

UNIVERSIDAD NACIONAL DE TRUJILLO

Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas

Departamento Académico de Física

# MECÁNICA CUÁNTICA:

## Apuntes introductorios

*Antonio Rivasplata Mendoza*

2008

# Índice general

<b>1. Orígenes de la Teoría Cuántica</b>	<b>1</b>
1.1. La Física a fines del siglo XIX . . . . .	1
1.2. Fenómenos que no pudo explicar la Teoría Clásica . . . . .	2
1.2.1. Radiación del Cuerpo Negro . . . . .	2
1.2.2. Fenómenos corpusculares de la luz . . . . .	5
1.2.3. Espectros de las sustancias. . . . .	7
1.3. Primeros postulados cuánticos . . . . .	13
1.3.1. La hipótesis de Planck . . . . .	14
1.3.2. Teoría fotónica de Einstein . . . . .	15
1.3.3. Teoría semiclásica de Bohr . . . . .	17
<b>2. Fundamentos de la teoría cuántica</b>	<b>19</b>
2.1. Ondas de De Broglie . . . . .	19
2.1.1. Velocidad de fase y de grupo de la onda . . . . .	20
2.1.2. Sentido físico de la onda de De Broglie . . . . .	22
2.2. Probabilidad de la coordenada de un sistema . . . . .	24
2.3. Principio de superposición de estados . . . . .	25
2.4. Probabilidad del impulso . . . . .	26
2.5. Valores promedio de funciones de la coordenada y el impulso . . . . .	28
2.6. Relación de incertidumbre . . . . .	30
<b>3. Descripción cuántica de un sistema</b>	<b>33</b>
3.1. Postulados de la Mecánica Cuántica . . . . .	33
3.2. Operadores de las magnitudes físicas . . . . .	34
3.2.1. Corchetes cuánticos de Poisson . . . . .	35
3.2.2. Vectores propios y operadores de la coordenada . . . . .	36
3.2.3. Vectores propios y operadores del momento lineal . . . . .	37
3.2.4. Forma de los operadores de otras magnitudes físicas . . . . .	38
3.3. Ecuación de Schrödinger . . . . .	39
3.3.1. Ecuación de continuidad . . . . .	41
3.3.2. Ecuación de Schrödinger para estados estacionarios . . . . .	43
3.4. Evolución del valor esperado en el tiempo . . . . .	44

<b>4. Algunas aplicaciones sencillas</b>	<b>46</b>
4.1. Una partícula libre . . . . .	46
4.2. Una partícula en un escalón de potencial . . . . .	47
4.3. Una partícula en una barrera de potencial . . . . .	50
4.4. Un pozo de potencial . . . . .	54
<b>5. El oscilador armónico</b>	<b>58</b>
5.1. Ecuación del oscilador armónico . . . . .	58
5.1.1. Comportamiento asintótico de $\psi(y)$ . . . . .	59
5.1.2. Ecuación para la función $f(y)$ . . . . .	60
5.1.3. Valores propios de la energía. . . . .	60
5.2. Polinomios de Hermite. . . . .	61
5.2.1. Funciones propias del oscilador armónico. . . . .	63
5.2.2. Valores propios de las magnitudes físicas. . . . .	63
5.3. El oscilador armónico en la representación de Fock . . . . .	64
5.3.1. Operadores de creación y aniquilación. . . . .	64
5.3.2. Operadores de las magnitudes físicas. . . . .	66
5.3.3. Vectores propios en la representación de Fock . . . . .	67
5.3.4. El oscilador armónico en varias dimensiones. . . . .	70
<b>6. Teoría del momento cinético</b>	<b>71</b>
6.1. Momento orbital . . . . .	72
6.1.1. Valores propios y vectores propios del momento orbital. . . . .	73
6.2. Teoría general del momento angular. . . . .	79
6.2.1. Operadores de ascenso y descenso . . . . .	80
6.2.2. Valores propios del momento . . . . .	81
6.2.3. Vectores propios del momento . . . . .	83
6.3. El momento orbital en el formalismo general. . . . .	85
6.4. Spin . . . . .	88
6.5. Adición de momentos cinéticos. . . . .	91
6.5.1. Acoplamiento de un momento orbital con un spin 1/2 . . . . .	95
6.5.2. Reglas de recurrencia para los coeficientes de Clebsh-Gordan. . . . .	97
<b>7. Movimiento en campos centrales.</b>	<b>99</b>
7.1. Propiedades generales del problema. . . . .	99
7.2. Una partícula libre. . . . .	102
7.3. El pozo esférico de potencial. . . . .	103
7.3.1. Caso A: $\ell = 0$ . . . . .	104
7.3.2. Caso B: $\ell \neq 0$ . . . . .	105
7.4. Oscilador armónico esférico. . . . .	106
7.5. El átomo de hidrógeno. . . . .	109
7.5.1. Ecuación para la función radial. . . . .	110
7.5.2. Valores posibles de la energía. . . . .	111
7.5.3. Soluciones de la ecuación radial. . . . .	112
7.6. Valores esperados de las magnitudes físicas . . . . .	114

7.7. Espectro del hidrógeno . . . . .	118
7.7.1. Series espectrales del hidrógeno . . . . .	119
<b>8. Teoría de la dispersión</b>	<b>121</b>
8.1. Ecuación de Schrödinger para la dispersión. . . . .	122
8.1.1. Función de Green de la ecuación de Schrödinger. . . . .	124
8.1.2. Aproximación de Born . . . . .	125
8.1.3. Primera aproximación de Born. . . . .	125
8.2. Solución formal de la ecuación de Schrödinger. . . . .	127
8.2.1. Aproximaciones de Born de orden superior . . . . .	129
8.3. Método de ondas parciales . . . . .	131
8.3.1. Ecuación de Schrödinger en coordenadas esféricas. . . . .	131
8.4. Desarrollo de una onda plana en armónicos esféricos . . . . .	134
8.4.1. Amplitud de la dispersión en función de los valores del momento orbital .	138
<b>9. Métodos aproximados en la Mecánica Cuántica</b>	<b>143</b>
9.1. Teoría de perturbaciones estacionarias . . . . .	143
9.1.1. Perturbaciones de niveles sin degeneración . . . . .	145
9.1.2. Perturbación de niveles con degeneración. . . . .	149
9.1.3. Ruptura incompleta de la degeneración. . . . .	151
9.2. Perturbaciones dependientes del tiempo . . . . .	153
9.2.1. Casos particulares. . . . .	157
9.3. Método variacional. . . . .	159
<b>10. Sistemas de partículas idénticas.</b>	<b>162</b>
10.1. Propiedades del hamiltoniano y sus funciones propias. . . . .	162
10.1.1. Operadores de intercambio. . . . .	163
10.2. Sistemas de partículas no interactuantes. . . . .	165
10.3. Método de Hartree-Fock . . . . .	166
<b>11. La ecuación de Dirac</b>	<b>169</b>
11.1. Hamiltoniano de la ecuación de Dirac . . . . .	169
11.2. La ecuación de Dirac en forma covariante . . . . .	173
11.3. Álgebra de las matrices de Dirac . . . . .	176
11.4. Ecuación de Dirac para el electrón libre . . . . .	178
11.5. Ecuación de Dirac en la representación de impulsos. . . . .	180
11.5.1. Ecuación para los espinores adjuntos. . . . .	180
11.5.2. Propiedades de los espinores $\Psi(\pm p)$ . . . . .	182
11.6. Espín de las partículas de Dirac . . . . .	182
11.7. Propiedades de transformación de los espinores. . . . .	185
11.7.1. Traslaciones . . . . .	186
11.7.2. Rotaciones . . . . .	186
11.7.3. Transformaciones de Lorentz . . . . .	188
11.7.4. Inversión de coordenadas . . . . .	190
11.7.5. Inversión del tiempo . . . . .	191
11.7.6. Conjugación de la carga . . . . .	191

11.7.7. Transformación de formas bilineales . . . . .	192
---	-----

# Capítulo 1

## Orígenes de la Teoría Cuántica

### 1.1. La Física a fines del siglo XIX

Durante los siglos XVII-XIX la Física experimentó un crecimiento sin precedentes. Como parte del movimiento renacentista, en la ciencia del siglo XVII se introducen nuevos métodos. En particular, la ciencia deja de ser una disciplina meramente especulativa, ya que comienza a practicarse la verificación experimental de las hipótesis.

En el siglo XVII fue desarrollada la Mecánica, es decir la ciencia que estudia el movimiento. A fines de este siglo Isaac Newton unificó todos los conocimientos obtenidos por Ticho Brage, Nicolás Copérnico, Johannes Kepler, Galileo Galilei y otros, y les dio una estructura lógica y un fundamento matemático, enunciando las leyes del movimiento de los cuerpos, que se conocen como las **Leyes de Newton**.

El final del siglo XVIII y el siglo XIX fueron testigos del desarrollo de la Teoría Electromagnética. Diferentes fenómenos eléctricos y magnéticos fueron descubiertos y estudiados detalladamente por Coulomb, Faraday, Biot, Savart, Hertz, Ampere, Lenz y otros genios. Pero fue James Clark Maxwell quien reunió todo lo descubierto y formuló las ecuaciones de la Electrodinámica, las **Ecuaciones de Maxwell**.

Parecía que empleando ambas teorías podría ser posible explicar todos los fenómenos que pudieran aparecer. En efecto, de acuerdo con la Teoría Clásica, la Naturaleza consta de partículas y campos, y todos los fenómenos pueden ser estudiados, sea empleando las Leyes de la Mecánica, sea las de la Teoría Electromagnética.

Sin embargo, el desarrollo de las técnicas experimentales y de medición permitieron descubrir algunos fenómenos que no encajaban en el marco conceptual clásico. Así, aparecieron fenómenos relacionados con los campos, que no podían ser descritos con las ecuaciones de Maxwell, lo mismo que otros en los que las partículas no podían ser descritas sobre la base de las leyes de Newton.

## 1.2. Fenómenos que no pudo explicar la Teoría Clásica

En este acápite se analizarán aquellos fenómenos cuya explicación sólo fue posible mediante la formulación de hipótesis que constituyeron el inicio del largo camino recorrido hasta llegar a establecer la Teoría Cuántica tal cual se emplea en la actualidad. Entre estos fenómenos se encuentran: La radiación del cuerpo negro, el efecto fotoeléctrico, el efecto Compton y el espectro de las sustancias, en particular del hidrógeno.

### 1.2.1. Radiación del Cuerpo Negro

Supongamos que se tiene cierta radiación en una cavidad totalmente rodeada por paredes opacas, que no permiten su salida, y calentadas hasta cierta temperatura  $T^1$ . Un orificio practicado en tal envoltura se comporta como un **Cuerpo Negro ideal** debido a que en la práctica ningún rayo que incida en el orificio y penetre en la cavidad será emitido, ya que la probabilidad de que salgan es despreciable.

