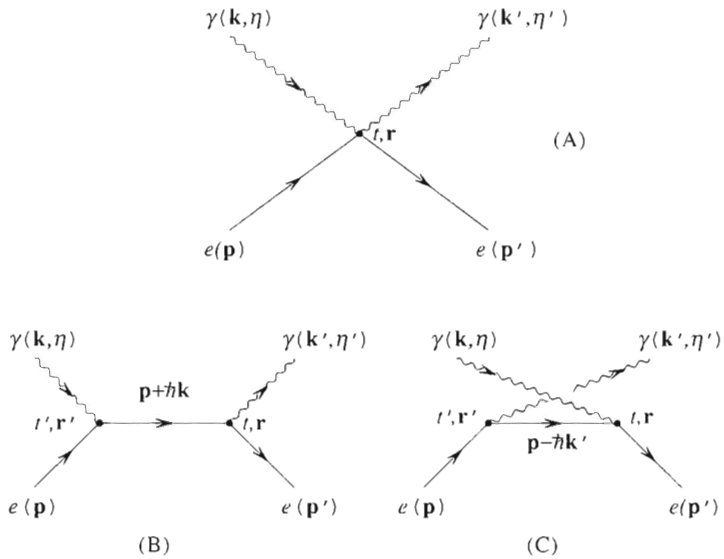


FIGURA 23.3.1. Diagramas de Feynman para dispersión Compton.

En el c.m.,  $k = k' = p_\gamma/\hbar$  y  $T''$  se simplifica a

$$T'' = \frac{-\alpha}{2\pi m p_\gamma} \boldsymbol{\epsilon}'^* \boldsymbol{\epsilon}. \quad (23.3.3b)$$

vayamos ahora a  $\langle f | \hat{S}' | i \rangle$ . Tenemos

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{S}' | i \rangle = & -\frac{1}{\hbar^2} \frac{1}{\hbar^3} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^t dt' \langle f | e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{H}'_1 e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \\ & \times e^{i\hat{H}_0 t'/\hbar} \hat{H}'_1 e^{-i\hat{H}_0 t'/\hbar} | i \rangle. \end{aligned}$$

Para evaluar esto tenemos que introducir una suma completa sobre estados intermedios,  $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$ , de manera que

$$\begin{aligned} \langle f|\hat{S}'|i\rangle &= -\frac{1}{\hbar^5} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^{+\infty} dt' e^{i(E_f - E_n)t/\hbar} \\ &\quad \times \sum_n \langle f|H'_I|n\rangle\langle n|H'_I|i\rangle e^{i(E_n - E_i)t'/\hbar} \\ &= -\frac{1}{\hbar^5} \frac{e^2}{m^2 c^2} \sum_n \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(E_f - E_n)t/\hbar} \frac{-\hbar}{i(E_f - E_n)} e^{i(E_n - E_i)t/\hbar} \\ &\quad \times \langle \mathbf{p}'|\hat{a}(\mathbf{k}', \eta')\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})\hat{\mathbf{P}}|n\rangle\langle n|\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}')\hat{\mathbf{P}}\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, \eta)|\mathbf{p}\rangle. \end{aligned} \quad (23.3.4a)$$

No es difícil convencerse de que los únicos estados que dan contribución distinta de cero son estados  $|n\rangle$  con un electrón y cero fotones, o con un electrón y dos fotones:

$$\begin{aligned} \sum |n\rangle\langle n| &= \int d^3 p_e |\mathbf{p}_e\rangle\langle \mathbf{p}_e| \\ &\quad + \int d^3 p_e \frac{d^3 k_1 d^3 k_2}{2!} \sum_{\eta_1 \eta_2} |\mathbf{p}_e, \mathbf{k}_1, \eta_1; \mathbf{k}_2, \eta_2\rangle\langle \mathbf{p}_e, \mathbf{k}_1, \eta_1; \mathbf{k}_2, \eta_2|. \end{aligned} \quad (23.3.4b)$$

El factor  $1/2!$  aparece debido a la identidad de los fotones: los estados  $|\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2\rangle$  y  $|\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1\rangle$  son el mismo.

Podemos describir los procesos asociados con las dos posibilidades de estados intermedios con los diagramas de la fig. 23.3.1(B,C). En el caso de un solo electrón en el estado intermedio, tenemos el diagrama de 23.3.1(B): el fotón entrante es absorbido por el electrón en el instante de tiempo  $t'$ , en la posición  $\mathbf{r}'$ . Después el electrón se propaga hasta el lugar  $\mathbf{r}$  donde, en el instante  $t$ , emite el fotón final. El diagrama 23.3.1(C) representa un electrón que ha emitido el fotón final *antes* de haber absorbido el inicial, con lo que tenemos un electrón y dos fotones en el estado intermedio.

Insertando (23.3.4b) en (23.3.4a) y después de un cálculo sin grandes dificultades, pero bastante pesado, y cuyos detalles omitimos,<sup>2</sup> se encuentra

$$\langle f|\hat{S}'|i\rangle = -\frac{2\pi i e^2}{m^2 c^2 \hbar^3} \delta(E_f - E_i) \{\mathcal{M}_0 + \mathcal{M}_2\}, \quad (23.3.5a)$$

donde los  $\mathcal{M}_{0,2}$  se refieren respectivamente a la contribución con cero, dos fotones y se tiene,

$$\mathcal{M}_0 := \frac{\hbar c}{(2\pi)^2 \sqrt{k k'}} \frac{1}{E_f - (\mathbf{p} + \hbar \mathbf{k})^2/2m} \mathbf{P}_f \boldsymbol{\epsilon}^*(\mathbf{k}', \eta') \mathbf{P}_i \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{k}, \eta) \delta(\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f) \quad (23.3.5b)$$

<sup>2</sup> Pueden verse en Ynduráin (1996) o Sakurai (1967).

y

$$\mathcal{M}_2 = \frac{\hbar c}{(2\pi)^2} \frac{1}{\sqrt{kk'}} \frac{1}{E_f - ((\mathbf{p}' - \hbar\mathbf{k})^2/2m + c\hbar(k+k'))} \\ \times \mathbf{P}_f \boldsymbol{\epsilon}^*(\mathbf{k}', \eta') \mathbf{P}_i \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{k}, \eta) \delta(\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f).$$

Los términos  $1/(E_f - E_n)$  en (23.3.14b,c) se llaman *propagadores* (no-relativistas), porque están conectados con la propagación del electrón intermedio. La energía  $E_n$  es la del estado intermedio, un electrón para  $\mathcal{M}_0$ , y un electrón y dos fotones para  $\mathcal{M}_2$ . El momento del electrón se obtiene del requisito de conservación de momento en cada vértice del diagrama. Nótese que en los productos escalares  $\mathbf{P}_f \boldsymbol{\epsilon}^*(\mathbf{k}', \eta')$ ,  $\mathbf{P}_i \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{k}, \eta)$ , puede reemplazarse  $\mathbf{P}_f$  por  $\mathbf{p}'$ , y  $\mathbf{P}_i$  por  $\mathbf{p}$  ya que

$$\mathbf{k}' \boldsymbol{\epsilon}^*(\mathbf{k}', \eta') = \mathbf{k} \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{k}, \eta) = 0.$$

Añadiendo las dos piezas,  $T'$  y  $T''$ , obtenemos el resultado final:

$$T(i \rightarrow f) = - \frac{\alpha}{2\pi m \hbar \sqrt{kk'}} \sum_{ij} \epsilon_i^*(\mathbf{k}', \eta') \epsilon_j(\mathbf{k}, \eta) \\ \times \left\{ \delta_{ij} + \frac{p'_i p_j}{m} \left( \frac{1}{D_0} + \frac{1}{D_2} \right) \right\}, \quad (23.3.6) \\ D_0 = E_f - (\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k})^2/2m, \\ D_2 = E_f - ((\mathbf{p}' - \hbar\mathbf{k})^2/2m + c\hbar(k+k')).$$

La expresión de los  $D_N$  es particularmente sencilla en el sistema de referencia del c.m. En él, y con  $E_\gamma = c\hbar k$ ,  $E'_\gamma = c\hbar k'$ , y definiendo las velocidades del electrón respectivamente antes y después del choque,  $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$ ,  $\mathbf{v}' = \mathbf{p}'/m$  tenemos

$$D_0 = E_\gamma(1 + v/2c), \quad D_2 = -E_\gamma \left( 1 + v/2c + \frac{v}{c} \cos \theta \right),$$

con  $\theta$  el ángulo de  $\mathbf{p}, \mathbf{p}'$ . En consecuencia,

$$\frac{1}{D_0} + \frac{1}{D_2} \simeq \frac{1}{E_\gamma} \frac{v}{c} \cos \theta + \text{órdenes superiores en } v/c.$$

En el límite de velocidades pequeñas comparadas con  $c$  en el que estamos trabajando tenemos, por tanto,

$$T(i \rightarrow f) \simeq - \frac{\alpha}{2\pi m \hbar \sqrt{kk'}} \sum_{ij} \epsilon_i^*(\mathbf{k}', \eta') \epsilon_j(\mathbf{k}, \eta) \\ \times \left\{ \delta_{ij} + \frac{v_i v'_j}{c^2} \cos \theta \right\} \xrightarrow{vv' \rightarrow 0} \frac{-\alpha}{2\pi m \hbar \sqrt{kk'}} \boldsymbol{\epsilon}^*(\mathbf{k}', \eta') \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{k}, \eta). \quad (23.3.7)$$

EJERCICIO: Evaluar la sección eficaz en el c.m. Comprobar que, si no se conoce la polarización inicial ni se mide la final, tenemos la sección eficaz no-polarizada, a energía cero,

$$\frac{d\sigma_{n.p.}}{d\Omega} \Big|_{k \rightarrow 0} = (\alpha r_e)^2, \quad r_e \equiv \hbar/mc \quad (23.3.8)$$

(fórmula de Thompson), donde  $r_e$  es el llamado *radio clásico del electrón*.

Numéricamente,  $r_e \simeq 3 \times 10^{-11}$  cm,  $\alpha r_e \simeq 2 \times 10^{-13}$  cm,  $(\alpha r_e)^2 \simeq 5 \times 10^{-26}$  cm = 0.05 barn. Es posible demostrar que, aunque deducida no-relativísticamente y sólo a segundo orden, la fórmula de Thompson es exacta en el límite de energía cero del fotón •

### PROBLEMAS

P 23.1. Demostrar la fórmula (23.2.8).