La radiación que escapa de un dispositivo de este tipo es un ejemplo de lo que se entiende como **Radiación del Cuerpo Negro real**. Su estudio experimental permitió verificar la relación entre la densidad espectral de la energía  $\varrho$  y la frecuencia  $\omega$ . Así, se pudo establecer que:

- Para frecuencias pequeñas tal relación es cuadrática.
- Luego, para cierta frecuencia, la función alcanza un máximo
- En el sector de frecuencias altas la función decrece en forma exponencial.

Los intentos por explicar este fenómeno comienzan con Kirchhoff, quien empleó las leyes de la Termodinámica y demostró que la densidad espectral de la energía no depende del material de las paredes de la cavidad, sino sólo es función de la temperatura y la frecuencia. Por lo tanto,  $\varrho = f(\omega, T)$  y la densidad de energía de la radiación  $\mathcal{E}$  se expresa como

$$\mathcal{E} = \int_0^{\infty} \varrho(\omega, T) d\omega \quad (1.1)$$

Por otro lado, de acuerdo con la Electrodinámica Clásica, la función  $u$  está relacionada con los campos promediados. En efecto de la fórmula para energía de la radiación del campo electromagnético

$$E = \frac{1}{8\pi} \int (\mathbf{E}^2 + \mathbf{H}^2) d\mathbf{x} = \int \mathcal{E} d\mathbf{x}$$

---

<sup>1</sup>Alternativamente se puede considerar cierta radiación que se encuentra en equilibrio con una envoltura isotérmica.

se observa que

$$\mathcal{E} = \frac{1}{8\pi} \overline{(\mathbf{E}^2 + \mathbf{H}^2)} = \frac{1}{4\pi} \overline{(E_x^2 + E_y^2 + E_z^2)} = \frac{3}{4\pi} \overline{E_x^2} \quad (1.2)$$

Ya que el campo eléctrico  $E_x$  puede ser desarrollado en una serie de Fourier

$$E_x = \sum_{-\infty}^{\infty} E_{x_n} e^{i\omega_n t}, \quad (1.3)$$

con  $\omega_n = n\omega_0$ , la densidad de la energía se expresará como

$$\mathcal{E} = \frac{3}{4\pi} \overline{\left\{ \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_{x_n} e^{i\omega_n t} \right\}^2} \quad (1.4)$$

y, como siempre se cumple que

$$\left\{ \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n e^{i\omega_n t} \right\}^2 = \sum_{n', n=-\infty}^{\infty} f_n f_{-n'} e^{i\omega_0 t(n-n')}, \quad (1.5)$$

donde  $f_{-n'} = f_n^*$ , lo mismo que

$$\overline{e^{i\omega_0 t(n-n')}} = \frac{1}{\tau} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} e^{i\omega_0 t(n-n')} dt = \begin{cases} 1, & n' = n; \\ 0, & n' \neq n \end{cases} \quad (1.6)$$

la densidad de la energía será igual a,

$$\mathcal{E} = \frac{3}{4\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} |E_{x_n}|^2 \quad (1.7)$$

Si se considera el caso continuo se tendrá<sup>2</sup>

$$\mathcal{E} = \frac{3}{4\pi} \int_0^{\infty} \frac{|E_x(\omega)|^2}{\omega_0} d\omega = \frac{3}{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{|E_x(\omega)|^2}{\omega} d\omega \quad (1.8)$$

De la comparación de las fórmulas (1.1) y (1.8), se deduce que

$$\varrho(\omega) = \frac{3}{2\pi} \frac{|E_x(\omega)|^2}{\omega} \quad (1.9)$$

Ahora es necesario expresar  $|E_x(\omega)|$  a través de la energía promedio  $\overline{E}$ . Para eso hay que tener en cuenta que la cavidad puede ser representada por un conjunto de osciladores cuya

---

2

$\Delta\omega = \omega_{n+1} - \omega_n = (n+1)\omega_0 - n\omega_0 = \omega_0$ , de donde  $1 = \frac{\Delta\omega}{\omega_0}$



energía promedio es determinada completamente por la densidad espectral. Por lo tanto, es conveniente partir calculando la energía promedio de esos osciladores.

Como la ecuación del movimiento de un oscilador es la siguiente

$$\ddot{x} + \omega^2 x = \frac{e}{m_0} E_x + \frac{2}{3} \frac{e^2}{m_0 c^3} \ddot{\ddot{x}} \quad (1.10)$$

$x$  se puede expresar como la serie

$$x = \sum_{-\infty}^{\infty} X_n e^{i\omega_n t}, \quad (1.11)$$

de modo que al reemplazar en la ecuación del oscilador se obtendrá

$$x = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(e/m_0) E_{xn} e^{i\omega_n t}}{\omega^2 - \omega_n^2 + i(2e^2\omega_n^3)/(3m_0c^3)} \quad (1.12)$$

donde  $\omega_n = n\omega_0$ .

Según el teorema del virial, la energía promedio es

$$\overline{E} = \overline{m_0 \dot{x}^2} = m_0 \overline{\left\{ \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{i(\omega_n e/m_0) E_{xn} e^{i\omega_n t}}{\omega^2 - \omega_n^2 + i(2e^2\omega_n^3)/(3m_0c^3)} \right\}^2} \quad (1.13)$$

de tal modo que, si se tiene en cuenta las relaciones (1.5) y (1.6), para el promedio se tendrá

$$\overline{m_0 \dot{x}^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\omega_n^2 e^2 |E_{xn}|^2 / m_0^2}{\{\omega_n^2 - \omega^2\}^2 + \{(2e^2\omega_n^3)/(3m_0c^3)\}^2} \quad (1.14)$$

Esta ecuación presenta un fuerte máximo en la zona de la frecuencia  $\omega$ , razón por la cual la energía del oscilador va a depender fundamentalmente de los términos para los cuales  $\omega = \omega_n = n\omega_0$ . Por tal razón, el módulo  $|E_{xn}|$  puede ser reemplazado por  $|E_{xn_0}|$ , donde  $n_0 = \omega/\omega_0$ . Finalmente,  $d\omega_n = \omega_0 dn = \omega_0 = \omega/n_0$ , ya que  $dn = 1$ .

En consecuencia, para el promedio de la energía se obtiene

$$\overline{E} = 2 \frac{n_0 e^2 |E_{xn_0}|^2}{m_0 \omega} \int_0^{\infty} \frac{\omega_n^2 d\omega_n}{\{\omega_n^2 - \omega^2\}^2 + \{(2e^2\omega_n^3)/(3m_0c^3)\}^2}, \quad (1.15)$$

Si en la relación anterior,  $\omega_n$  es reemplazada por  $\omega$ , salvo en la diferencia  $\omega_n - \omega$  y se introduce la variable  $\xi = \omega_n - \omega$ , la energía promedio se expresará como

$$\overline{E} = 2 \frac{n_0 e^2 |E_{xn_0}|^2}{m_0 \omega} \int_0^{\infty} \frac{d\xi}{4\xi^2 + ((2e^2\omega_n^3)/(3m_0c^3))^2}, \quad (1.16)$$

es decir,

$$\bar{E} = \frac{3\pi n_0 c^3}{2 \omega^3} \cdot |E_{xn_0}|^2 \quad (1.17)$$

En consecuencia,

$$|E_{xn_0}|^2 = \frac{2}{3\pi n_0 c^3} \omega^3 \bar{E}, \quad (1.18)$$

debido a lo cual

$$\varrho(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \bar{E}. \quad (1.19)$$

De acuerdo con la Física Estadística, la distribución de la energía de las partículas está dada por la función

$$N(E) = A e^{-\alpha E}. \quad (1.20)$$

donde  $\alpha = 1/kT$ . Por lo tanto, el promedio de la energía será igual a

$$\bar{E} = \frac{A \int E e^{-\alpha E} dE}{A \int e^{-\alpha E} dE} = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \int_0^{\infty} e^{-\alpha E} dE, \quad (1.21)$$

es decir,

$$\bar{E} = \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \alpha = kT \quad (1.22)$$

y, por lo tanto,

$$\varrho(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT \quad (1.23)$$

La fórmula obtenida sólo describe correctamente el comportamiento experimental de la densidad espectral  $\varrho$  cuando la frecuencia de las ondas emitidas es pequeña. Pero además origina la paradoja denominada “**catástrofe ultravioleta**”, que consiste en que la densidad espectral integrada sobre todas las frecuencias resulta infinita, ya que

$$\mathcal{E} = \int_0^{\infty} \varrho(\omega, T) d\omega = \frac{kT}{\pi^2 c^3} \int_0^{\infty} \omega^2 d\omega = \infty \quad (1.24)$$

### 1.2.2. Fenómenos corpusculares de la luz

A fines del siglo XIX y comienzos del XX fueron descubiertos dos fenómenos provocados por la acción de la luz, cuyas particularidades no podían ser explicados en el marco de la teoría electromagnética, de la cual la luz es una de las manifestaciones. Estos fenómenos recibieron los nombres de **efecto fotoeléctrico** y **efecto Compton**.

## Efecto fotoeléctrico

En 1887 Henrich Hertz descubrió que la descarga eléctrica entre dos electrodos era más intensa, o tenía lugar con menor voltaje, cuando los electrodos eran iluminados con luz ultravioleta. La causa de tal efecto radica en que, bajo la acción de la luz el metal emite electrones que aumentan la intensidad, razón por la cual se le denomina efecto fotoeléctrico.

Después de analizar fenómenos análogos se llegó a establecer que cuando ciertas sustancias son irradiadas con ondas electromagnéticas con una frecuencia mayor que cierto valor mínimo, aquellas emiten electrones. Más precisamente, entre las principales peculiaridades del fenómeno se deben mencionar las siguientes:

- El fenómeno no se observa para todas las frecuencias, sino a partir de un valor dado que se denomina **frecuencia umbral**.
- La energía cinética ( $K$ ) de los electrones que intervienen en la descarga no depende de la intensidad de la onda, sino es directamente proporcional a la frecuencia  $\omega$  de la onda luminosa

$$K \propto \omega \quad (1.25)$$

- La intensidad de la onda sólo determina el número de electrones que el metal emite en la unidad de tiempo. Es más, el efecto tiene lugar incluso a bajas intensidades.