*Solución.* Lo único en lo que difiere el cálculo del realizado en el texto es en cambios de cinemática elementales y en la evaluación de la integral en (23.2.5), que explicamos con detalle. Escribimos,

$$\int_0^\infty dr r^2 R_{k'1}(r) R_{1S}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi} a_B^{3/2}} e^{2i\delta_1(2k')} I,$$

donde, sustituyendo la expresión (23.2.4) para  $R_{k'1}$ ,

$$I = e^{\pi/2\alpha_B k'} \sum_0^\infty \frac{\Gamma(2 + i/a_B k' + n)}{n! \Gamma(n+4)} \int_0^\infty dr r^3 e^{-r/a_B} e^{-ik'r} (2ik'r)^n.$$

La integral en  $dr$  es elemental; cambiando de variable,  $(1/a_B + ik')r = z$  se convierte en  $\int dz z^{3+n} e^{-z} = \Gamma(n+4)$ , luego tenemos

$$I = e^{\pi/2\alpha_B k'} \frac{a_B^4}{(1 + ik'a_B)^4} \sum_0^\infty \left( \frac{2ik'a_B}{1 + ik'a_B} \right)^n \frac{\Gamma(2 + i/a_B k' + n)}{n!}.$$

Esta suma se puede hacer con un par de trucos. Primero, reemplazar

$$\Gamma(2 + i/a_B k' + n) = \int_0^\infty dt t^{1+i/a_B k' + n} e^{-t},$$

con lo que la suma es trivial y encontramos

$$I = \frac{a_B^4}{(1 + ik'a_B)^4} e^{\pi/2\alpha_B k'} \int_0^\infty dt t^{1+i/a_B k'} \exp \left\{ -\frac{1 - ik'a_B}{1 + ik'a_B} t \right\}.$$

Segundo, con un nuevo cambio de variables,

$$\frac{1 - ik'a_B}{1 + ik'a_B} t = \xi$$

la integral en  $d\xi$  se puede hacer fácilmente:

$$I = \frac{a_B^4}{(1 + ik'a_B)^4} e^{\pi/2 a_B k'} \left( \frac{1 + ik'a_B}{1 - ik'a_B} \right)^{2 + i/k'a_B} \Gamma(2 + i/k'a_B).$$

Sólo nos queda utilizar propiedades de la función  $\Gamma$ , en particular,

$$|\Gamma(1 + iy)|^2 = 2\pi y / (e^{\pi y} - e^{-2\pi y})$$

y que

$$e^{2i\delta_1} = \frac{\Gamma(1 - i/k'a_B)}{\Gamma(1 + i/k'a_B)}$$

para encontrar el valor de  $I$ :

$$I = e^{-i\delta_1} \sqrt{\frac{2\pi}{k'a_B}} \left( 1 + \frac{i}{k'a_B} \right) (1 - e^{-2\pi/k'a_B})^{-1/2} \\ \times \frac{a_B^4}{(1 + ik'a_B)^4} e^{2i \arctan k'a_B} e^{-(2i/k'a_B) \arctan k'a_B}.$$

La cantidad que entra en la sección eficaz es  $|I|^2$ .





# APÉNDICES

Los dos primeros apéndices no son, en absoluto, un sustituto de un estudio formal de los temas matemáticos tratados; apenas pretenden ser más que una colección de definiciones y fórmulas. El rigor matemático brilla por su ausencia. Recomendamos que estos apéndices se lean antes o, al menos, a la vez que el texto principal, salvo que se esté ya familiarizado con las cuestiones tratadas en ellos.

## Apéndice I: Espacios de Hilbert

### Espacios lineales

Consideramos espacios lineales sobre los números complejos,  $C$ . Diremos que  $\mathfrak{L}$  es un *espacio lineal* si, para todo par de elementos (*vectores*)  $u, v$  en  $\mathfrak{L}$  y cualquier par de números complejos,  $\alpha, \beta$  la *combinación lineal*  $\alpha u + \beta v$  está definida y también está en  $\mathfrak{L}$ . Suponemos que existe en  $\mathfrak{L}$  un vector nulo,  $o$ , tal que  $\alpha o = o$ ,  $0 u = o$ ,  $o + u = u$  para todos los  $\alpha, u$ . Debido a estas propiedades utilizamos la misma notación para el vector nulo,  $o$ , y el número 0, escribiendo el símbolo 0 para ambos, si no hay peligro de confusión.

Decimos que los vectores  $u_1, \dots, u_n$  son *linealmente independientes* si la igualdad  $\sum_n \alpha_i u_i = 0$  sólo es posible cuando  $\alpha_1 = \dots = \alpha_n = 0$ . El número máximo de vectores linealmente independientes es la *dimensión* del espacio.

EJEMPLOS A) El conjunto de matrices columna,

$$u = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix}, \quad \alpha_i \text{ complejos}$$

con la ley de composición

$$\alpha u + \beta v = \alpha \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha\alpha_1 + \beta\beta_1 \\ \vdots \\ \alpha\alpha_n + \beta\beta_n \end{pmatrix}.$$

A este espacio se le llama *espacio euclídeo (complejo)*, se le denota por  $C^n$  y es el modelo de todos los espacios lineales. Su dimensión es  $n$ .

B) El conjunto  $\mathfrak{F}[a, b]$  de funciones  $\psi(x)$  con valores complejos y definidas para  $x$  en el intervalo  $[a, b]$ . La ley de composición es la ordinaria,  $\alpha\psi(x) + \beta\varphi(x)$ . La dimensión de este espacio es infinita.

### Producto escalar. Espacios de Hilbert

Sea  $\mathfrak{H}$  un espacio lineal. Diremos que es un *espacio de Hilbert* si existe en él una aplicación (*producto escalar*)  $\langle | \rangle$  tal que, si  $u, v$  están en  $\mathfrak{H}$ ,  $\langle u|v \rangle$  es un número complejo, y se cumplen las siguientes condiciones:

$$\begin{aligned}\langle u|\alpha v + \beta w \rangle &= \alpha \langle u|v \rangle + \beta \langle u|w \rangle; \\ \langle o|v \rangle &= 0, \quad \text{para todo } v; \\ \langle u|v \rangle &= \langle v|u \rangle^*\end{aligned}$$

y denotamos por  $o$  al vector nulo. De estas condiciones se sigue que

$$\langle \alpha u + \beta v|w \rangle = \alpha^* \langle u|w \rangle + \beta^* \langle v|w \rangle.$$

A esta propiedad se le llama *antilinealidad*; según esto, el producto escalar es antilineal en el primer argumento y lineal en el segundo. Finalmente, pedimos que

$$\langle u|u \rangle \geq 0; \quad \langle u|u \rangle = 0 \text{ si, y sólo si } u = o.$$

A la cantidad  $\|u\| \equiv +\{\langle u|u \rangle\}^{1/2}$  se le llama *norma*, *módulo* o *longitud* de  $u$ .

*Ejemplos.* 1.- Si, para dos elementos en  $C^n$ ,

$$u = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix}, \quad v = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_n \end{pmatrix}$$

definimos el producto escalar

$$\langle u|v \rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i^* \beta_i,$$

$C^n$  se convierte en un espacio de Hilbert.

2.- El espacio  $l^2$  consta de matrices columna infinitas,

$$u = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \\ \vdots \end{pmatrix}$$

con la condición de que  $\sum_{n=1}^{\infty} |\alpha_n|^2$  sea convergente. El producto escalar es

$$\langle u|v \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n^* \beta_n.$$

3.- El conjunto de funciones  $\varphi(x)$  de *cuadrado integrable* sobre el intervalo  $[a, b]$ , es decir, tales que

$$\int_a^b dx |\varphi(x)|^2 = \text{finito},$$

con la definición

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int_a^b dx \varphi^*(x) \psi(x).$$

A este espacio se le llama  $L^2(a, b)$ . Un punto técnico en el que no nos vamos a detener es que hay que identificar dos funciones que se diferencian en un conjunto de medida nula. Una función  $o(x)$  es cero salvo en un conjunto de medida nula si

$$\int_a^b dx |o(x)|^2 = 0.$$

4.- El conjunto  $L^2_\sigma(U)$ , donde  $U$  es una región del espacio real de  $n$  dimensiones,  $R^n$ , y  $\sigma(x)$  es una función positiva en  $U$ , consta de funciones tales que

$$\int_U d^n x \sigma(x) |\varphi(x)|^2 = \text{finito}.$$

El producto escalar se define por

$$\langle \varphi | \psi \rangle_{U, \sigma} = \int_U d^n x \sigma(x) \varphi^*(x) \psi(x),$$

y hay que identificar funciones que se diferencian en un conjunto de medida nula, esto es,  $\varphi_1(x) \equiv \varphi_2(x)$  si  $\varphi_1(x) - \varphi_2(x) = o(x)$  con

$$\int_U d^n x \sigma(x) |o(x)|^2 = 0.$$

EJERCICIO: Demostrar la desigualdad de Schwartz

$$|\langle u | v \rangle| \leq \|u\| \|v\| \quad \bullet$$

### Operadores

Se dice que  $A$  es un *operador* (y, salvo que se diga explícitamente lo contrario, sobreentendemos que es lineal) si es una aplicación  $A : u \in \mathfrak{H} \rightarrow Au \in \mathfrak{H}$  tal que  $A(\alpha u + \beta v) = \alpha Au + \beta Av$ . Los operadores se pueden sumar,  $(A + B)u \equiv Au + Bu$ , y multiplicar,  $(AB)u \equiv A(Bu)$ . La suma es conmutativa; el producto, en general, no. Suma y producto son asociativos.

*Ejemplos.* 1.- En  $C^n$ , sea  $A$  una matriz con elementos  $A = (a_{ij})$ . Definimos

$$A : u = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} \rightarrow Au = \begin{pmatrix} \sum_j a_{1j} \alpha_j \\ \vdots \\ \sum_j a_{nj} \alpha_j \end{pmatrix}.$$

Todos los operadores en  $C^n$  se pueden representar por matrices.

2.- En cualquier espacio, si  $\alpha$  es un número complejo, el operador  $A_\alpha$  tal que

$A_\alpha u = \alpha u$ . Debido a esto, escribiremos simplemente  $\alpha$  en vez de  $A_\alpha$ .

3.- En  $L^2$ , las aplicaciones

$$Q : \varphi(x) \rightarrow x\varphi(x),$$

$$D : \varphi(x) \rightarrow \frac{d}{dx} \varphi(x)$$

con tal de que  $x\varphi(x)$  y  $\varphi'(x)$ , respectivamente, sean también de cuadrado integrable. Nos encontramos aquí con una peculiaridad de los espacios de infinitas dimensiones: algunos operadores *no* se pueden aplicar a todos los vectores. Pediremos que, al menos, se puedan aplicar a un conjunto denso. Éste es el caso de  $Q$ ,  $D$ , aunque ni intentaremos demostrarlo.

4.- En  $L^2(a, b)$ , el operador  $K$  definido por

$$K\varphi(x) = \int_a^b dy k(x, y)\varphi(y);$$

$k(x, y)$  es una función (o, más generalmente, una distribución) y se dice que  $K$  es un operador integral, con núcleo  $k(x, y)$ . El operador identidad puede considerarse un operador integral con núcleo la delta de Dirac,  $\delta(x - y)$ .

El operador *adjunto* (o *hermítico conjugado*) de  $A$ , que denotamos por  $A^\dagger$ , se define por satisfacer la igualdad

$$\langle u|Av \rangle = \langle A^\dagger u|v \rangle,$$

para cualquier par  $u, v$  en los que estén definidos  $A, A^\dagger$ . Salvo casos excepcionales se tiene  $(A^\dagger)^\dagger = A$ .

*Ejemplos.* 1.- El adjunto de la matriz  $A = (a_{ij})$  es la matriz  $A^\dagger = (a_{ji}^*)$ .