De acuerdo con la Mecánica Clásica, por más especial que pudiera considerarse el sistema, el incremento de la velocidad de los electrones emitidos por el metal debe ser proporcional a la fuerza, la cual, a su vez, es igual al producto de la carga del electrón  $q$  por la intensidad del campo eléctrico  $\mathbf{E}$ . En otras palabras,

$$\Delta v \propto \mathbf{E} \quad (1.26)$$

Por lo tanto, si se tiene en cuenta que al principio el electrón está en reposo, la velocidad final debe ser proporcional a la intensidad del campo, y la energía cinética resultará

$$K \propto \mathbf{E}^2 \quad (1.27)$$

Esto no sucede en realidad. En consecuencia, *en los marcos de la Teoría Clásica no es posible explicar el efecto fotoeléctrico*.

## Efecto Compton

En 1922, Arthur Compton registró un cambio en la longitud de onda de los rayos X que habían pasado a través de ciertas sustancias. Al medir la longitud de onda de los rayos emergentes Compton registró las siguientes características:

- Conjuntamente con la longitud de onda inicial  $\lambda$ , también se registraban otras longitudes de onda  $\lambda'$

- La variación de la longitud de onda  $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$  no depende de la longitud de onda inicial, ni de la sustancia irradiada.
- Para cada orientación de la onda dispersada  $\Delta\lambda$  depende sólo del ángulo de dispersión  $\vartheta$ , concretamente

$$\Delta\lambda \propto \text{sen}^2\vartheta/2 \quad (1.28)$$

La Teoría Clásica tampoco puede explicar este fenómeno. En efecto, según la Teoría Electromagnética, cuando una onda de luz interactúa con la sustancia, la onda provoca la excitación de aquellos componentes del material, cuya frecuencia propia coincide con la de la onda. Como resultado de ello puede haber radiación, pero la frecuencia de las ondas emitidas tiene que coincidir con la de la onda inicial o sus armónicos. *Pero esto no se observa en el experimento.*

### 1.2.3. Espectros de las sustancias.

Se denomina **espectro** de una sustancia al conjunto conformado por todas las frecuencias de las radiaciones que emite. Sucede que sus átomos emiten radiación sólo en determinadas frecuencias, cada una de las cuales en el espectro aparece como **línea espectral**. El estudio de los espectros de las sustancias, en particular, del hidrógeno, desempeñó un papel de primer orden en el camino hacia el entendimiento de la estructura de los constituyentes de la Naturaleza.

Lo primero que se observó es que las líneas espectrales no están distribuidas aleatoriamente, sino que se les puede agrupar en **series espectrales**. Esto se observa incluso en el espectro del átomo de hidrógeno, que es el más simple.

En 1885 Balmer descubrió la serie, que lleva su nombre, cuyas frecuencias se podían expresar por la fórmula

$$\omega = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (1.29)$$

donde  $n = 3, 4, 5, \dots$  y  $R = 2,07 \times 10^{16} \text{ s}^{-1}$  se conoce como **constante de Rydberg**<sup>3</sup>.

En esa misma época fueron registradas otras series espectrales del hidrógeno, las cuales llevan los nombres de sus descubridores y fueron expresadas por fórmulas análogas. Así:

- La serie de Lyman por  $\omega = R(1/1^2 - 1/n^2)$ , donde  $n = 2, 3, \dots$
- La serie de Paschen por  $\omega = R(1/3^2 - 1/n^2)$ , donde  $n = 4, 5, \dots$

<sup>3</sup>En espectroscopía es habitual caracterizar las líneas espectrales por el inverso de la longitud de onda  $\nu' = 1/\lambda = \omega/2\pi c$ , que también es denominado **número de onda**. En estos términos, la serie de Balmer es descrita por la fórmula

$$\nu' = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad \text{donde} \quad R = 109,737309 \text{ cm}^{-1} \quad (1.30)$$

- La serie de Brackett por  $\omega = R(1/4^2 - 1/n^2)$ , donde  $n = 5, 6, \dots$
- La serie de Pfund por  $\omega = R(1/5^2 - 1/n^2)$ , donde  $n = 6, 7, \dots$

De lo anterior se desprende que las frecuencias de todas las series se pueden expresar por

$$\omega = R \left( \frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n' = 1, 2, 3, \dots \quad (1.31)$$

que se conoce como **formula generalizada de Balmer**.

Es necesario subrayar que a medida que aumenta el valor de  $n$  la línea se va disponiendo cada vez más cerca de la anterior y su frecuencia se va acercando a un valor límite llamado **umbral de la serie**.

### Modelos atómicos.

Para explicar las particularidades de los espectros atómicos se trató de establecer un modelo de los átomos, consistente con las leyes de la Mecánica y con los datos experimentales existentes acerca de las sustancias. Pero también era necesario concordarlos con las leyes de la Electrodinámica, que describe la radiaciones que emiten las sustancias.

Hasta esa época ya se conocía que los átomos están constituidos por una masa de carga positiva y partículas muy ligeras de carga negativa. Lo que se ignoraba era la forma cómo estaban distribuidos ambos tipos de carga.

Los primeros modelos propuestos fueron de tipo estático, ya que, de acuerdo con la Electrodinámica, las partículas cargadas en movimiento acelerado (Por ejemplo, el electrón) emiten energía, cuyo valor por unidad de tiempo se expresa mediante la fórmula

$$u = -\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{2}{3} \frac{e^2 a^2}{c^3} \quad (1.32)$$

donde  $e$  es la carga de la partícula,  $a$ , la aceleración,  $c$ , la velocidad de la luz y el signo menos indica que la energía del emisor decrece.

Dos son los modelos clásicos más conocidos: el modelo de Thompson y el de Rutherford, cuyas características son las siguientes:

### Modelo de Thompson

Para el hidrógeno, Thompson propuso un modelo según el cual la carga positiva está uniformemente distribuida en una esfera con un radio  $R_0$  del orden de  $10^{-8} \text{ cm}$  y el electrón se

encuentra dentro de dicha esfera. En este caso, de la ley de Gauss

$$\oint \mathbf{E} \cdot d\mathbf{x} = 4\pi \int \rho dV,$$

donde la densidad  $\rho = 3e_0/4\pi R_0^3$ , se obtiene

$$E_r r^2 = \frac{4\pi}{3} \rho r^3 = \frac{e_0 r^3}{R_0^3}$$

Por tal motivo,

$$\mathbf{E} = \frac{e_0}{R_0^3} \mathbf{x}, \quad \text{de donde} \quad \mathbf{F} = -e_0 \mathbf{E} = -\frac{e_0^2}{R_0^3} \mathbf{x}, \quad (1.33)$$

lo que significa que el electrón estará sujeto a una fuerza elástica orientada hacia el centro del átomo y ocupará el centro de la esfera en el estado de mínima energía.

Si el electrón es sacado de esa posición de equilibrio efectuará un movimiento oscilatorio, cuya ecuación es

$$\ddot{\mathbf{x}} + \omega_0^2 \mathbf{x} = 0 \quad \text{con} \quad \omega_0 = \sqrt{e_0^2/m_0 R_0^3} \quad (1.34)$$

y cuya solución es

$$\mathbf{x} = \mathbf{A} \cos(\omega_0 t + \varphi_0) \quad (1.35)$$

El modelo de Thompson coincide con la teoría clásica de Lorentz, según la cual los átomos pueden ser representados por osciladores armónicos. Pero, desafortunadamente, no puede explicar las peculiaridades de los espectros, ya que, según este modelo, los átomos sólo pueden emitir radiaciones con frecuencia igual a  $\omega_0$  o sus armónicos  $\omega_n = n\omega_0$ .

Sin embargo, el golpe decisivo fue aplicado por los experimentos de dispersión de partículas alfa, ejecutados por Rutherford y su grupo, que demostraron que la carga positiva no está distribuida en todo el volumen del átomo, sino se encuentra confinada en un volumen muchísimo más pequeño.

## Dispersión de partículas alfa.

Con la finalidad de estudiar la estructura de los átomos, en 1911, el grupo de Rutherford bombardeó delgadas placas de metal con partículas alfa<sup>4</sup>, ya que éstas eran las únicas partículas pesadas que se podían obtener con energía suficiente para penetrar en el átomo.

Como resultado de tales experimentos se estableció lo siguiente:

- La gran mayoría de las partículas alfa son dispersadas en ángulos relativamente pequeños ( $2 - 3^\circ$ ).

---

<sup>4</sup>Se denomina partículas alfa a los núcleos de helio, que emiten algunos núcleos más pesados.

- Algunas de las partículas (Por lo menos una de cada diez mil) se dispersan en ángulos muy grandes, incluso de  $180^\circ$ .

La primera característica indica que los átomos son claramente transparentes para las partículas alfa, es decir, tienen una estructura relativamente “abierta”, mientras que la segunda es un testimonio de que el campo eléctrico producido por la carga positiva es muy fuerte, lo que significa que dicha carga debe estar concentrada en un volumen muy pequeño.

En primera aproximación es posible despreciar la interacción de las partículas alfa con los electrones, debido a que la energía de éstos es mucho menor que la de aquéllas. Por lo tanto, la dispersión debe ser provocada fundamentalmente por la acción del campo central creado por el núcleo.

En este caso, deben conservarse la energía  $E$  y el momento orbital  $\mathbf{L}$ , los cuales, en coordenadas polares<sup>5</sup>, se expresan como

$$E = \frac{M_0 v^2}{2} + V = \frac{M_0}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) + \frac{2Ze_0^2}{r} = E_0 \quad (1.36)$$

y

$$L_z = M_0 (\mathbf{x} \times \mathbf{v})_z = M_0 r^2 \dot{\varphi} = L_{z0} \quad (1.37)$$

donde  $E_0$  y  $L_{z0}$  son la energía y el momento orbital en el instante inicial, es decir cuando  $r \rightarrow \infty$  y  $\varphi \rightarrow \pi$ .

Como, en ese instante inicial,

$$L_{z0} = M_0 b v_0, \quad (1.38)$$

donde  $b$  es el parámetro de impacto, se tendrá

$$|\dot{\varphi}| = \frac{v_0 b}{r^2} \quad \text{y} \quad |\dot{r}| = \left| \frac{dr}{d\varphi} \dot{\varphi} \right| \quad (1.39)$$

Para encontrar la ecuación de la trayectoria  $r = f(\varphi)$  es conveniente efectuar el cambio de variable  $u = 1/r$ , después de lo cual se tendrá

$$|\dot{\varphi}| = v_0 b u^2 \quad \text{y} \quad |\dot{r}| = |v_0 b u'| \quad (1.40)$$

donde  $u' = du/d\varphi$ .

En la nueva variable, la ecuación (1.35) tendrá la forma

$$u'^2 + u^2 + \frac{4Ze_0^2}{M_0 v_0^2 b} u - \frac{1}{b^2} = 0 \quad (1.41)$$

así que, después de diferenciarla con respecto a  $\varphi$ , se transformará en la ecuación

$$u'' + u + \frac{2Ze_0^2}{M_0 v_0^2 b^2} = 0 \quad (1.42)$$

---

<sup>5</sup>Ya que el movimiento se realizará en un plano. En este caso  $\mathbf{x} = r\mathbf{e}_r$  y  $\dot{\mathbf{x}} = \dot{r}\mathbf{e}_r + r\dot{\varphi}\mathbf{e}_\varphi$

cuya solución se expresa mediante la fórmula

$$u = A \cos \varphi + B \sin \varphi - \frac{2Ze_0^2}{M_0v_0^2b^2} \quad (1.43)$$

Si se emplea las condiciones iniciales siguientes

$$\lim_{\varphi \rightarrow \pi} \frac{1}{u} = \lim_{\varphi \rightarrow \pi} r = \infty \quad \text{y} \quad \lim_{\varphi \rightarrow \pi} \frac{\sin \varphi}{u} = \lim_{\varphi \rightarrow \pi} r \sin \varphi = b \quad (1.44)$$

las constantes  $A$  y  $B$  resultan iguales a

$$A = -\frac{2Ze_0^2}{M_0v_0^2b^2} \quad \text{y} \quad B = \frac{1}{b}, \quad (1.45)$$

gracias a lo cual la ecuación de la trayectoria quedará expresada como

$$u = \frac{1}{b} \sin \varphi - \frac{2Ze_0^2}{M_0v_0^2b^2} (1 + \cos \varphi) \quad (1.46)$$

Por definición el ángulo de dispersión  $\vartheta$  es igual al ángulo  $\varphi$  ( $\varphi \neq \pi$ ) para el cual  $r$  resulta infinito y, por lo tanto,  $u = 0$ . En este caso, la ecuación anterior se transforma en

$$\cot \frac{\vartheta}{2} = \frac{M_0bv_0^2}{2Ze_0^2} = \frac{bE_0}{Ze_0^2} \quad \longrightarrow \quad b = \frac{Ze_0^2}{E_0} \cot \frac{\vartheta}{2} \quad (1.47)$$

de donde se ve que a mayores ángulos de dispersión les corresponde menores valores de  $b$ .

Luego, es necesario calcular el número de partículas  $dN$  dispersadas en un ángulo  $\vartheta$  dado, más exactamente, el número de partículas que deben ser dispersadas en el anillo que constituye la diferencia de los ángulos sólidos  $\vartheta$  y  $\vartheta + d\vartheta$ , el cual se expresa como

$$d\Omega = 2\pi \sin \vartheta d\vartheta$$

De la ecuación (1.46) se deduce que el ángulo de dispersión sólo depende del parámetro de impacto. Por lo tanto, las partículas que se dispersen en el ángulo sólido  $d\Omega$  serán las que hayan pasado por el anillo delimitado por las circunferencias de radios  $b$  y  $b - db$ .

En consecuencia, si se representa por  $N$  el número de partículas que llegan por unidad de tiempo a una superficie unitaria perpendicular al flujo

$$dN = N2\pi |b db| = N\pi |db^2| = N\pi \left( \frac{Ze_0^2}{E_0} \right)^2 \left| d \cot^2 \frac{\vartheta}{2} \right| \quad (1.48)$$

Al observar procesos de dispersión de partículas se mide la relación  $dN/N$ , que tiene sentido de superficie, se denomina **sección eficaz diferencial** y se representa por  $d\sigma$ . En nuestro caso, después de calcular la derivada de la cotangente de  $\vartheta$ , la sección eficaz resulta expresada por la fórmula

$$d\sigma = \left( \frac{Ze_0^2}{E_0} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4(\vartheta/2)} \quad (1.49)$$

La fórmula anterior describe correctamente los datos obtenidos en los experimentos de dispersión de partículas  $\alpha$ . Por lo tanto, es cierta la hipótesis de que la carga positiva del átomo se encuentra localizada en un pequeñísimo volumen de radio  $10^{-13} \text{ cm}$  y los electrones se encuentran bajo la acción de una fuerza central.



## Modelo de Rutherford

Para explicar los resultados de sus experimentos con partículas alfa, Rutherford propuso un **modelo planetario del átomo** según el cual toda la carga positiva, constituida por casi toda la masa, está concentrada en un núcleo de radio  $R_0 \sim 10^{-13} \text{ cm}$  y los electrones se mueven alrededor de manera similar a los planetas alrededor del Sol.

Veamos pues si el modelo de Rutherford puede explicar las peculiaridades de los espectros atómicos. Para eso es necesario analizar el movimiento de un electrón bajo la acción del campo del núcleo, para el cual la función de Lagrange es

$$\mathcal{L} = K - V = \frac{m_0 v^2}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) + \frac{Z e_0^2}{r} \quad (1.50)$$

Como el campo es estacionario y de carácter central, se conservarán la energía  $E$  y el momento orbital, en este caso la componente  $L_\varphi$

$$E = \frac{m_0 v^2}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) - \frac{Z e_0^2}{r} \quad (1.51)$$

y

$$L_\varphi = m_0 r^2 \dot{\varphi} \quad (1.52)$$

Si se analiza una órbita circular, en cuyo caso  $\dot{r} = 0$ , la ecuación de Lagrange para la coordenada radial  $r$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} = 0 \quad (1.53)$$

se expresa como

$$m_0 r \dot{\varphi}^2 - \frac{Z e_0^2}{r^2} = 0 \quad (1.54)$$

ya que  $d\dot{r}/dt = 0$ .

Por lo tanto,

$$\dot{\varphi}^2 = \frac{Z e_0^2}{m_0 r^3}, \quad (1.55)$$

debido a lo cual

$$E = -\frac{1}{2} \frac{Z e_0^2}{r} \quad (1.56)$$

Los parámetros del movimiento, en tanto que movimiento periódico, pueden ser expresados en términos de los invariantes dinámicos

$$I_i = \oint p_i dq_i, \quad (1.57)$$

los cuales permanecen constantes ( $I_i = \text{const}$ ) cuando se producen cambios adiabáticos en los parámetros del sistema. En nuestro caso,

$$I_\varphi = \oint p_\varphi d\varphi = 2\pi p_\varphi \equiv I, \quad (1.58)$$

ya que  $p_\varphi = m_0 r^2 \dot{\varphi} = \text{const}$ , de donde

$$\dot{\varphi} = \frac{I}{2\pi m_0 r^2} \quad (1.59)$$

Por lo tanto,

$$r = \frac{I^2}{4\pi^2 m_0 Z e_0^2} \quad \text{y} \quad \dot{\varphi} = \frac{8\pi^3 m_0 Z^2 e_0^4}{I^3} \equiv \omega_0 \quad (1.60)$$

de donde

$$E = -2\pi^2 \frac{m_0 Z^2 e_0^4}{I^2} \quad (1.61)$$

Según la Teoría Clásica, en un campo de esta naturaleza los electrones no pueden estar en reposo, sino deben realizar un movimiento en órbitas cerradas con una frecuencia angular igual a

$$\omega_0 = 2\pi \frac{\partial E}{\partial I} = \frac{4\pi^2 m_0 Z^2 e_0^4}{I^3}. \quad (1.62)$$

Por lo tanto, las frecuencias que deberían tener las posibles radiaciones deben ser expresadas como

$$\omega = n\omega_0 = \frac{4n\pi^2 m_0 Z^2 e_0^4}{I^3} \quad (1.63)$$

pero estos valores no coinciden con los de las frecuencias de las series espectrales del hidrógeno.

Por otro lado, el movimiento en órbitas, incluso circulares, es acelerado y, como partículas cargadas, los electrones deben irradiar constantemente a cuenta de su propia energía. Esto significa que deben ir acercándose al núcleo en forma ininterrumpida hasta caer en él.

Mas en la realidad este fenómeno no tiene lugar y los electrones se mantienen en estados con una energía dada. En consecuencia, el modelo de Rutherford *tampoco describe los estados de los electrones en los átomos*.

### 1.3. Primeros postulados cuánticos

En la sección anterior se vio que la Teoría Clásica no podía explicar los fenómenos relacionados con el comportamiento de los cuerpos negros y de las ondas de luz en su interacción con las sustancias, ni los espectros de los sistemas atómicos. Para eso fue necesario postular nuevas hipótesis, las cuales sirvieron de punto de partida en la búsqueda de una nueva teoría, la **Teoría Cuántica**.

### 1.3.1. La hipótesis de Planck

En 1900, Max Planck planteó la hipótesis que permitió explicar correctamente la radiación del cuerpo negro, en particular, describir la correcta dependencia de la densidad espectral  $\varrho$  con respecto de la frecuencia de las radiaciones  $\omega$  y demostrar la inexistencia de la “catástrofe ultravioleta”.

Según esta hipótesis, *la energía de los sistemas microscópicos (átomos, moléculas, etc.) no varía de manera continua, sino tiene sólo un conjunto de valores discretos. Esto significa que la energía emitida no puede ser menor que cierto valor mínimo  $\varepsilon$  y siempre resultará expresada por la fórmula*

$$E = n\varepsilon \quad \text{donde} \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.64)$$

Por lo tanto, al calcular la energía promedio de la radiación del cuerpo negro, la integral de la fórmula (1.20) deberá ser reemplazada por una sumatoria, de tal modo que

$$\bar{E} = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon e^{-\alpha n \varepsilon} = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \frac{\varepsilon}{1 - e^{-\alpha \varepsilon}} = \frac{\varepsilon}{e^{\alpha \varepsilon} - 1}, \quad (1.65)$$

En consecuencia, la densidad espectral será expresada como

$$\varrho = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\varepsilon}{e^{\alpha \varepsilon} - 1}, \quad (1.66)$$

y si se postula que el mínimo de la energía del oscilador es proporcional a la frecuencia, es decir,  $\varepsilon = \hbar\omega$ , se obtiene la fórmula de Planck

$$\varrho(\omega, T) = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} (e^{\hbar\omega/kT} - 1)^{-1}. \quad (1.67)$$

donde  $\hbar = 1,05 \times 10^{-27} \text{ erg.s}$  se denomina **constante de Planck**<sup>6</sup>.

En este caso, la densidad total de la radiación será igual a

$$\mathcal{E} = \int_0^{\infty} \varrho(\omega, T) d\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \int_0^{\infty} \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \quad (1.68)$$

Después de ejecutar el cambio de variable  $\xi = \hbar\omega/kT$  aparece la integral

$$\int_0^{\infty} \frac{\xi^3 d\xi}{e^{\xi} - 1} = \frac{\pi^4}{15} \quad (1.69)$$

así que

$$\mathcal{E} = \frac{k^4 T^4}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{\xi^3 d\xi}{e^{\xi} - 1} = \frac{\pi^2}{15} \frac{k^4 T^4}{c^3 \hbar^3} \quad (1.70)$$

coincidente con la ley de Stefan-Boltzmann.