2.- En  $L^2(-\infty, +\infty)$ , el adjunto de  $Q$  es el propio  $Q$  y el de  $D$  es  $-D$ .

Demostremos la segunda propiedad:

$$\begin{aligned} \langle \psi|D\varphi \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x)\varphi'(x) \\ &= \psi^*(x)\varphi(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} dx (\psi'(x))^* \varphi(x), \end{aligned}$$

y hemos integrado por partes. Para que  $\varphi, \psi$  sean de cuadrado integrable tienen que anularse en el infinito, luego el término en los límites se anula y obtenemos el resultado deseado.

3.- Si

$$K\varphi(x) = \int_a^b dy k(x, y)\varphi(y)$$

entonces

$$K^\dagger\varphi(x) = \int_a^b dy k^*(y, x)\varphi(y).$$

EJERCICIO: Comprobar que  $(\alpha A + \beta B)^\dagger = \alpha^* A + \beta^* B$ ;  $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$  •

Si  $A = A^\dagger$  se dice que  $A$  es *autoadjunto* (o *hermítico*). En  $L^2(-\infty, +\infty)$ , los  $Q$ ,  $iD$  lo son. Si  $U^\dagger = U^{-1}$  se dice que  $U$  es unitario.  $U$  es unitario si, y sólo si, para todo par  $u, v$  se tiene

$$\langle Uu|Uv \rangle = \langle u|v \rangle.$$

Un importante ejemplo de operador unitario es la *transformación de Fourier*,  $\mathcal{F}$ , definida en  $L^2(-\infty, +\infty)$  por

$$\mathcal{F}\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{ixy} \varphi(y).$$

Su inversa es

$$\mathcal{F}^{-1}\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-ixy} \varphi(y)$$

(*teorema de Plancherel*). En  $n$  dimensiones se define la transformada de Fourier como

$$\mathcal{F}\varphi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} d^n y e^{ix \cdot y} \varphi(y), \quad x \cdot y \equiv \sum_{i=1}^n x_i y_i.$$

EJERCICIO: Demostrar la *fórmula de polarización*,

$$\begin{aligned} \langle u|Av \rangle = \frac{1}{4} \{ & \langle u + v|A(u + v) \rangle - \langle u - v|A(u - v) \rangle \\ & + i\langle iu + v|A(iu + v) \rangle - i\langle iu - v|A(iu - v) \rangle \} \quad \bullet \end{aligned}$$

EJERCICIO: Utilizando la fórmula de polarización, demostrar que basta que se tenga  $\langle u|Au \rangle = \langle Au|u \rangle$ ,  $\langle Uu|Uu \rangle = \langle u|u \rangle$  para que, respectivamente,  $A$  sea autoadjunto,  $U$  sea unitario •

### Funciones de operadores

Sea  $f(z)$  una función de la variable compleja  $z$ , que admite un desarrollo en serie

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} z^n.$$

Si  $A$  es un operador, definimos  $f(A)$  por

$$f(A) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} A^n.$$

Si  $A$  y  $B$  conmutan, entonces, para cualquier  $f$ ,  $f(A)$  y  $B$  también conmutan. Se tiene  $f(A)^\dagger = \sum f^{(n)}(0)^*(A^\dagger)^n/n!$ . En particular, el adjunto de  $\exp \alpha A$  es  $\exp(\alpha^* A^\dagger)$ . El inverso de  $\exp \alpha A$  es  $\exp(-\alpha A)$ . De aquí se sigue que  $\exp irA$ , con  $r$  real, es unitario si, y sólo si,  $A$  es autoadjunto. El recíproco también es cierto: si  $U$  es unitario, existe  $A$  autoadjunto con  $U = \exp iA$ . La demostración del recíproco es dura.

La igualdad  $\exp(A+B) = e^A e^B$  es cierta sólo si  $A$  y  $B$  conmutan. El caso general (*fórmula de Hausdorff–Campbell*) puede verse en el texto de Galindo y Pascual (1978).

Un operador  $A$  se dice que es *definido positivo* si, para todo  $u$ ,  $\langle Au|Au \rangle \geq 0$ . Se puede demostrar que si  $A$  es definido positivo es también autoadjunto y, si  $A$  es definido positivo, entonces existe un único operador  $A^{1/2}$  tal que también es definido positivo y satisface  $(A^{1/2})^2 = A$ . Finalmente, para cualquier operador  $F$ , los operadores  $FF^\dagger$  y  $F^\dagger F$  son definidos positivos.

Sólo demostraremos la última propiedad. En efecto, se tiene (para, por ejemplo  $F^\dagger F$ ),

$$0 \leq \|Fu\|^2 = \langle Fu|Fu \rangle = \langle u|F^\dagger Fu \rangle.$$

EJERCICIO: Demostrar las propiedades siguientes: si  $A$  es autoadjunto y para un cierto  $u_0$  dado se tiene  $Au_0 = \lambda u_0$ , entonces  $\lambda$  es real; si  $U$  es unitario y  $Uu_0 = \lambda u_0$ , entonces  $\lambda$  es una fase ( $|\lambda| = 1$ ); para cualquier  $A$ , si  $Au_0 = \lambda u_0$  entonces  $f(A)u_0 = f(\lambda)u_0$  •

## Bases

Se dice que el conjunto  $e_1, \dots, e_N$  ( $N$  finito o infinito) de vectores en  $\mathfrak{H}$  es una *base ortonormal* de  $\mathfrak{H}$  si  $\langle e_n|e_{n'} \rangle = \delta_{nn'}$  y cualquier vector  $u$  de  $\mathfrak{H}$  se puede escribir como

$$u = \sum_{n=1}^N \alpha_n e_n.$$

A las  $\alpha_n$  se les llama *componentes* de  $u$  en la base  $\{e_n\}$ . Sólo consideramos en este texto espacios de Hilbert que posean una base, a los que se conoce como *separables*.

Sea  $e$  tal que  $\|e\| = 1$ . Definimos el operador  $P_e \equiv |e\rangle\langle e|$  por  $P_e u = \langle e|u \rangle e$ . A  $P_e$  se le llama *proyector sobre  $e$* . Más generalmente, sean  $e_1, e_2, \dots, e_k$  un conjunto de vectores ortonormales. Denotemos por  $V$  al subespacio de vectores de la forma  $v = \sum_{i=1}^k \alpha_i e_i$ . Al operador  $P_V$  definido por

$$P_V = P_{e_1} + \dots + P_{e_k},$$

se le llama *proyector sobre el subespacio  $V$* . Dada una base  $e_1, \dots, e_N$  se tiene la *relación de cierre*

$$\sum_{n=1}^N |e_n\rangle\langle e_n| = 1.$$

EJERCICIO: Demostrar que  $P_V^\dagger = P_V^2 = P_V$  •

Sean  $\{e_n\}$ ,  $\{f_n\}$  dos bases ortonormales. Definimos el operador que nos pasa de una a otra,  $U$ , por  $Ue_n \equiv f_n$  y, por linealidad, lo extendemos a cualquier vector. Entonces,  $U$  es unitario

EJERCICIO: Comprobarlo •

## Apéndice II: Distribuciones

Una *distribución*,  $T(x)$ , es una generalización de una función integrable.<sup>1</sup>  $T(x)$  puede no tener valores finitos para algunos  $x$ : lo único que se pide es que la integral

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx T(x)f(x)$$

exista en algún sentido para toda función  $f(x)$  que sea infinitamente diferenciable y, junto con todas sus derivadas, decazca en el infinito más rápido que cualquier potencia  $1/|x|^n$ . El conjunto de tales  $f$  lo denotaremos por  $\mathfrak{S}$ . Un ejemplo de  $f$  son las funciones  $\exp(-p|x|^q)$  con  $p, q$  positivos,  $q$  par; como ejemplo de distribuciones tenemos las siguientes:

1.- Cualquier función continua que crezca más lentamente que un polinomio en el infinito es una distribución.

2.- La *función característica*,  $\chi_{ab}(x)$  definida por

$$\chi_{ab}(x) = \begin{cases} 1, & a \leq x \leq b \\ 0, & x < a, x > b. \end{cases}$$

3.- La *función escalón*,  $\theta(x)$ ,

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

4.- La *función signo*,  $\text{sign } x \equiv x/|x|$ .

5.- La “función” delta de Dirac, definida por

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x - y)f(x) = f(y).$$

La  $\delta$  puede escribirse formalmente como límite de funciones ordinarias. Por ejemplo,

$$\frac{n}{2} \chi_{y-1/n, y+1/n}(x) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \delta(x - y).$$

<sup>1</sup> Un texto muy asequeble y útil sobre distribuciones es el de Gelfand y Shilov (1962).

Para comprobarlo, insértese en cualquier integral con una función de  $\mathfrak{S}$ . Otro ejemplo es  $T_n(x - y) = [\text{sen}(n(x - y))]/\pi(x - y)$ . La demostración es como sigue: por cálculo directo,

$$T_n(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-n}^{+n} dp e^{ipx}.$$

Utilizando ahora la transformación de Fourier,

$$\begin{aligned} f(x) &= \mathcal{F}\mathcal{F}^{-1}f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{ixy} \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-iyz} f(z) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dy \frac{e^{i(x-y)y}}{2\pi} \right\} f(z) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left\{ \int_{-n}^{+n} dy \frac{e^{i(x-y)y}}{2\pi} \right\} f(z) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dz T_n(x - z) f(z). \end{aligned}$$

Otra aproximación a la delta de Dirac se obtiene si discretizamos el espacio. Si sustituimos el continuo  $x$  por los  $x_n = nu$ , entonces

$$\int dx f(x) = \lim_{u \rightarrow 0} u \sum_n f(x_n)$$

y

$$\delta(x - y) = \lim_{\substack{u \rightarrow 0 \\ x_n = x, y_m = y}} \frac{1}{u} \delta_{nm}.$$

Se tiene el resultado siguiente: La única solución de la ecuación  $xT(x) = 0$  es proporcional a la delta de Dirac,  $T(x) = C\delta(x)$ . La demostración formal puede hacerse transformando Fourier; la dejamos como ejercicio.

La delta en varias variables se define como el producto de las deltas en cada una de ellas. Si  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ , entonces

$$\int_{R^n} d^n x \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{y}).$$

Se tiene,

$$\int_{R^n} d^n p e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} = (2\pi)^n \delta(\mathbf{x}).$$

Los cambios de variable se realizan en distribuciones como en funciones ordinarias. En particular, la expresión de la delta (en tres dimensiones) en polares es

$$\delta(\mathbf{r}) = \frac{1}{r^2} \delta(r) \delta(\Omega), \quad \delta(\Omega) = \delta(\phi) \delta(\cos \theta),$$

con  $\theta$ ,  $\phi$  los ángulos polares de  $\mathbf{r}$ .

Cualquier distribución  $T$  se puede derivar definiendo  $T'(x)$  por

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx T'(x) f(x) = - \int_{-\infty}^{+\infty} dx T(x) f'(x).$$



EJERCICIO: Comprobar que

$$\frac{d\theta(x)}{dx} = \delta(x); \quad \frac{\text{sign } x}{dx} = 2\delta(x);$$

comprobar que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta'(x - y) f(x) = -f'(y) \quad \bullet$$

Definimos la distribución P.P.(1/x) por

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \text{ P.P. } \frac{1}{x} f(x) \equiv \text{P.P.} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{1}{x} f(x)$$

donde la *parte principal*, P.P., de la integral de una función  $F(x)$  singular en  $x - x_0$  se define por

$$\text{P.P.} \int dx F(x) \equiv \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ \epsilon > 0}} \left\{ \int^{x_0 - \epsilon} dx F(x) + \int_{x_0 + \epsilon} dx F(x) \right\}.$$

Asimismo definimos  $1/(x \pm i0)$  por

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{1}{x \pm i0} f(x) \equiv \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ \epsilon > 0}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{f(x)}{x \pm i\epsilon}.$$

EJERCICIO: Demostrar que

$$\frac{1}{x \pm i0} = \text{P.P.} \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x) \quad \bullet$$

### Apéndice III: Coeficientes de Clebsch–Gordan matrices de rotación

#### *Coeficientes de Clebsch–Gordan*

Damos explícitamente los valores para dos casos importantes. Si uno de los momentos angulares es la unidad,

$$(l', M'; 1, M'' | l' + 1) = \begin{cases} \sqrt{\frac{(l' - M' + 1)(l' - M' + 2)}{2(l' + 1)(2l' + 1)}}, & M'' = -1, \\ \sqrt{\frac{(l' - M' + 1)(l' + M' + 1)}{(l' + 1)(2l' + 1)}}, & M'' = 0, \\ \sqrt{\frac{(l' + M' + 1)(l' + M' + 2)}{2(l' + 1)(2l' + 1)}}, & M'' = +1; \end{cases}$$

$$(l', M'; 1, M''|l') = \begin{cases} \sqrt{\frac{(l' - M' + 1)(l' + M')}{2l'(l' + 1)}}, & M'' = -1, \\ \frac{M'}{\sqrt{l'(l' + 1)}}, & M'' = 0, \\ -\sqrt{\frac{(l' + M' + 1)(l' - M')}{2l'(l' + 1)}}, & M'' = +1; \end{cases}$$

$$(l', M'; 1, M''|l' - 1) = \begin{cases} \sqrt{\frac{(l' + M')(l' + M' - 1)}{2l'(2l' + 1)}}, & M'' = -1, \\ -\sqrt{\frac{(l' - M')(l' + M')}{l'(2l' + 1)}}, & M'' = 0, \\ \sqrt{\frac{(l' - M' - 1)(l' - M')}{2l'(2l' + 1)}}, & M'' = +1. \end{cases}$$

Si uno de los momentos angulares (espín) es  $1/2$ ,

$$(l, M; 1/2, s_3|l - 1/2) = \begin{cases} -\sqrt{(l - M)/(2l + 1)}, & s_3 = 1/2, \\ \sqrt{(l + M)/(2l + 1)}, & s_3 = -1/2; \end{cases}$$

$$(l, M; 1/2, s_3|l + 1/2) = \begin{cases} \sqrt{(l + M + 1)/(2l + 1)}, & s_3 = 1/2, \\ \sqrt{(l - M + 1)/(2l + 1)}, & s_3 = -1/2. \end{cases}$$

Una fórmula general, que se debe a Wigner (1959), es la siguiente:

$$\begin{aligned} & (l', M'; l'', M''|l) = \sqrt{2l + 1} \\ & \times \left\{ \frac{(l + l' - l'')!(l - l' + l'')!(l' + l'' - l)!(l' + M' + M'')!(l - M' - M'')!}{(l + l' + l'' - 1)!(l' - M')!(l' + M')!(l'' - M'')!(l'' + M'')} \right\} \\ & \times \sum_k (-1)^{k+l'+M'} \frac{\Gamma(l + l'' + M' - k + 1)\Gamma(l' - M' + k + 1)}{\Gamma(k + 1)\Gamma(l - l' + l'' - k + 1)} \\ & \times \frac{1}{\Gamma(l + M' + M'' - k + 1)\Gamma(k + l' - l'' - M' - M'' + 1)}. \end{aligned}$$

La suma recorre todos los valores de  $k$ , enteros o semienteros (según los casos).

### Matrices de rotación

Sean  $\alpha, \beta, \gamma$  los ángulos de Euler. Denotando por  $R_j(\theta)$  a una rotación alrededor del eje  $Oj$ , en el sentido del sacacorchos, la rotación especificada por los  $\alpha, \beta, \gamma$  se puede escribir como  $R_{\alpha, \beta, \gamma} = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma)$ . La matriz tridimensional correspondiente es, como se comprueba fácilmente,

$$R_{\alpha\beta\gamma} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \text{sen } \alpha & 0 \\ -\text{sen } \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & -\text{sen } \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ \text{sen } \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \gamma & \text{sen } \gamma & 0 \\ -\text{sen } \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Para calcular los elementos de matriz  $D_{MM'}^j(R_{\alpha\beta\gamma})$  utilizamos en primer lugar que  $\hat{U}(R_z(\theta)) = \exp\{(-i/\hbar)\theta\hat{J}_z\}$  luego

$$D_{MM'}^j(R_{\alpha\beta\gamma}) = \langle j, M' | \hat{U}(R_{\alpha\beta\gamma}) | j, M \rangle = d_{MM'}^{(j)}(\beta) e^{-i(\alpha M' + \gamma M)}$$

las funciones  $d$  se definen como

$$d_{MM'}^{(j)}(\beta) \equiv \langle j, M' | \hat{U}(R_y(\beta)) | j, M \rangle.$$

Su obtención es bastante latosa, y puede encontrarse en el texto de Wigner (1959). Aquí sólo daremos el resultado final. Tenemos, para  $j$  entero o semientero,

$$d_{MM'}^{(j)}(\beta) = \sum_K (-1)^K \left(\cos \frac{\beta}{2}\right)^{2j+M-M'-2K} \left(\sin \frac{\beta}{2}\right)^{M'-M+2K} \times \frac{\sqrt{(j+M)!(j-M)!(j+M')!(j-M')}}{\Gamma(j-M'-K+1)\Gamma(j+M-K+1)\Gamma(K+1)\Gamma(K+M'-M+1)}.$$

La suma recorre todos los  $K$  enteros o semienteros (según lo sea  $j$ ), positivos o negativos.

**EJERCICIO:** Calcular la matriz tridimensional que representa a la rotación  $R(\theta)$ . Con ella, encontrar la relación entre los parámetros  $\theta$  y los ángulos de Euler.

*Indicación.* Aplíquese  $R(\theta)$  a los tres vectores unitarios a lo largo de los tres ejes,  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{y}$ ,  $\mathbf{z}$  utilizando la fórmula explícita (13.1.1) •

### Apéndice IV: Funciones especiales

Utilizamos la notación de Abramowicz y Stegun (1965), Magnus, Oberhettinger y Soni (1966). En estos libros pueden encontrarse muchos más detalles, fórmulas y (en el primero) tablas. Recopilamos aquí, en especial, fórmulas utilizadas en el texto principal por comodidad de referencia.

#### Armónicos esféricos

Escribimos indistintamente

$$Y_M^l(\hat{\mathbf{r}}) = Y_M^l(\Omega) = Y_M^l(\theta, \phi), \quad \hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/|\mathbf{r}|.$$

Se tiene,

$$Y_M^l(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-M)!}{(l+M)!}} e^{iM\phi} P_l^M(\cos \theta).$$

Aquí, los  $P_l^M$  son las *funciones de Legendre (asociadas)*. Se tiene, además,

$$\int d\Omega Y_M^l(\Omega) * Y_{M'}^l(\Omega) = \delta_{ll'} \delta_{MM'}; \quad d\Omega = d\phi d \cos \theta.$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{M=-l}^{+l} Y_M^l(\Omega)^* Y_M^l(\Omega') = \delta(\Omega - \Omega'); \quad \delta(\Omega - \Omega') = \delta(\phi - \phi') \delta(\cos \theta - \cos \theta').$$

Fórmula de multiplicación:

$$\sum_{M=-l}^l Y_M^l(\hat{\mathbf{r}}_1) Y_M^l(\hat{\mathbf{r}}_2)^* = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\hat{\mathbf{r}}_1 \hat{\mathbf{r}}_2),$$

$$Y_{M_1}^{l_1}(\theta, \phi) Y_{M_2}^{l_2}(\theta, \phi) = \sum_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} \{(2l_1+1)(2l_2+1)/4\pi(2l+1)\}^{1/2} \\ \times (l_1, M_1; l_2, M_2 | l) (l_1, 0; l_2, 0 | l) Y_{M_1+M_2}^l(\theta, \phi),$$

y los  $(\dots | \dots)$  son coeficientes de Clebsch-Gordan.

Fórmula de tipo Gegenbauer:

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{M=-l}^l i^l Y_M^l(\hat{\mathbf{k}})^* Y_M^l(\hat{\mathbf{r}}) j_l(kr); \\ z^\nu e^{i\gamma z} = 2^\nu \Gamma(\nu) \sum_{n=0}^{\infty} i^n (\nu+n) C_n^\nu(\gamma) J_{n+\nu}(z).$$

Aquí  $C_n^\nu$  son los *polinomios de Gegenbauer*; en particular,  $C_n^{1/2}(x) = P_n(x)$ .  $J_n(j_l)$  son las *funciones de Bessel* (*funciones esféricas de Bessel*).

*Función de Airy*

$$\text{Ai}(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dt \cos(t^3/3 + zt).$$

Comportamiento asintótico y desarrollo en serie:

$$\text{Ai}(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{1}{2\sqrt{\pi} x^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}x^{3/2}} \left\{ 1 - \frac{3}{2} \frac{\Gamma(3+1/3)}{54\Gamma(3/2)} x^{-3/2} + \dots \right\};$$

$$\text{Ai}(x) = \frac{1}{\Gamma(1/3)\Gamma(2/3)} \\ \times \left\{ \frac{1}{3^{2/3}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{3^n \Gamma(1/3+n)}{(3n)!} x^{3n} - \frac{1}{3^{1/3}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{3^n \Gamma(2/3+n)}{(3n+1)!} x^{3n+1} \right\}.$$

Ver también texto, sec. 17.4.

*Funciones de Bessel*

$$J_\nu(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-z^2/4)^n}{n! \Gamma(\nu+n+1)}; \\ Y_\nu(z) = \frac{J_\nu(z) \cos \pi\nu - J_{-\nu}(z)}{\text{sen } \pi\nu}.$$

La notación  $N_\nu = Y_\nu$  es también usual.