<sup>6</sup>En realidad, Planck introdujo la constante  $h = 2\pi\hbar$ .

### 1.3.2. Teoría fotónica de Einstein

En 1905 Einstein planteó que la cuantización de la energía emitida (absorbida) por los osciladores, que permitió explicar la radiación del cuerpo negro, no es una “propiedad especial” de los cuerpos, sino más bien de las ondas electromagnéticas.

Según esta hipótesis, *las ondas electromagnéticas están constituidas por corpúsculos, denominados fotones, con una energía  $\varepsilon = \hbar\omega$ . Por tal motivo, al interactuar con la materia, absorben (ceden) energía en porciones discretas, las cuales son múltiplos de  $\varepsilon$ .*

De acuerdo con la teoría clásica, la energía e impulso de una onda luminosa se expresan como

$$\varepsilon = \frac{1}{8\pi} \int (\mathbf{E}^2 + \mathbf{H}^2) d^3x = \frac{1}{4\pi} \int \mathbf{E}^2 d^3x \quad (1.71)$$

y

$$\boldsymbol{\pi} = \frac{1}{4\pi c} \int \mathbf{E} \times \mathbf{H} d^3x = \frac{\mathbf{k}_0}{4\pi c} \int \mathbf{E}^2 d^3x \quad (1.72)$$

de tal modo que

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{k}_0 \frac{\varepsilon}{c} \quad (1.73)$$

Por lo tanto, el momento de un fotón con energía  $\varepsilon = \hbar\omega$  debe ser expresado por la fórmula

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{k}_0 \frac{\hbar\omega}{c} = \mathbf{k}_0 \frac{h}{\lambda} = \hbar\mathbf{k} \quad (1.74)$$

donde  $\mathbf{k}$  es el vector de onda cuyo módulo,  $k = 2\pi/\lambda$ , se conoce como **número de onda**.

En consecuencia, la interacción de la luz con la materia se puede entender como la colisión de los fotones, que constituyen la onda luminosa, con los componentes de las sustancias (átomos, moléculas, etc.). Esta hipótesis permitió explicar los fenómenos que aparecen cuando la luz interactúa con la materia.

### Efecto fotoeléctrico

Las peculiaridades del efecto fotoeléctrico resultan explicadas si se hace acepta que la onda luminosa está compuesta por fotones y se hace uso de la ley de conservación de la energía durante la colisión de fotones de la onda con los electrones del metal.

En efecto, la existencia de una frecuencia umbral se explica porque el electrón no está en estado libre, de modo que necesita una energía mínima para superar la atracción de los campos que lo mantienen ligado. Esta energía se denomina **función de trabajo** y se representa por  $W$ .

Por su parte, la dependencia lineal de la energía cinética ( $K$ ) de los electrones emitivos con respecto de la frecuencia ( $\omega$ ) de la onda incidente se obtiene si se aplica la ley de conservación de la energía

$$\hbar\omega = W + K + m_0c^2, \quad (1.75)$$

de donde resulta que

$$K = \hbar\omega - W - m_0c^2 \quad (1.76)$$

Es conveniente, indicar que *el efecto fotoeléctrico no se produce en caso de interacción de la luz con electrones libres*, ya que en ese caso no se cumplen simultáneamente las leyes de conservación de la energía y el momento lineal.

En efecto, en este caso, de la conservación de la energía resulta

$$\hbar\omega + m_0c^2 = mc^2 \quad \longrightarrow \quad \hbar\omega = (m - m_0)c^2 \quad (1.77)$$

y de la conservación del impulso,

$$\hbar k = mv \quad \longrightarrow \quad \hbar\omega = mvc = m\beta c^2 \quad (1.78)$$

Por lo tanto,

$$m\beta = m - m_0 \quad \longrightarrow \quad 1 - \beta = \sqrt{1 - \beta^2} \quad (1.79)$$

que se satisfaría sólo si  $\beta = 0$  ó  $\beta = 1$ , es decir, si  $v = 0$  ó  $v = c$ . En el primer caso, no hay efecto alguno, ya que el electrón va a contiuar en reposo, en cambio, el segundo es un caso no permitido por la teoría de la relatividad, ya que la energía no puede ser trasportada con velocidades iguales a la de la luz.

## Efecto Compton

El efecto Compton tiene lugar en aquellas sustancias en las que la energía de ligadura del electrón es muy pequeña en comparación con la de los fotones incidentes, de tal modo que los electrones pueden ser considerados libres.

En este caso, de las leyes de conservación de la energía y el impulso se obtendrá

$$\omega - \omega' = \frac{c^2}{\hbar}(m - m_0) \quad (1.80)$$

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \frac{m\mathbf{v}}{\hbar} \quad (1.81)$$

Después de elevar al cuadrado y expresar  $k$  a través de  $\omega/c$  se tendrá

$$\omega^2 + \omega'^2 - 2\omega\omega' = \frac{c^4}{\hbar^2}(m - m_0)^2 \quad (1.82)$$

$$\omega^2 + \omega'^2 - 2\omega\omega' \cos \vartheta = \frac{m^2v^2c^2}{\hbar^2} \quad (1.83)$$

de modo que al restar miembro a miembro se obtiene

$$2\omega\omega'(1 - \cos\vartheta) = \frac{m^2v^2c^2}{\hbar^2} - \frac{m^2c^4}{\hbar^2}(1 - \sqrt{1 - \beta^2})^2 \quad (1.84)$$

El término de la derecha resulta igual a

$$\frac{2m_0c^4}{\hbar^2}(m - m_0) = \frac{m_0c^2}{\hbar}(\omega - \omega') \quad (1.85)$$

gracias a lo cual se obtiene

$$\omega\omega'(1 - \cos\vartheta) = \frac{m_0c^2}{\hbar}(\omega - \omega') \quad (1.86)$$

Como  $\omega = 2\pi c/\lambda$ , la expresión anterior puede ser expresada en términos de las longitudes de onda  $\lambda$  y  $\lambda'$ , para las cuales se obtiene

$$\lambda' - \lambda = \frac{2\pi\hbar}{m_0c}(1 - \cos\vartheta) = 2\lambda_0\text{sen}^2\frac{\vartheta}{2} \quad (1.87)$$

donde

$$\lambda_0 = \frac{2\pi\hbar}{m_0c} = \frac{h}{m_0c} = 2,4 \times 10^{-14} \text{ cm} \quad (1.88)$$

y se conoce como **longitud de onda de Compton**.

### 1.3.3. Teoría semiclásica de Bohr

El espectro del hidrógeno pudo ser explicado en 1913 gracias a dos postulados propuestos por Niels Bohr. En su formulación más conocida estos postulados se expresan como sigue:

- **Postulado de los estados estacionarios.**

*Los átomos tienen una serie de estados estacionarios en los cuales no emiten radiaciones, incluso si se mueven con aceleración. En estos estados la energía tiene un valor definido y sus órbitas pueden ser determinadas de la cuantización de los invariantes adiabáticos*

$$\oint p_i dq_i = nh = 2\pi n\hbar \quad \text{donde} \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.89)$$

- **Postulado de las frecuencias.**

*Al pasar de un estado con energía  $E_n$  a un estado de menor energía  $E_{n'}$ , el átomo emite un quantum de energía  $\hbar\omega$ , cuya frecuencia se calcula mediante la fórmula*

$$\omega = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} \quad (1.90)$$

El primer postulado permite determinar la fórmula correcta para los estados. En efecto, si el invariante adiabático

$$I = 2\pi n\hbar \quad (1.91)$$

entonces

$$r_n = \frac{n^2\hbar^2}{m_0Ze_0^2} \quad \text{y} \quad E_n = -\frac{m_0Z^2e_0^4}{2\hbar^2n^2} \quad (1.92)$$

En consecuencia, el primer valor del radio será

$$r_1 = \frac{1}{Z} \frac{\hbar^2}{m_0e_0^2} = \frac{1}{Z}a_0,$$

donde  $a_0 = \hbar^2/m_0e^2 \approx 0,5 \times 10^{-8} \text{ cm}$  se denomina **radio de Bohr**, y la energía

$$E_1 = -\frac{m_0Z^2e_0^4}{2\hbar^2} = -13,56 \text{ MeV}$$

La fórmula para la frecuencias de la radiaciones emitidas se obtiene del segundo postulado. En efecto,

$$\omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} = \frac{m_0Z^2e_0^4}{2\hbar^3} \left( \frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1.93)$$

donde la expresión  $m_0e_0^4/2\hbar^3$  coincide con el valor de la constante de Rydberg, razón por la cual se la representa por  $R$ , de tal modo que

$$\omega_{nn'} = R \left( \frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1.94)$$

# Capítulo 2

## Fundamentos de la teoría cuántica

Pese a que permitió encontrar la fórmula para calcular los valores correctos de las frecuencias del espectro del hidrógeno, la teoría de Bohr estaba muy lejos de ser satisfactoria. En primer lugar, porque para calcular la intensidad de esas radiaciones se tiene que recurrir a la teoría electromagnética clásica. Pero también debido a que no permitió definir los valores de la energía de los estados estacionarios de otros átomos.

### 2.1. Ondas de De Broglie

A comienzos de los años 20 Louis de Broglie postuló que la dualidad “onda-partícula” podía no ser exclusiva de la luz y propuso ampliarla a las partículas de materia, en particular, a los electrones. Según esta propuesta, un haz de electrones con energía e impulso iguales a

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad \text{y} \quad \mathbf{p} = \frac{m_0 \mathbf{v}}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad (2.1)$$

puede mostrar propiedades ondulares cuyas características fundamentales (frecuencia  $\omega$  y vector de onda  $\mathbf{k}$ ) deberían estar relacionados con los parámetros de las partículas (energía  $E$  e impulso  $\mathbf{p}$ ) mediante las mismas fórmulas que en el caso de la luz, es decir,

$$E = \hbar\omega \quad \text{y} \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad (2.2)$$

Adicionalmente propuso que el movimiento de una partícula libre podría ser identificado con una onda plana

$$\psi(\mathbf{x}, t) = Ae^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{x})} = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p}\mathbf{x})} \quad (2.3)$$

cuya longitud de onda  $\lambda$ , denominada **longitud de onda de De Broglie**, es igual a

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi}{p/\hbar} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{p} \approx 10^{-8} \text{ cm} \quad (2.4)$$

Esta hipótesis permitió fundamentar el primer postulado de Bohr, relacionado con los estados estacionarios y las órbitas permitidas. En efecto, si se afirma que los electrones pueden



encontrarse sólo en aquellas órbitas, cuya longitud es igual a un número entero de longitudes de onda de De Broglie, es decir, si

$$2\pi r = \lambda n \quad \longrightarrow \quad \frac{2\pi r}{\lambda} = n$$

entonces, para velocidades no muy altas (Cuando  $p = m_0 v$ ) se obtiene la cuantización de las órbitas. En efecto,

$$p_\varphi = m_0 v r = p r = \frac{h}{\lambda} r = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi r}{\lambda} = \hbar n \quad (2.5)$$

Poco tiempo después se descubrió un fenómeno que fundamentó la hipótesis de De Broglie. Se observó que cuando un haz de electrones es dispersado en una lámina metálica delgada se obtiene un cuadro de difracción semejante a los que produce la luz. Este fenómeno recibe el nombre de **difracción de electrones** y fue una confirmación de las propiedades ondulatorias de las partículas.