Las funciones de Bessel de segunda especie se definen por

$$I_\nu(z) = e^{-i\pi\nu/2} J_\nu(iz); \quad K_\nu(z) = \frac{\pi}{2 \operatorname{sen} \pi\nu} \{I_{-\nu}(z) - I_\nu(z)\}$$

Además, podemos escribir

$$K_\nu(z) = \frac{\pi}{2 \operatorname{sen} \pi\nu} \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{(z/2)^{-\nu}}{\Gamma(-\nu + n + 1)} - \frac{(z/2)^\nu}{\Gamma(\nu + n + 1)} \right) \frac{(z^2/4)^n}{n!}.$$

Se definen las funciones esféricas de Bessel por

$$j_\lambda(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{\lambda+1/2}(z); \quad y_\lambda(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} Y_{\lambda+1/2}(z); \quad k_\lambda(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} K_{\lambda+1/2}(z).$$

Para  $n = \text{entero} \geq 0$ ,

$$j_n(z) = z^n \left( \frac{-1}{z} \frac{d}{dz} \right)^n \frac{\operatorname{sen} z}{z}; \quad k_n(z) = \frac{\pi z^n}{2} \left( \frac{-1}{z} \frac{d}{dz} \right)^n \frac{e^{-z}}{z}.$$

Fórmulas de diferenciación:

$$j'_\nu(z) = j_{\nu-1}(z) + \frac{\nu+1}{z} j_\nu(z) = -j_{\nu+1}(z) + \frac{\nu}{z} j_\nu(z);$$

$$k'_\nu(z) = \frac{\nu}{z} k_\nu(z) - k_{\nu+1}(z) = -\frac{\nu+1}{2} k_l(z) - k_{l-1}(z).$$

Ecuación diferencial: si  $W = J, Y$ ,

$$z^2 W'' + zW' + (z^2 - \nu^2)W = 0.$$

Fórmula de Hänkel:

$$\int_0^\infty dx x J_\nu(kx) J_\nu(k'x) = \frac{1}{k} \delta(k - k').$$

Comportamiento asintótico;

$$J_\nu(z) \underset{z \rightarrow \infty}{\approx} \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \left\{ \cos \left( z - \frac{\pi\nu}{2} - \frac{\pi}{4} \right) + O(e^{|\operatorname{Im} z|}/z) \right\},$$

$$Y_\nu(z) \underset{z \rightarrow \infty}{\approx} \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \left\{ \operatorname{sen} \left( z - \frac{\pi\nu}{2} - \frac{\pi}{4} \right) + O(e^{|\operatorname{Im} z|}/z) \right\}.$$

Funciones de Euler

Función gamma de Euler:

$$\Gamma(z+1) = \int_0^{\lambda\infty} d\xi \xi^z e^{-\xi}$$

donde la integral va de 0 a  $\infty$  en cualquier dirección  $\lambda = \lambda_1 + i\lambda_2$  y la fórmula es válida para cualquier  $\lambda_1 > 0$  y cualquier  $\lambda_2$  real.

$$\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\operatorname{sen} \pi z}; \quad |\Gamma(1+iy)|^2 = \frac{2\pi y}{e^{\pi y} - e^{-\pi y}}.$$

$$\Gamma(2z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} 2^{2z-1/2} \Gamma(z)\Gamma(z+1/2); \quad \Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}; \quad \Gamma(1) = 1.$$

$\Gamma(n+1) = n!$  para  $n$  entero.

Fórmula de Stirling:

$$\Gamma(z) \underset{z \rightarrow \infty}{\simeq} (2\pi)^{1/2} e^{-z} z^{z-1/2} \left[ 1 + \frac{1}{12z} + \frac{1}{288z^2} - \frac{139}{51840z^3} - \dots \right].$$

Función beta de Euler: para  $\alpha, \beta$  reales o complejos,

$$B(\alpha+1, \beta+1) = \frac{\Gamma(1+\beta)\Gamma(1+\alpha)}{\Gamma(2+\alpha+\beta)} = \int_0^1 dt t^\alpha (1-t)^\beta.$$

Función digamma, o psi, de Euler:

$$\psi(z) = \frac{d\Gamma(z)}{dz} = -\gamma_E + \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{1}{n+1} - \frac{1}{z+n} \right) = -\gamma_E + \sum_{n=2}^{\infty} (-1)^n \zeta(n) z^{n-1}.$$

$$\psi(z+1) = \psi(z) + 1/z; \quad \psi(n+1) = -\gamma_E + \sum_{l=1}^n \frac{1}{l}, \quad n = \text{entero}.$$

$$\psi(1) = -\gamma_E, \quad \psi(1/2) = -\gamma_E - 2 \log 2.$$

Aquí, la constante de Euler–Mascheroni es  $\gamma_E \simeq 0.577216\dots$  y los números de Riemann son

$$\zeta(n) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j^n}; \quad \zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}, \quad \zeta(3) \simeq 1.202\dots, \quad \text{etc.}$$

Fórmula de Stirling para  $\psi$ :

$$\psi(z) \underset{\substack{z \rightarrow \infty \\ \operatorname{Re} z > 0}}{\simeq} \operatorname{Log} z - \frac{1}{2z} - \frac{1}{12z^2} + \frac{1}{120z^4} - \frac{1}{252z^6} + \dots$$

*Funciones hipergeométricas*

$${}_2F_1(a, b, c; z) = \frac{\Gamma(a)}{\Gamma(b)\Gamma(c)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)\Gamma(b+n)}{\Gamma(c+n)n!} z^n.$$

La ecuación diferencial es

$$z(1-z) {}_2F_1'' + [c - (a+b+1)z] {}_2F_1' - ab {}_2F_1 = 0.$$

*Funciones de Kummer*

Las funciones de Kummer se conocen también como *funciones hipergeométricas confluyentes*, y se las denota por una de las dos expresiones

${}_1F_1(a, b, z) = M(a, b, z)$ ; nosotros utilizaremos la segunda notación. La ecuación diferencial es

$$zM''(a, b, z) + (b - z)M'(a, b, z) - aM(a, b, z) = 0.$$

Sólo describiremos la solución *regular*; una función singular, que se denota por  $U(a, b, z)$ , puede verse en los textos especializados. Tenemos,

$${}_1F_1(a, b, z) \equiv M(a, b, z) \equiv \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)}{n!\Gamma(b+n)} z^n.$$

Una representación integral es

$$M(a, b, z) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)\Gamma(b-a)} \int_0^1 dt e^{zt} t^{a-1} (1-t)^{b-a-1}.$$

Algunas relaciones útiles:

$$\frac{\partial^n}{\partial z^n} M(a, b, z) = \frac{\Gamma(b)\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)\Gamma(b+n)} M(a+n, b+n, z),$$

$$zM(a, b, z) = (b-1) \left\{ M(a, b-1, z) - M(a-1, b-1, z) \right\},$$

$$(1+a-b)M(a, b, z) = aM(a+1, b, z) + (1-b)M(a, b-1, z);$$

$$\int_0^{\infty} dx e^{-\lambda x} x^{\gamma-1} M(a, \gamma, kx) = \Gamma(\gamma) \lambda^{a-\gamma} (\lambda - k)^{-a}$$

(transformada de Laplace);

$$M(a, b, z) = e^z M(b-a, b, -z)$$

(transformación de Kummer).

Asintóticamente,

$$M(a, b, z) \underset{z \rightarrow \infty}{\simeq} \Gamma(b) \left\{ \frac{1}{\Gamma(b-a)} e^{\pm i\pi a} z^{-a} + \frac{1}{\Gamma(a)} e^z z^{a-b} \right\};$$

el signo (+) es válido si  $-\pi/2 \leq \arg z \leq 3\pi/2$ ; el signo (-), cuando  $-3\pi/2 \leq z \leq -\pi/2$ .

Relación con otras funciones:

$$M(a, 2a, 2ix) = \Gamma(a+1/2) e^{ix} \left(\frac{x}{2}\right)^{-a+1/2} J_{a+1/2}(x);$$

$$M(-N, b, z) = \frac{\Gamma(b)\Gamma(N+1)}{\Gamma(N+b)} L_N^{b-1}(z), \quad N = \text{entero} \geq 0.$$

### Funciones y polinomios de Legendre

Las funciones (asociadas) de Legendre, de primera especie, se definen por

$$P_l^M(x) = (-1)^M (1-x^2)^{M/2} \frac{d^M}{dx^M} P_l(x), \quad M \geq 0;$$

$$P_l^{-M} = (-1)^M \frac{(l-M)!}{(l+M)!} P_l^M(x), \quad M \geq 0.$$

Aquí, los polinomios de Legendre son

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l.$$

Relación de recurrencia:

$$(2l+1)P_l(x) = P'_{l+1}(x) - P'_{l-1}(x).$$

Normalización:

$$P_l(1) = 1; \quad |P_l(x)| \leq 1, \text{ si } |x| \leq 1;$$

$$\int_{-1}^{+1} dx P_l^M(x) P_l^M(x) = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+M)!}{(l-M)!} \delta_{ll'}.$$

Ecuación diferencial. Sea  $W_{L,M} = P_L^M$ ,  $Q_L^M$  con

$$Q_L^M(x) = \frac{\pi}{2 \operatorname{sen} M\pi} \left\{ (\cos M\pi) P_L^M - \frac{\Gamma(L+M+1)}{\Gamma(L-M+1)} P_L^{-M} \right\};$$

a las  $Q$  se las conoce como funciones de Legendre de segunda especie. Entonces,

$$(1-x^2)W''_{L,M} - 2xW'_{L,M} + L(L+1)W_{L,M} = \frac{M^2}{1-x^2} W_{L,M}.$$

### Polinomios de Hermite

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}; \quad dH_n(x)/dx = 2nH_{n-1}(x).$$

$$H_n(0) = \begin{cases} (-1)^{n/2} \frac{n!}{(n/2)!}, & n = \text{par} \\ 0, & n = \text{impar}. \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{nm}.$$

Ecuación diferencial:

$$H''_n - 2xH'_n + 2nH_n = 0.$$



Polinomios de Laguerre

$$L_N^\nu(x) = x^{-\nu} \frac{e^x}{N!} \frac{d^N}{dx^N} (x^{N+\nu} e^{-x}) = \sum_{k=0}^N (-1)^k \frac{\Gamma(N + \nu + 1) x^k}{\Gamma(N - k + 1) \Gamma(\nu + k + 1) k!};$$

$$\int_0^\infty dx x^\nu e^{-x} L_N^\nu(x) L_{N'}^\nu(x) = \frac{\Gamma(N + \nu + 1)}{N!} \delta_{NN'}.$$

Ecuación diferencial:

$$xL_N^\nu(x)'' + (\nu + 1 - x)L_N^\nu(x)' + NL_N^\nu(x) = 0.$$

Relaciones de recurrencia:

$$xL_N^\nu(x) = (2N + \nu + 1)L_N^\nu(x) - (N + 1)L_{N+1}^\nu(x) - (N + \nu)L_{N-1}^\nu(x);$$

$$xL_{N+1}^\nu(x) = (N + \nu)L_{N-1}^\nu(x) - (N - x)L_N^\nu(x).$$

Presentamos a continuación dos fórmulas de integración muy útiles; ambas pueden deducirse de una fórmula aún más general debida a Schrödinger (que puede encontrarse, en dos versiones distintas, en los textos de Galindo y Pascual (1978) y Bethe y Salpeter (1974)):

$$\int_0^\infty dx x^\lambda e^{-x} [L_N^k(x)]^2 = \begin{cases} \sum_{r=0}^N \frac{\Gamma(\lambda + 1 + r) \Gamma^2(\lambda + 1 - k)}{\Gamma(r + 1) \Gamma^2(N + 1 - r) \Gamma^2(\lambda + 1 - k - N + r)}, & \lambda > k - 1; \\ \sum_{r=0}^N \frac{\Gamma(\lambda + 1 + r) \Gamma^2(\nu + k - \lambda - r)}{\Gamma(r + 1) \Gamma^2(\nu + 1 - r) \Gamma^2(k - \lambda)}, & \lambda < k. \end{cases}$$

**Apéndice V: Notaciones, fórmulas, magnitudes físicas, unidades**

Notaciones y fórmulas

Un vector posición genérico de una partícula en el espacio tridimensional ordinario lo denotamos por  $\mathbf{r}$ ; a sus componentes por  $r_1 = r_x = x$ ,  $r_2 = r_y = y$ ,  $r_3 = r_z = z$  indistintamente. Las primeras dos notaciones para las componentes ( $u_1 = u_x$ , etc.) las utilizaremos para cualquier vector tridimensional,  $\mathbf{u}$ . También para cualquier vector,  $\mathbf{u}$ , la cantidad  $u = |\mathbf{u}| = +\sqrt{\mathbf{u}^2}$  representa la longitud o módulo del vector. En coordenadas polares,  $x = r \sin \theta \cos \phi$ ,  $y = r \sin \theta \sin \phi$ ,  $z = r \cos \theta$ . Nótese que  $\theta$  varía entre 0 y  $\pi$ , mientras que  $\phi$  lo hace entre 0 y  $2\pi$ . La notación  $d^3r$  representa al elemento de volumen,

$$d^3r = dr_1 dr_2 dr_3 = dx dy dz.$$

La integral de volumen la escribiremos en polares como

$$\int_{R^3} d^3r = \int d\Omega \int_0^\infty dr r^2 = \int_{-1}^{+1} d \cos \theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty dr r^2$$

y  $\Omega = (\cos \theta, \phi)$  es el elemento de ángulo sólido.

El producto escalar de dos vectores (reales)  $\mathbf{u}$ ,  $\mathbf{v}$  es  $\mathbf{u}\mathbf{v} = \sum_{j=1}^3 u_j v_j$ . El producto vectorial es el vector  $\mathbf{w} = \mathbf{u} \times \mathbf{v}$  con componentes

$$w_i = \sum_{k,l=1}^3 \epsilon_{ikl} u_k v_l.$$

Aquí  $\epsilon_{ikl}$  es el tensor completamente antisimétrico (o tensor de Levi-Civita)

$$\epsilon_{123} = \epsilon_{231} = \epsilon_{312} = 1; \quad \epsilon_{213} = \epsilon_{132} = \epsilon_{321} = -1,$$

y  $\epsilon_{ikl}$  se anula si dos índices son iguales. Propiedades útiles de este tensor son

$$\sum_{ikl} \epsilon_{ikl}^2 = 3!, \quad \sum_{kl} \epsilon_{ikl} \epsilon_{jkl} = 2\delta_{ij}, \quad \sum_j \epsilon_{ikj} \epsilon_{rlj} = \delta_{ir} \delta_{kl} - \delta_{il} \delta_{kr}.$$

Los operadores gradiente, divergencia, rotacional y laplaciana se definen como

$$\text{grad } f(\mathbf{r}) = \nabla f(\mathbf{r}) = \frac{d}{d\mathbf{r}} f(\mathbf{r}), \quad (\text{grad } f(\mathbf{r}))_i = \partial f(\mathbf{r}) / \partial r_i;$$

$$\text{div } \mathbf{f}(\mathbf{r}) = \nabla \mathbf{f}(\mathbf{r}) = \partial f_x(\mathbf{r}) / \partial x + \partial f_y(\mathbf{r}) / \partial y + \partial f_z(\mathbf{r}) / \partial z;$$

$$\text{rot } \mathbf{f}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{f}(\mathbf{r}), \quad (\text{rot } \mathbf{f}(\mathbf{r}))_i = \sum_{kl} \epsilon_{ikl} (\partial / \partial r_k) f_l(\mathbf{r});$$

$$\Delta f(\mathbf{r}) = \nabla^2 f(\mathbf{r}) = (\partial^2 / \partial x^2 + \partial^2 / \partial y^2 + \partial^2 / \partial z^2) f(\mathbf{r}).$$

En coordenadas polares,

$$(\text{grad } f)_r = \partial f / \partial r, \quad (\text{grad } f)_\theta = \frac{1}{r} \partial f / \partial \theta, \quad (\text{grad } f)_\phi = \frac{1}{r \sin \theta} \partial f / \partial \phi;$$

$$\text{div } \mathbf{f} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial (r^2 f_r)}{\partial r} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial (\sin \theta f_\theta)}{\partial \theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial (f_\phi)}{\partial \phi};$$

$$(\text{rot } \mathbf{f}(\mathbf{r}))_r = \frac{1}{r \sin \theta} \left( \frac{\partial (\sin \theta f_\phi)}{\partial \theta} - \frac{\partial f_\theta}{\partial \phi} \right),$$

$$(\text{rot } \mathbf{f}(\mathbf{r}))_\theta = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f_r}{\partial \phi} - \frac{1}{r} \frac{\partial f_\phi}{\partial r}, \quad (\text{rot } \mathbf{f}(\mathbf{r}))_\phi = \frac{1}{r} \left( \frac{\partial (r f_\theta)}{\partial r} - \frac{\partial f_r}{\partial \theta} \right).$$

Finalmente,

$$\Delta f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2}.$$

Dos fórmulas útiles de análisis vectorial son las siguientes: Sea  $V$  es un volumen, y  $\partial V$  la superficie que lo limita. Definamos por  $ds$  al elemento de área (un vector perpendicular a la superficie y de longitud  $ds$ ); entonces,

$$\int_V d^3r \nabla \mathbf{f}(\mathbf{r}) = \int_{\partial V} ds \mathbf{f}(\mathbf{r}).$$

Si  $S$  es una superficie y  $\partial S$  el contorno que la rodea; y es  $d\boldsymbol{\ell}$  el elemento de línea (un vector tangente al contorno y de longitud  $d\ell$ ), se tiene

$$\int_S ds \operatorname{rot} \mathbf{f}(\mathbf{r}) = \int_{\partial S} d\boldsymbol{\ell} \mathbf{f}(\mathbf{r}).$$

Una colección de fórmulas puede encontrarse en el texto de Panofsky y Philips (1956), entre otros.

*Coordenadas parabólicas*

Definimos  $\xi, \eta, \phi$  por

$$\xi = r + z, \quad \eta = r - z, \quad \tan \phi = y/x,$$

con inversa

$$x = \sqrt{\xi\eta} \cos \phi, \quad y = \sqrt{\xi\eta} \sin \phi, \quad z = \frac{\xi - \eta}{2}, \quad r = \frac{\xi + \eta}{2}.$$

$\xi, \eta$  varían de 0 a  $\infty$  y  $\phi$  de 0 a  $2\pi$ . El elemento de volumen y el de línea son, en coordenadas parabólicas,

$$d^3r = \frac{\xi + \eta}{4} d\xi d\eta d\phi; \quad d\boldsymbol{\ell}^2 = \frac{\xi + \eta}{4\xi} d\xi^2 + \frac{\xi + \eta}{4\eta} d\eta^2 + \xi\eta d\phi^2.$$

El laplaciano es

$$\Delta = \frac{4}{\xi + \eta} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \right\} + \frac{1}{\xi\eta} \frac{\partial}{\partial \phi^2}.$$

### Algunas integrales y sumas usadas en el texto

Las integrales divergentes deben interpretarse en el sentido de distribuciones. Tenemos:

$$\int_0^\infty dx \frac{\operatorname{sen} x}{x} = \frac{\pi}{2}; \quad \int_0^\infty dx \frac{\operatorname{sen}^2 x}{x^2} = \frac{\pi}{2}; \quad \int_0^\infty dx x^2 \operatorname{sen} x = -2.$$

$$\int_0^\infty dx (\operatorname{sen} kx)(\operatorname{sen} k'x) = \frac{\pi}{2} \delta(k - k').$$

$$\int d^3r \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r} = \frac{4\pi}{k^2}; \quad \int d^3k e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} |\mathbf{k}| = -8\pi/|\mathbf{r}|^4.$$

$$\int d^n k e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} e^{-a^2(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)^2/2} = \left(\frac{2\pi}{a^2}\right)^{n/2} e^{-r^2/2a^2} e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}}.$$

*Ecuaciones de Maxwell*

En el sistema de unidades de Gauss,

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \partial_t \mathbf{B} &= 0, & \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0; \\ \nabla \cdot \mathbf{E} &= 4\pi\rho, & \nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{c} \partial_t \mathbf{E} &= \frac{4\pi}{c} \mathbf{J}; \\ \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \partial_t \mathbf{A} - \nabla\phi, & \mathbf{B} &= \nabla \times \mathbf{A}.\end{aligned}$$

$\rho$  es la densidad de carga y  $\mathbf{J}$  la corriente electromagnética.

**Algunas cantidades útiles en mecánica cuántica**

Los errores se refieren a las últimas cifras; por ejemplo, 1.054 571 596 [82] es equivalente a  $1.054\,571\,596 \pm 0.000\,000\,082$ . Es decir, el 96 del final viene afectado por el error  $\pm 82$ . Seguimos la notación de indicar la separación decimal por un punto.

$$1 \text{ J} = 10^7 \text{ ergios}$$

$$1 \text{ J} = 6.241 \times 10^{18} \text{ eV}.$$

$$1 \text{ eV} = 1.60219 \times 10^{-19} \text{ J}.$$

$$1 \text{ fermi (o femtometro)} = 10^{-15} \text{ m}.$$

$$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}.$$

$$1 \text{ barn} = 10^{-28} \text{ m}^2.$$

$$1 \text{ Volt} = 1 \text{ Joulio/Coulombio} = 6.241 \times 10^{18} \text{ eV/Coul.}$$

$$1 \text{ Tesla} = 10^3 \text{ gr/s} \times \text{Coul.}$$

$$\text{Constante de estructura fina: } \alpha^{-1} = 137.035\,999\,6 [5].$$

$$\text{Velocidad de la luz: } 299\,792\,458 \text{ m s}^{-1}.$$

Constante de Planck (racionalizada):

$$\hbar = 1.054\,571\,596 [82] \times 10^{-34} \text{ J s} = 6.582\,118\,89 [26] \times 10^{-22} \text{ MeV s};$$

$$\hbar c = 1.973\,285\,8 [51] \times 10^{-11} \text{ MeV cm} = 0.624\,007\,8 [16] \text{ GeV mb}^{1/2}.$$

Carga del protón:  $e = 1.602\,176\,462 [63] \text{ Coulombios}$ .

$$\text{Masa del protón: } 1.672\,621\,58 [13] \times 10^{-27} \text{ kg} = 938.271\,998 [38] \text{ MeV}/c^2.$$

$$\text{Masa del neutrón: } 939.2 \text{ MeV}/c^2.$$

$$\text{Energía de ligadura del deuterón: } 2.225 [2] \text{ MeV}.$$

$$\text{Masa del electrón: } 9.109\,381\,88 [72] \times 10^{-31} \text{ kg} = 0.510\,998\,902 [21] \text{ MeV}/c^2$$