Sin embargo, era necesario compatibilizar las características de la onda plana, como un objeto que se ubica en todo el espacio (Desde  $-\infty$  hasta  $+\infty$ ), con las de la partícula en movimiento libre, que es un objeto localizado en una región finita.

### 2.1.1. Velocidad de fase y de grupo de la onda

En primer lugar, es necesario calcular la velocidad de fase de la onda plana, que por definición es la velocidad con la que se desplaza una fase dada

$$Et - px = \text{const},$$

y compararla con la de la partícula.

Del diferencial de la expresión anterior con respecto del tiempo

$$E dt - p dx = 0 \quad (2.6)$$

se obtiene

$$u_f = \frac{dx}{dt} = \frac{E}{p} = \frac{c^2}{v} \quad (2.7)$$

lo que significa que la onda plana no puede ser identificada con el movimiento de una partícula libre, ya que la energía puede ser transportada sólo a velocidades menores que la de la luz.

La siguiente posibilidad es suponer que la partícula podría estar asociada a un paquete de ondas con frecuencias “casi” iguales, lo cual está de acuerdo con el hecho de que cada línea del espectro, así como, del patrón de difracción, tienen un ancho mínimo.

Con frecuencias casi iguales es posible obtener un paquete de ondas cuya amplitud sea considerable sólo en una zona muy reducida del espacio, es decir, que se exprese mediante la relación

$$A(p') = \begin{cases} 0, & p' > p + \Delta p/2 \\ A/\Delta p', & p - \Delta p/2 < p' < p + \Delta p/2 \\ 0, & p' < p - \Delta p/2 \end{cases} \quad (2.8)$$

En este caso, el paquete de ondas se expresará como

$$\psi(x, t) = \int_{p-\Delta p/2}^{p+\Delta p/2} \frac{A}{\Delta p} e^{-\frac{i}{\hbar}(E't - p'x)} dp' \quad (2.9)$$

donde  $E' = c\sqrt{p'^2 + m_0^2 c^2}$  y puede ser desarrollada en una serie alrededor del punto  $p' = p$ , en cuyo caso se expresará como

$$E' = E + \frac{\partial E}{\partial p}(p' - p) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial p^2}(p' - p)^2 \quad (2.10)$$

Si se ejecuta el cambio de variable  $p' \rightarrow p'' = p' - p$ , la energía se expresará como

$$E' = E + p'' \frac{\partial E}{\partial p} + \frac{p''^2}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial p^2} \quad (2.11)$$

y la fase será igual a

$$E't - p'x = Et - px - p'' \left( x - \frac{\partial E}{\partial p} t \right) \quad (2.12)$$

Por lo tanto, el paquete de ondas tendrá la forma

$$\psi(x, t) = \frac{A}{\Delta p} e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} \int_{-\Delta p/2}^{\Delta p/2} e^{-i \frac{p''}{\hbar} \left( x - \frac{\partial E}{\partial p} t \right)} dp'' \quad (2.13)$$

y después de la integración se transformará en

$$\psi(x, t) = \frac{A}{\Delta p} \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}}{x - \frac{\partial E}{\partial p} t} e^{-i \frac{p''}{\hbar} \left( x - \frac{\partial E}{\partial p} t \right)} \Bigg|_{-\Delta p/2}^{\Delta p/2} = \frac{A \operatorname{sen} \xi}{\xi} e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} \quad (2.14)$$

donde  $\xi = \frac{\Delta p}{2\hbar} \left( x - \frac{\partial E}{\partial p} t \right)$ .

Se ha obtenido una onda “monocromática” con una amplitud

$$B = \frac{A \operatorname{sen} \xi}{\xi}$$

que no es constante en el espacio. Así, en el instante inicial ( $t = 0$ )  $\xi = x\Delta p/2\hbar$ , de tal modo que la función  $B$  tiene un máximo ( $B = A$ ) en  $x = 0$ , para hacerse igual a cero en  $x = \pm\pi$ . El segundo máximo se encuentra en  $x = \pm 3\pi/2$  y es mucho menor que el primero ( $B = -2A/3\pi$ ) y el tercero (en  $x = \pm 5\pi/2$ ) es aún menor ( $B = 2A/5\pi$ ).

La velocidad de grupo del paquete es la velocidad con la que se desplaza un punto dado de la amplitud, es decir, puede ser obtenida calculando el diferencial de  $\xi = \text{const}$ . En este caso, de

$$\xi = \frac{\Delta p}{2\hbar} \left( x - \frac{\partial E}{\partial p} t \right) = \text{const}$$

se obtiene

$$dx - \frac{\partial E}{\partial p} dt = 0 \quad \longrightarrow \quad v_g = \frac{\partial E}{\partial p} \quad (2.15)$$

Como  $E = c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}$ , entonces

$$\frac{\partial E}{\partial p} = c \frac{2p}{\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}} = \frac{c^2 p}{E} = \frac{c^2 m v}{m c^2} = v \quad (2.16)$$

lo que significa que la velocidad de grupo del paquete coincide con la velocidad del movimiento mecánico de la partícula.

Por otro lado, se puede afirmar que la partícula está localizada en la parte del paquete cuyo ancho es la mitad del ancho del primer máximo. Esto significa que como diámetro de la partícula se puede tomar la mitad del ancho del primer máximo  $\Delta\xi \approx \pi$ .

En este caso,

$$\Delta\xi = \frac{\Delta p}{2\hbar} \Delta x \approx \pi$$

y

$$\Delta p \Delta x \approx \pi \quad (2.17)$$

que es conocida como **relación de incertidumbre**.

### 2.1.2. Sentido físico de la onda de De Broglie

El sentido físico de la onda de De Broglie no fue definido fácilmente.

En un principio, *se pretendió identificar las partículas con una formación de ondas, ubicada en una región del espacio*, de tal manera que la intensidad de la onda interviniera como la magnitud que caracteriza la densidad de la partícula.

Esta forma de relacionar la partícula y la onda tenía un fundamento clásico y se basaba en el hecho de que había casos en los que se podía construir formaciones de ondas cuyo movimiento

coincidía con el de la partícula clásica, por ejemplo, el caso analizado en la sección anterior.

Sin embargo, esta coincidencia no es completa ya que la forma del paquete de ondas va cambiando con el tiempo. El hecho es que el paquete se ensancha debido a que las ondas de De Broglie poseen dispersión. En efecto, en el paquete cada onda se desplaza con su propia velocidad ya que de la relación

$$E = c\sqrt{p^2 + m_0^2c^2} \approx m_0c^2 + \frac{p^2}{2m_0} + \dots,$$

válida para velocidades no muy grandes, se deduce que

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{m_0c^2}{\hbar} + \frac{\hbar k^2}{2m_0} + \dots \quad (2.18)$$

y, por lo tanto,

$$v_f = \frac{m_0c^2}{\hbar k} + \frac{\hbar k^2}{2m_0} + \dots = f(k) \quad (2.19)$$

lo que significa que  $v_f$  es función de  $k$ .

En consecuencia, *cualquier cuerpo que conste de una combinación de ondas de De Broglie de diferentes valores de  $k$  resulta inestable, incluso cuando se mueve en el vacío*, y sus dimensiones aumentan ilimitadamente. Esto se percibe con mayor claridad cuando el cuerpo se mueve en un espacio no homogéneo, en particular, durante los experimentos de difracción de electrones que atraviesan una placa metálica delgada.

En este caso, la onda que representa al electrón incidente es un haz orientado y colimado por el diafragma, es decir, limitado en el espacio; en cambio después de la dispersión se tiene un sistema completo de haces difractados en forma de conos.

Si la partícula se pudiera identificar con una formación de ondas, se tendría que antes el electrón es transportado por la onda incidente, mientras que después tiene que ser representado por el sistema completo de ondas difractadas. En otras palabras, cada una de estas deberá representar a una parte del electrón, lo cual está en contra de la noción del electrón como una partícula entera.

Tampoco es posible admitir que las *ondas son un producto de las partículas o aparecen en un medio donde hay un gran número de ellas*. Las observaciones hechas durante la difracción de electrones muestra que el cuadro de difracción no depende de la intensidad del haz incidente, es decir, del número de partículas por unidad de volumen.

En efecto, el cuadro de difracción no varía cuando disminuye la intensidad del haz, es decir, la densidad (el número) de partículas, siempre que en este caso aumente el tiempo de exposición. Esto indica que cada electrón se difracta independientemente.

En consecuencia, si se acepta que, después de haberse difractado, cada electrón actuará sobre la placa sensible y provocará una reacción química, entonces cuando el número de electrones

sea pequeño el cuadro que se obtenga será parecido al de un blanco donde ha disparado un mal tirador.

Sólo si el número de electrones es muy grande, sea porque la intensidad del haz ha sido muy alta, sea porque el tiempo de exposición ha sido muy prolongado, se obtiene en la placa el cuadro de difracción típico de las ondas, en particular, un sistema de anillos.

Este comportamiento llevó a Max Born a proponer una interpretación estadística (probabilística) de la función de onda. Según Born, *la intensidad de la onda de De Broglie en algún lugar del espacio es proporcional a la probabilidad de encontrar la partícula en ese lugar.*

En un caso más general la palabra “onda” es empleada en un sentido totalmente figurado, ya que en estos casos la función

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi(x, y, z, t) \quad (2.20)$$

constituirá una complicada función de las coordenadas. Sin embargo, incluso en estos casos, esta función se denominará **función de onda**.

## 2.2. Probabilidad de la coordenada de un sistema

Como se deduce de la difracción de electrones, la probabilidad de encontrar la partícula en cierto lugar del espacio es determinada por la intensidad de la onda. Pero, debido a que en muchos casos la función de onda puede ser compleja, como medida de la intensidad no se tomará

$$\psi, \quad \text{sino} \quad \psi^2, \quad \text{sino} \quad |\psi|^2 = \psi^* \psi$$

En consecuencia, la probabilidad  $dW$  de encontrar la partícula en la región del espacio  $dV$  limitada por

$$(x, x + dx); (y, y + dy); (z, z + dz) \quad (2.21)$$

se expresará mediante la relación

$$dW(x, y, z, t) = |\psi(x, y, z, t)|^2 dV \quad (2.22)$$

razón por la cual la expresión  $|\psi|^2$  se denomina **densidad de probabilidad** y se representa por  $\varrho$ .