Longitud de onda Compton del electrón:

$$\lambda_e = h/m_e c = 2.426\,308\,9 [40] \times 10^{-12} \text{ m}.$$

$$\text{Radio clásico del electrón: } r_e = \alpha \hbar/m_e c = 2.817\,938 \times 10^{-15} \text{ m}.$$

$$\text{Rydberg (energía): } \text{Ry} = \frac{1}{2} m_e c^2 \alpha^2 = 13.605\,804 [36] \text{ eV}.$$

$$\text{Rydberg (frecuencia): } \text{Ry} = m_e c^2 \alpha^2 / 4\pi \hbar = 3.289\,842 [17] \times 10^{15} \text{ ciclos}^{-1}.$$

$$\text{Constante de Boltzmann: } k_B = 8.617\,35 [28] \times 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}.$$

$$\text{Número de Avogadro: } N_A = 6.022\,045 [31] \times 10^{23} \text{ partículas/mol.}$$

$$\text{Constante de Newton: } G_N = 6.672 [4] \times 10^{-8} \text{ cm}^3 \text{ g}^{-1} \text{ s}^{-2}.$$

$$\text{Radio de Bohr: } a_B = 0.529\,177\,06 [44] \text{ \AA}$$

En unidades naturales,  $\hbar = c = 1$ , unas fórmulas útiles son las siguientes:

$$1 \text{ MeV}^{-1} = 1.973 \times 10^{-11} \text{ cm} = 6.582 \times 10^{-22} \text{ s.}$$

$$1 \text{ GeV}^{-2} = 3.894 \times 10^{-4} \text{ barn.}$$

Nótese que en estas unidades energía y masa; longitud y tiempo, etc., se miden en las mismas unidades:  $L = T = 1/M$ , etc.

Fórmulas aproximadas útiles son las siguientes: en el sistema cgs,

$$\hbar \simeq m_e \simeq 10^{-27}.$$

En el sistema natural  $1 \text{ fm} \simeq 1/200 \text{ MeV}$ .

Además, con muy buena aproximación,  $1 \text{ año} \simeq \pi \times 10^7 \text{ segundos}$ .



# Bibliografía

Presentamos una pequeña lista (que no pretendemos que sea exhaustiva) de libros y algunos artículos que complementan lo aquí desarrollado, o que sirven de referencia.

- Abramowicz, M. y Stegun, I. A. (1965). *Handbook of Mathematical Functions*, Dover.
- Aharonov, Y., y Bohm, D. (1959). *Phys. Rev.*, **115**, 485.
- Akhiezer, A., y Berestetskii, V. B. (1963). *Quantum Electrodynamics*, Wiley.
- Álvarez-Estrada, R. F. y Sánchez Gómez, J. L. (1996). *Cien Problemas de Física Cuántica*, Alianza Editorial.
- Bethe, H. A., y Salpeter, E. E. (1957). *Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms*, Springer.
- Bohr, N. (1913). *Phil. Magazine*, **26**, 1476 y 857.
- Born, M. (1926). *Z. Phys.*, **37**, 863; **38**, 803.
- Brown, G. E. y Jackson, A. D. (1976). *The Nucleon-Nucleon Interaction*, North-Holland.
- Dirac, P. A. M. (1930). *Quantum Mechanics*, Oxford University Press.
- Dirac, P. A. M. (1933). *Phys. Z. der Sowjetunion*, **3**, 64.
- Compton, A. H. (1923). *Phys. Rev.* **21**, 483 y 715; **22**, 409.
- Condon, E. U. y Shortley, G. H. (1951). *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press.
- Courant, R. y Hilbert, D. (1953). *Methods of Mathematical Physics*, Vol. I, Interscience.
- de Broglie, L. (1923). *C. R. Acad. Sci. Paris*, **177**, 507, 548 y 630.
- Debye, P. (1912). *Ann. der Phys.* **39**, 789.
- Einstein, A. (1905). *Ann. der Phys.* **17**, 132.
- Einstein, A. (1907). *Ann. der Phys.* **22**, 180.
- Eisberg, R. y Resnick, R. (1974). *Quantum Physics*, Wiley.
- Elton, L. R. B. (1959). *Introductory Nuclear Theory*, Pitman.
- Feynman, R. P. (1948). *Rev. Mod. Phys.* **20**, 367.
- Feynman, R. P. (1965). *The Feynman Lectures in Physics*, Vol. III, Addison-Wesley.
- Feynman, R. P., y Hibbs, A. R. (1965). *Quantum Mechanics and Path Integrals*, Mc Graw-Hill.
- Galindo, A., y Pascual, P. (1978). *Mecánica Cuántica*, Alhambra. Segunda edición, vols. I, II, Eudema, 1989.
- Galindo, A., y Pascual, P. (1989). *Problemas de Mecánica Cuántica*, Eudema.
- Gel'fand, I. M., y Shilov (Chilov), G. E. (1962). *Les Distributions*, Dunod.
- Goldberger, M. L., y Watson, K. (1965). *Collision Theory*, Wiley.
- Goldstein, H. (1965). *Classical Mechanics*, Addison-Wesley.
- Gottfried, K. (1966). *Quantum Mechanics*, Vol. I, Benjamin.
- Heisenberg, W. (1930). *The Physical Principles of Quantum Theory*, Dover.
- Heisenberg, W. (1943). *Z. Phys.* **120**, 513 y 673.

- Kittel, C. (1971). *Introduction to Solid State Physics*, Wiley.
- Landau, L., y Lifshitz, E. (1958). *Quantum Mechanics*, Pergamon.
- Magnus, W., Oberhettinger, F., y Soni, R. P. (1966). *Formulas and Theorems for the Special Functions of Mathematical Physics*, Springer.
- Panofsky, W. K. H., y Philips, M. (1956). *Classical Electromagnetism*. Addison-Wesley.
- Planck, M. (1900). Sitz. K. Preuss. Akad. Wiss., **25**, 544.
- Powell, J. L., y Craseman, B. (1961). *Quantum Mechanics*, Addison-Wesley.
- Sakurai, J. J. (1967). *Advanced Quantum Mechanics*, Addison-Wesley.
- Schiff, L. I. (1968). *Quantum Mechanics*, Addison-Wesley.
- von Neumann, J. (1932). *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, Springer.
- Wheeler, J. A. (1937). Phys. Rev. **52**, 1107.
- Wigner, E. P. (1959). *Group Theory*, Academic Press.
- Ynduráin, F. J. (1996). *Relativistic Quantum Mechanics*, Springer.



# Índice de nombres

- Acción; clásica,  $\mathcal{A}$ ,  $\mathcal{A}_{cl}$ , 40, 119  
Adjunto, de un operador, 16, 350  
Aharonov–Bohm, efecto,  
ver Bohm–Aharonov  
Alcance efectivo, teorema del, 301  
Airy, función de,  $Ai$ , 224, 358  
Amplitud de dispersión, difusión o  
colisión,  $f$ , 125  
Amplitud, de una onda, 7  
Amplitud de onda parcial,  
 $f_l(E)$ ,  $f_l(k)$ , 294  
Amplitud de probabilidad,  $\langle \Phi | \Psi \rangle$ , 11  
Amplitud de transición,  $T$ ,  $F$ , 140,  
316  
Anchura de un estado inestable,  
 $\Gamma$ , 144  
Anchura de una resonancia,  $\Gamma$ , 144  
Anticonmutador,  $\{\hat{A}, \hat{B}\}$ , 155  
Antilineal, 53, 195  
Apantallamiento de una carga eléctrica,  
235  
Armónicos esféricos,  $Y_M^l$ , 168, 357  
Armónicos esféricos, fórmula de  
composición, 173  
Autovalores, autoestados, autovectores,  
autofunciones, 15  
  
BKW, ver WKB  
Balance detallado, principio del, 325  
Balmer, serie de, 217  
Barrera centrífuga, 204  
Base de un espacio de Hilbert, 252  
Bessel, funciones de,  
 $J$ ,  $Y$ ,  $N$ ,  $K$ ,  $I$ , 207, 358, 359  
  
Bohm–Aharonov, efecto, 252  
Bohr, magnetón de  $\mu_B$ , 247  
Bohr, radio de,  $a_B$ ,  $a_0$ , 215  
Bohr–Heisenberg, relación de  
incertidumbre de, 143  
Born, aproximación de;  
serie de, 297, 298, 299  
Bose–Einstein, estadística de, 149  
Bosones, 149  
Bra, vector,  $\langle |$ , 107  
Breit–Wigner, fórmula de, 301  
Bremsstrahlung, 331  
  
Camino (de Feynman), 124  
Campos, 265  
Campos electromagnéticos,  
 $\mathcal{E}$ ,  $\mathcal{B}$ ;  $\mathbf{A}$ ,  $\phi$ , 186, 239, 269  
Campos electromagnéticos cuánticos  
(campo de la radiación), 269  
Canónicas conjugadas, variables  
(operadores), 44  
Cartan, componentes de, 164  
Catástrofe infrarroja, 304, 335  
Centro de masas (c.m.), 201  
Clebsch–Gordan, ver coeficientes de  
Coeficientes de transmisión/  
reflexión, 78, 102  
Coeficientes de Clebsch–Gordan, 170,  
355  
Colisiones, ver dispersión  
Compton, colisión o efecto, 3, 339  
Conjunto completo de observables  
compatibles, 22  
Conmutador,  $[\hat{A}, \hat{B}]$ , 20

- Constante de estructura fina,  $\alpha$ , 3, 216  
 Coordenadas parabólicas, 365  
 Corchetes de Poisson,  $\{f, g\}$ , 44  
 Corriente de probabilidad,  $j$ , 50, 77  
 Coulomb, potencial de;  
     ver potencial coulombiano  
 Cuanto de energía, 2
- de Broglie, longitud de onda de, 4  
 Degeneración accidental, 217  
 Densidad de momento, 263  
 Desfases,  $\delta_l$ , 208, 211, 295  
 Desperdigamiento del paquete de ondas, 286  
 Deuterón, 229  
 Difusión, ver dispersión  
 Dipolar, aproximación, 278  
 Dirac, imagen de, 113  
 Dirac, método de variación de las constantes de, 138  
 Dispersión, 287  
 Dispersión por estados ligados, 307  
 Dispersión por varias interacciones, 326  
 Dispersión cuadrática, 28  
 Dispersión, ley o relación de (para pseudopartículas), 90  
 Distribución, 353  
 Dyson, imagen de, 113
- Ecuación de continuidad, 51  
 Ecuación secular, 138  
 Eikonal, ver iconal  
 Ehrenfest, teorema de, 95  
 Efecto túnel, ver túnel  
 Ensanche, ver desperdigamiento  
 Espectro de valores propios, 18  
 Espín,  $s$ ,  $S$ , 179, 180  
 Estados asintóticos, 315  
 Estados coherentes, 97
- Estados estacionarios, 43  
 Estados mezcla/puros, 110  
 Estados propios de un observable, 15  
 Estadística, ver Fermi-Dirac y Bose-Einstein  
 Estructura fina (del hidrógeno), 233, 234  
 Euler, ángulos de,  $\alpha, \beta, \gamma$ , 158, 365  
 Euler, fórmula de, 308  
 Euler, función  $\Gamma$  de, 359  
 Euler-Lagrange, ecuaciones de, 120  
 Euler-Mascheroni, constante de,  $\gamma_E$ , 360  
 Exponencial-T,  $T \exp$ , 115
- Fermi, factor de, 223, 236  
 Fermi, nivel de,  $E_F$ , 153  
 Fermi, reglas de oro y platino de, 320  
 Fermi-Dirac, estadística de, 150  
 Fermiones, 150, 267  
 Feynman, diagramas de, 333  
 Fluctuaciones cuánticas, 127  
 Fock, espacio de, 155  
 Fonones, 93, 267  
 Fotón,  $\gamma$ , 4  
 Fórmula de polarización, 351  
 Formulación canónica de la mecánica, 44  
 Fotoeléctrico, efecto, 3, 336  
 Fourier, transformación de, 351  
 Frecuencias normales, ver modos normales
- Froissart, cota de, 306, 307  
 Función de Bessel, ver Bessel  
 Función de cuadrado integrable, 348  
 Función de Kummer, ver Kummer  
 Función de onda,  $\Phi, \Psi, \varphi, \psi, \dots$ , 9  
 Función de onda, en espacio de momentos, 33  
 Función de onda de espín,  $\chi, \epsilon$ , 184, 190