De acuerdo con el teorema de adición de probabilidades, la probabilidad de encontrar la partícula en un espacio finito  $V$  será igual a

$$W(V, t) = \int_V dW(x, y, z, t) dV = \int_V \omega(x, y, z, t) dV = \int_V |\psi(x, y, z, t)|^2 dV \quad (2.23)$$

Si la integración se ejecuta sobre todo el espacio, la expresión obtenida representará la probabilidad de encontrar la partícula en algún lugar cualquiera del espacio, la cual debe ser igual a 1. Por lo tanto,

$$\int_V |\psi(x, y, z, t)|^2 dV = 1 \quad (2.24)$$

La relación anterior constituye una condición, la cual es denominada **normalización** de la función de onda, y la función que la satisface se denomina **normalizada**. En los casos reales el movimiento está limitado a cierta región del espacio, de tal manera que la densidad de probabilidad sólo resulta diferente de cero en una región finita y la normalización no representa dificultad alguna.

Sin embargo, en algunos casos, se tiene que hacer uso de ciertas idealizaciones que son representadas por funciones de cuadrado no integrable y la integral resulta divergente. En estos casos también es posible llegar a una normalización racional.

Finalmente, es necesario subrayar que la normalización tiene sentido si se conserva en el tiempo. Esto significa que la condición de normalización debe satisfacerse para todos los valores de  $t$ .

## 2.3. Principio de superposición de estados

El principio de superposición de estados se enuncia de la siguiente manera: “Si un sistema (una partícula o conjunto de partículas) puede encontrarse tanto en un estado descrito por  $\psi_1$ , como en otro estado expresado por  $\psi_2$ , entonces el sistema también puede encontrarse en un estado cuya función  $\psi$  puede ser expresada como la combinación lineal de ambos, es decir,

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2, \quad (2.25)$$

donde los coeficientes  $c_i$  pueden ser complejos y están relacionados con ciertas características de los estados  $\psi_i$ .

Asimismo, si un sistema puede encontrarse en una serie de posibles estados  $\psi_i$ , que se distinguen uno del otro porque cierta magnitud física  $A$  (energía, impulso, momento angular, etc.) tiene valores  $A_i$  diferentes, entonces puede encontrarse en el estado

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \cdots + c_n\psi_n + \cdots, \quad (2.26)$$

donde,  $n$  puede ser incluso  $\infty$  y, en caso de que esos valores sean infinitamente cercanos, la suma se transforma en integral

$$\psi = \int c(\xi)\psi(\xi)d\xi \quad (2.27)$$

La probabilidad de que al ejecutar una medición de la magnitud  $A$  se obtenga el valor  $A_i$  está relacionada con los coeficientes  $c_i$  ó  $c(\xi)$ , que expresan el peso del estado  $\psi_n$  ó  $\psi(\xi)$  en el estado  $\psi$ .

En particular, una función arbitraria puede ser considerada como una superposición de ondas de De Broglie, cada una de las cuales representa un estado con momento lineal definido, es decir,

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(\mathbf{p}, t) \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{p} \quad (2.28)$$

donde

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\frac{Et - \mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}{\hbar}} \quad (2.29)$$

y  $c(\mathbf{p}, t)$  es la amplitud de la onda de De Broglie en el espacio de momentos  $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ .

En efecto, la integral anterior se puede expresar como

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\mathbf{p}, t) e^{i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}{\hbar}} d\mathbf{p}, \quad (2.30)$$

donde  $\varphi(\mathbf{p}, t) = c(\mathbf{p}) \exp(-iEt/\hbar)$ .

Por tal motivo, de acuerdo con las propiedades de las transformaciones de Fourier,

$$\varphi(\mathbf{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\mathbf{x}, t) e^{-i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}{\hbar}} d\mathbf{x}, \quad (2.31)$$

de donde

$$c(\mathbf{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\mathbf{x}, t) e^{-i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - Et}{\hbar}} d\mathbf{x}, \quad (2.32)$$

## 2.4. Probabilidad del impulso

Según la hipótesis de De Broglie el impulso de una partícula debe ser definido mediante la fórmula<sup>1</sup>

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \mathbf{e}_{\mathbf{k}}.$$

Por tal razón, las operaciones para medirlo deben ser las mismas que para el vector de onda  $\mathbf{k}$ , por ejemplo, los experimentos de difracción de electrones en la superficie de un cristal.

---

<sup>1</sup>Esta definición es correcta porque, en primer lugar, el vector obtenido tiene las propiedades del impulso clásico y, también, porque su valor promedio coincide con el impulso clásico.

En este caso, el estado después de la difracción está constituido por haces que se mueven en distintas direcciones, cada uno de los cuales puede ser representado por ondas de De Broglie con un valor dado del impulso  $\mathbf{p}$ . Por lo tanto, el estado del sistema puede ser expresado como

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{p}} c(\mathbf{p}, t) \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}, t) \quad (2.33)$$

donde la suma se realiza sobre los impulsos  $\mathbf{p}$  de todos los haces.

Cada uno de los haces difractados se caracteriza por tener un valor dado del impulso. Por eso, para saber cuál es la probabilidad de que en el estado resultante  $\psi(\mathbf{x}, t)$  el impulso tenga un valor  $\mathbf{p}$ , se deberá contar el número de partículas que se desplazan en el sentido de ese impulso.

El número de partículas que registre el dispositivo contador, por ejemplo, un cilindro de Faraday, estará expresado por la probabilidad de que la partícula resulte dentro del contador, es decir, es proporcional a  $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ , donde  $\mathbf{x}$  son las coordenadas del cilindro.

Si el dispositivo, que se emplea para contar las partículas, se coloca lo suficientemente lejos de la superficie del cristal sólo registrará las partículas con el impulso deseado. Por tal razón en la sumatoria que expresa la función del estado  $\psi(\mathbf{x}, t)$  sólo estarán presente las ondas con un valor de impulso igual al que se está midiendo, es decir,

$$|\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = |c(\mathbf{p}, t) \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}, t)|^2 = \frac{|c(\mathbf{p}, t)|}{(2\pi\hbar)^3} \quad (2.34)$$

Por lo tanto, la probabilidad de que en el estado, que resulta después de la difracción, el impulso tenga un valor dado es proporcional a  $|c(\mathbf{p}, t)|^2$ . El coeficiente de proporcionalidad se puede tomar igual a uno, razón por la cual la función  $|c(\mathbf{p}, t)|^2$  se toma como densidad de probabilidad del impulso.

La probabilidad de que el impulso de la partículas esté en el intervalo definido por

$$(p_x, p_x + dp_x), (p_y, p_y + dp_y), (p_z, p_z + dp_z), \quad (2.35)$$

se expresará mediante la fórmula

$$dW(\mathbf{p}, t) = |c(\mathbf{p}, t)|^2 d\mathbf{p} \quad (2.36)$$

Si se tiene en cuenta que  $c(\mathbf{p}, t)$  y  $\psi(\mathbf{x}, t)$  se obtienen una de otra de mediante una transformación de Fourier, de la condición de normalización para las funciones de la coordenada  $\psi(\mathbf{x}, t)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} = 1 \quad (2.37)$$

se deduce similar condición de normalización para las funciones del impulso  $c(\mathbf{p}, t)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |c(\mathbf{p}, t)|^2 d\mathbf{p} = 1 \quad (2.38)$$



En efecto, si en la condición de normalización para  $\psi(\mathbf{x})$ , cada una de estas funciones es reemplazada por su transformada se tendrá

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c^*(\mathbf{p}', t) e^{-i\frac{\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x} - Et}{\hbar}} \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} c(\mathbf{p}, t) e^{i\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et}{\hbar}} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} d\mathbf{x} = 1, \quad (2.39)$$

es decir,

$$\int_{-\infty}^{\infty} c^*(\mathbf{p}', t) c(\mathbf{p}, t) \left\{ \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{x}}{\hbar}} d\mathbf{x} \right\} d\mathbf{p}' d\mathbf{p} = 1, \quad (2.40)$$

El integral que está entre las llaves es igual a la función delta  $\delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p})$ . Por lo tanto se tendrá

$$\int_{-\infty}^{\infty} c^*(\mathbf{p}', t) c(\mathbf{p}, t) \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) d\mathbf{p}' d\mathbf{p} = 1, \quad (2.41)$$

expresión que se reduce a

$$\int_{-\infty}^{\infty} |c(\mathbf{p}, t)|^2 d\mathbf{p} = 1, \quad (2.42)$$

lo cual está de acuerdo con la hipótesis de que  $|c(\mathbf{p}, t)|^2$  tiene sentido de densidad de probabilidad.

## 2.5. Valores promedio de funciones de la coordenada y el impulso

Si  $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$  es la densidad de probabilidad de la coordenada, entonces el valor promedio de la coordenada debe ser expresado como

$$\langle \mathbf{x} \rangle = \int \mathbf{x} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} = \int \psi^*(\mathbf{x}, t) \mathbf{x} \psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \quad (2.43)$$

y

$$\langle \mathbf{x}^n \rangle = \int \mathbf{x}^n |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} = \int \psi^*(\mathbf{x}, t) \mathbf{x}^n \psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \quad (2.44)$$

lo que significa que

$$\langle F(\mathbf{x}, t) \rangle = \int F(\mathbf{x}) |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} = \int \psi^*(\mathbf{x}, t) F(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \quad (2.45)$$

Análogamente, si se conoce la densidad de probabilidad del impulso  $|c(\mathbf{p}, t)|^2$  se tendrá

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int \mathbf{p} |c(\mathbf{p}, t)|^2 d\mathbf{p} = \int c^*(\mathbf{p}, t) \mathbf{p} c(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p} \quad (2.46)$$

y

$$\langle \mathbf{p}^n \rangle = \int \mathbf{p}^n |c(\mathbf{p}, t)|^2 d\mathbf{p} = \int c^*(\mathbf{p}, t) \mathbf{p}^n c(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p}, \quad (2.47)$$

es decir,

$$\langle F(\mathbf{p}, t) \rangle = \int F(\mathbf{p}) |c(\mathbf{p}, t)|^2 d\mathbf{p} = \int c^*(\mathbf{p}, t) F(\mathbf{p}, t) c(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p} \quad (2.48)$$

Pero también es posible encontrar el valor promedio de las funciones del impulso cuando se conoce sólo la densidad de probabilidad de la coordenada. En efecto, si se tienen en cuenta que  $c(\mathbf{p}, t)$  es la transformada de Fourier de  $\psi(\mathbf{x}, t)$  la expresión