- Función de onda radial,  $R(r)$ , 203  
 Función delta de Dirac,  $\delta(x)$ , 353  
 Función característica,  $\chi(x)$ , 353  
 Función escalón,  $\theta(x)$ , 353  
 Función gamma de Euler, ver Euler  
 Función hipergeométrica, 217, 360  
 Función propia, ver estado propio  
 Función signo,  $\text{sign}(x)$ , 353
- Gamma, función,  $\Gamma$ , 359  
 Gauge, de Coulomb o de la radiación, 269  
 Gauge, fijar el, 186  
 Gauge, invariancia local/global, 242  
 Gauge, transformación de, 186, 241  
 Gauge, transformación de (en un retículo), 244  
 Gegenbauer, polinomios de, 219, 358  
 Green, función de  $G_{\mathbf{k}}^{\pm}$ , 311
- Hänkel, fórmula de, 207, 359  
 Hamiltoniano clásico  $H_{cl}$ , 40  
 Hamiltoniano de la radiación,  $\hat{H}_{rad}$ , 217, 276  
 Hamiltoniano, en espacio de momentos, 49  
 Hamiltoniano, en presencia de campos electromagnéticos, 240  
 Hamiltoniano libre,  $\hat{H}_0$ , 47  
 Hamiltoniano, operador,  $\hat{H}$ , 48  
 Hamiltoniano, para partícula en un potencial, 48  
 Haussdorff–Campbell, fórmula de, 352  
 Heisenberg, imagen de, 112  
 Heisenberg, regla de conmutación de, 30  
 Helicidad, 189  
 Hermite, polinomios de,  $H_n(x)$ , 83, 362  
 Hilbert, espacio de,  $\mathfrak{H}$ , 10
- Iconal, aproximación, 312  
 Interacción a primeros vecinos, 89  
 Interacción, imagen de, 113  
 Inversión espacial, 195  
 Inversión temporal, 53, 196
- Ket, vector,  $| \rangle$ , 107  
 Kummer, función de, 217, 222, 360  
 Kummer, relación o transformación de, 361
- Lagrangiano,  $L$ , 40, 119  
 Laguerre, polinomios generalizados de,  $L_N^{\nu}(x)$ , 217, 362  
 Lamb, efecto, 235  
 Laplaciano, 47  
 Legendre, funciones asociadas de,  $P_l^M$ , 167, 367  
 Legendre, polinomios de,  $P_l$ , 362  
 Levi-Civita, tensor de,  $\epsilon_{ijk}$ , 160  
 Lippmann–Schwinger, ecuaciones de, 310  
 Longitud de difusión,  $\alpha_0$ , 301
- Magnetón de Bohr, ver Bohr  
 Magnetón nuclear, 232  
 Matrices de rotación, 365  
 Matriz densidad,  $\hat{\rho}$ , 110  
 Matriz- $S$ , 315  
 Masa reducida,  $m$ , 201  
 Maxwell, ecuaciones de, 186, 365  
 Modos normales, 90  
 Momento cuadrupolar (del deuterón), 232  
 Momento magnético intrínseco, 240  
 Mott, fórmula de, 305

- Norma de un vector,  $\|v\|$ , 10, 348  
 Normales, modos o variables,  
     ver modos  
 Normalización de funciones de  
     onda, 26  
 Número de ondas, vector,  $\mathbf{k}$ , 25  
 Número cuántico magnético,  $M$ , 163  
 Número cuántico principal,  $J$ , 217  
 Número cuántico radial,  $n$ , 217
- Observable, 15  
 Ondas parciales,  $f_i(E)$ ,  $f_i(k)$ , 294  
 Operador: adjunto o hermítico  
     conjugado,  $\hat{A}^\dagger$ , 16  
 Operador: antiunitario  
 Operador: autoadjunto o hermítico  
 Operador: campo, ver campos  
 Operador: de espín, ver espín  
 Operador: en general, 15, 349  
 Operador: escalera (creación/  
     destrucción (o aniquilación)),  
      $\hat{a}^\dagger$ ,  $\hat{a}$ , 84  
 Operador: evolución temporal,  
      $\hat{U}(t_2, t_1)$ , 41  
 Operador: inversión temporal, 196  
 Operador: momento,  $\hat{P}$ , 29, 55, 201  
 Operador: momento, en representación  
     de momentos,  $\hat{P}_p$ , 33  
 Operador: momento, para la radiación,  
      $\hat{P}_{\text{rad}}$ , 272  
 Operador: momento angular,  
      $\hat{\mathbf{L}}$ , 159, 162, 165  
 Operador: momento angular  
     total,  $\hat{\mathbf{J}}$ , 181  
 Operador: normal, 98  
 Operador: paridad, ver paridad  
 Operador: permutación,  $\hat{Q}$ , 150  
 Operador: posición, 27  
 Operador: posición, en representación  
     de momentos,  $\hat{Q}_p$ , 33  
 Operador: rotación, 158  
 Operador: tensorial/vectorial, 174, 176  
 Operador: traslación, 55  
 Operador: variación de uno  
     dado,  $\hat{A}$ , 43  
 Operador: vectorial, 44  
 Operador: velocidad, 296  
 Operadores compatibles, 20  
 Óptico, teorema, 296, 324  
 Ordenación temporal, 115  
 Oscilaciones pequeñas, 81  
 Oscilador anarmónico, 135  
 Oscilador anisótropo, 93  
 Oscilador armónico (en tres  
     dimensiones), 81  
 Oscilador asimétrico, 93  
 Oscilador forzado, 140
- Paquete de ondas, 25  
 Paridad, operador,  $\mathcal{P}$ , 195  
 Paridad de un sistema,  $\eta_P$ , 195  
 Paridad de una permutación,  $\delta_P$ , 150  
 Parte principal (de una integral),  
     P.P.  $\int$ , 355  
 Pauli, espinores de, 185  
 Pauli, hamiltoniano de, 257  
 Pauli, matrices de  $\sigma_i$ , 185  
 Pauli, principio de exclusión de, 151  
 Plancherel, teorema de, 351  
 Planck, constante de,  $h$ ;  
     racionalizada,  $\hbar$ , 2  
 Potencial coulombiano, 215  
 Potencial de Yukawa, ver Yukawa  
 Potencial electromagnético,  
     escalar ( $\phi$ )/vector ( $\mathbf{A}$ ), 186  
 Potencial espín-órbita, 233  
 Potencial separable (o diádico), 79, 329  
 Potencial tensorial, 228  
 Precesión del espín, 247  
 Principio de correspondencia, 22

- Principio de superposición, 10, 107  
 Producto escalar,  $\langle u|v\rangle$ , 11, 348  
 Producto normal, o de Wick, 135  
 Producto-T, 115  
 Propagador,  $D_t(\mathbf{r}_0 \rightarrow \mathbf{r})$ , 121  
 Proyector, 352  
 Pseudopartículas, 93
- Quarkonio,
- Radiación de frenado;  
 ver Bremsstrahlung  
 Regla de platino de Fermi, 320  
 Reglas de superselección, 199  
 Relación de incertidumbre o  
 indeterminación de  
 Heisenberg, 30  
 Relación de incertidumbre energía-  
 tiempo, o de Bohr-Heisenberg,  
 143  
 Relación de cierre, 108  
 Relaciones de conmutación,  
 de Heisenberg, 30  
 Relaciones de conmutación, del  
 momento angular/espín, 160,  
 164, 182  
 Relaciones de conmutación, de las  
 velocidades en presencia de un  
 campo magnético, 243  
 Relaciones de conmutación, de los  
 campos electromagnéticos, 283  
 Representación de momentos, 33  
 Representación de posición, 33  
 Resonancias, 300  
 Rydberg,  $R_y$ , 216
- $S$ , ver matriz- $S$   
 Schrödinger, ecuación de, 42  
 Schrödinger, ecuación de  
 (independiente del tiempo), 43  
 Schrödinger, imagen de, 112  
 Schwartz, desigualdad de, 349  
 Sección eficaz,  $\sigma$ , 288, 320, 328  
 Sección eficaz, diferencial,  
 $d\sigma/d\Omega$ , 292, 322, 329  
 Sección eficaz, en onda  $l$ ,  $\sigma_l$ , 296  
 Sección eficaz, total,  $\sigma_{tot}$ , 296  
 Sistemas de referencia lab., y c.m., 290  
 Slater, determinante de, 152  
 Spin, ver espín  
 Stark, efecto, 251  
 Stirling, fórmula de, 360  
 Sturm, teorema de, 73  
 Superposición, principio de,  
 ver principio de superposición  
 Sustitución mínima, 239, 240  
 Sustitución mínima en un  
 retículo, 244
- Tensor antisimétrico  $\epsilon_{ijk}$ , 160  
 Teorema óptico, 296  
 Transformación antiunitaria, 197  
 Transiciones dipolares, ver Dipolar  
 Túnel, efecto, 71, 101
- Unidades atómicas, 215  
 Unidades naturales, 366
- Valor esperado,  $\langle \hat{F} \rangle$ , 17, 107  
 Valor propio (de un operador), 15  
 Vacío,  $|\Omega\rangle$ ,  $|0\rangle$ , 154  
 Vector bra/ket, 107  
 Vector número de ondas, 25  
 Vector propio (de un operador), 15  
 Vectores polarización del fotón,  
 $\epsilon(\mathbf{k}, \eta)$ ,  $\chi(\mathbf{k}, \eta)$ ,  $\mathbf{e}(\mathbf{k}, \eta)$ , 190  
 Vida media de un estado inestable,  
 $\tau$ , 143

- WKB, aproximación, 98  
WKB, aproximación en el formalismo  
de Feynman, 128  
WKB, aproximación para  
desfases, 296  
Wigner–Eckart, teorema de, 176
- Yukawa, potencial de, 308
- Zeeman, efecto, 248