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int c^*(\mathbf{p}, t) \mathbf{p} c(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p} \quad (2.49)$$

será igual a

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int \psi^*(\mathbf{x}', t) \frac{e^{-i\frac{Et-\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}'}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \mathbf{p} \frac{e^{i\frac{Et-\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}' d\mathbf{x} d\mathbf{p} \quad (2.50)$$

Si se tiene en cuenta que

$$\int \mathbf{p} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{p} = \int i\hbar \nabla e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{p}, \quad (2.51)$$

entonces, después de una integración por partes se tendrá

$$\int \mathbf{p} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{p} = \int e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} (-i\hbar \nabla) \psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{p}. \quad (2.52)$$

ya que en el infinito la función  $\psi(\mathbf{x}) = 0$ . Por lo tanto,

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int \psi^*(\mathbf{x}', t) \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}'-\mathbf{x})}}{(2\pi\hbar)^3} (-i\hbar \nabla \psi(\mathbf{x}, t)) d\mathbf{x}' d\mathbf{x} d\mathbf{p} \quad (2.53)$$

También se debe considerar que el integral

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} d\mathbf{x} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (2.54)$$

razón por la cual para el promedio del momento se tendrá

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int \psi^*(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}) (-i\hbar \nabla) \psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{x}, \quad (2.55)$$

es decir,

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int \psi^*(\mathbf{x}, t) (-i\hbar \nabla) \psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}, \quad (2.56)$$

En consecuencia,

$$\langle \mathbf{p}^n \rangle = \int \psi^*(\mathbf{x}, t) (-i\hbar \nabla)^n \psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \quad (2.57)$$

y

$$\langle F(\mathbf{p}, t) \rangle = \int \psi^*(\mathbf{x}, t) F(-i\hbar\nabla) \psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \quad (2.58)$$

Análogamente se puede comprobar que

$$\langle \mathbf{x} \rangle = \int c^*(\mathbf{p}, t) (i\hbar\nabla_{\mathbf{p}}) c(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p} \quad (2.59)$$

y

$$\langle F(\mathbf{x}, t) \rangle = \int c^*(\mathbf{p}, t) F(i\hbar\nabla_{\mathbf{p}}) \psi(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p} \quad (2.60)$$

## 2.6. Relación de incertidumbre

El problema primordial de la Mecánica Clásica es determinar la trayectoria que sigue un cuerpo en su movimiento. Esto se sustenta en el supuesto de para cualquier instante dado es posible medir simultáneamente la coordenada  $\mathbf{x}$  y el impulso  $\mathbf{p}$ . En efecto, la primera indica la posición en un momento dado y el segundo, la manera como cambia esa posición durante un intervalo infinitamente pequeño

$$\mathbf{x}(t + dt) = \mathbf{x} + \mathbf{v}dt = \mathbf{x} + \frac{\mathbf{p}}{m}dt \quad (2.61)$$

En los ensambles de la Mecánica Estadística las partículas pueden tener las coordenadas e impulsos más variados, pero siempre es posible separar subensambles con coordenadas e impulsos definidos. En cambio, en la Mecánica Cuántica esta separación no es posible.

Para entender el por qué de esta situación es necesario tener presente que, según De Broglie, el impulso de una partícula se define mediante la relación

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}\mathbf{e}_{\mathbf{k}} \quad (2.62)$$

Por otro lado, la magnitud  $\lambda$  se entiende como longitud de onda, independientemente de la naturaleza de las ondas, entonces no puede ser considerada como función de la coordenada<sup>2</sup>. En consecuencia, el impulso no puede ser función de la coordenada, razón por la cual no puede tener un valor definido simultáneamente con la coordenada.

Por ejemplo, en el caso del paquete de ondas

$$\psi(x, t) = \int_{p-\Delta p/2}^{p+\Delta p/2} \frac{A}{\Delta p} e^{-\frac{\hbar}{i}(E't - p'x)} dp' \quad (2.63)$$

---

<sup>2</sup>La expresión “longitud de onda en el punto  $\mathbf{x}$ ” no tiene ningún sentido ya que la longitud de onda es una característica de la onda sinusoidal que se extiende de  $-\infty$  a  $+\infty$ .

que, después de la integración, se expresa como

$$\psi(x, t) = A \frac{\text{sen} \xi}{\xi} e^{-\frac{i}{\hbar} (Et - px)}, \quad (2.64)$$

donde

$$\xi = \frac{\Delta p}{2\hbar} \left( x - \frac{\partial E}{\partial p} t \right), \quad (2.65)$$

la densidad de probabilidad

$$\rho(x, t) = A^2 \frac{\text{sen}^2 \xi}{\xi^2}, \quad (2.66)$$

tiene un máximo pronunciado en el punto  $x = (dE/dp)t$  y los primeros mínimos a una distancia  $\pm\pi/\Delta k$ .

Por tal, razón la mitad de la distancia entre ambos mínimos puede ser considerada como las dimensiones del paquete  $\Delta x$ . Esto significa que

$$\Delta x \Delta k \approx \pi \quad \text{y} \quad \Delta x \Delta p \approx \pi \hbar, \quad (2.67)$$

es decir, mientras menor es el valor de  $\Delta k$  (Mientras menor es la dispersión de los momentos del paquete), mayor será el valor de  $\Delta x$  (Mayor será la dimensión del paquete). Esta característica se denomina **relación de incertidumbre para la coordenada y el impulso** y fue enunciada por Heisenberg.

Para establecer el valor mínimo de esta relación es conveniente tomar como medida de la incertidumbre los cuadrados de la dispersión<sup>3</sup>  $\overline{(\Delta x)^2}$  y  $\overline{(\Delta p)^2}$ , los cuales se expresan como

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{(x - \bar{x})^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2 \quad (2.68)$$

y

$$\overline{(\Delta p)^2} = \overline{(p - \bar{p})^2} = \overline{p^2} - \bar{p}^2 \quad (2.69)$$

Sin que se pierda generalidad, los valores promedio de la coordenada y el impulso pueden tomarse iguales a cero, razón por la cual

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x^2 \psi(x) dx \quad (2.70)$$

y

$$\overline{(\Delta p)^2} = \overline{p^2} = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} dx \quad (2.71)$$

---

<sup>3</sup>No se toma la magnitud  $\overline{\Delta x}$  ya que ésta siempre es cero. En efecto,

$$\overline{\Delta x} = \overline{x - \bar{x}} = \bar{x} - \bar{x} = \bar{x} - \bar{x} = 0$$

Luego es necesario evaluar la integral

$$I(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \xi x \psi(x) + \frac{d\psi(x)}{dx} \right|^2 dx \quad (2.72)$$

donde  $\xi$  es una variable auxiliar real.

Después abrir el módulo se tendrá

$$I(\xi) = \xi^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx + \xi \int_{-\infty}^{\infty} x \left( \psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} + \frac{d\psi^*(x)}{dx} \psi(x) \right) dx + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi^*(x)}{dx} \frac{d\psi(x)}{dx} dx,$$

es decir,

$$I(\xi) = \xi^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx + \xi \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{d\psi^*(x)\psi(x)}{dx} dx + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi^*(x)}{dx} \frac{d\psi(x)}{dx} dx \quad (2.73)$$

donde el segundo y tercer integrales pueden ser transformados y expresados como

$$\int_{-\infty}^{\infty} x \frac{d\psi^*(x)\psi(x)}{dx} = - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x) dx = -1 \equiv -B \quad (2.74)$$

y

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi^*(x)}{dx} \frac{d\psi(x)}{dx} dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} dx = \frac{\overline{(\Delta p)^2}}{\hbar^2} \equiv C \quad (2.75)$$

Como el primer integral es igual a

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx = \overline{(\Delta x)^2} \equiv A \quad (2.76)$$

entonces

$$I(\xi) = A\xi^2 - B\xi + C \geq 0 \quad (2.77)$$

ya que se trata del integral de un módulo al cuadrado.

Para valores reales de  $\xi$  el valor de la integral debe ser estrictamente mayor que 0 de tal modo que la igualdad

$$I(\xi) = 0 \quad (2.78)$$

sólo se satisface si las raíces son complejas, para lo cual es necesario que

$$\sqrt{B^2 - 4AC} \quad \text{es decir} \quad 4AC \geq B^2 \quad (2.79)$$

Después de reemplazar los valores de  $A$ ,  $B$  y  $C$  y efectuar sencillas transformaciones algebraicas se obtiene

$$\overline{(\Delta x)^2} \overline{(\Delta p)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (2.80)$$

que es la expresión matemática de la relación de incertidumbre en su formulación más estricta.

# Capítulo 3

## Descripción cuántica de un sistema

Uno de los principios más empleados en la fundamentación de la Mecánica Cuántica es el **principio de correspondencia**, según el cual *las leyes cuánticas deben desembocar naturalmente en las clásicas cuando el orden de las magnitudes sea lo suficientemente grande*.

Por otro lado los postulados fundamentales tienen que estar fundamentados en los fenómenos físicos que debe describir la teoría. Eso significa que tales postulados deben ser la base de un mecanismo que nos permita describir correctamente los correspondientes fenómenos y sus resultados.

### 3.1. Postulados de la Mecánica Cuántica

Cuando los datos obtenidos durante las observaciones de los sistemas atómicos entraron en abierta contradicción con las leyes de la Física Clásica, Planck, Einstein, De Broglie, Bohr y otros propusieron principios que permitieron explicar e interpretar las paradojas que se observaban. Estas propuestas sirvieron de punto de partida para llegar a los principios en los que se fundamenta la actual descripción cuántica de los átomos y otros conjuntos de micropartículas.

Actualmente se acepta que:

- El estado de un sistema físico es descrito por un vector  $|\Psi\rangle$  perteneciente a un espacio de estados.
- Con cada variable dinámica  $A$  que describe el estado de un sistema cuántico se relaciona un operador lineal hermítico  $\hat{A}$ , cuyos valores propios  $\alpha$  constituyen los únicos valores que pueden tomar dicha variable en el tiempo.
- El espectro  $\{\alpha\}$  de  $\hat{A}$ , que puede ser discreto o continuo, representa el conjunto de valores que puede tomar la magnitud dada, es decir,

$$A = \{\alpha\} = \begin{cases} \alpha_n, & \text{si el espectro es discreto,} \\ \alpha(x), & \text{si es continuo} \end{cases}$$

- Los operadores correspondientes a las variables dinámicas deber ser definidos de tal manera que la relación entre ellos refleje correctamente la que hay entre las correspondientes magnitudes en la Física Clásica.
- Si la magnitud  $A$  tiene valor definido y éste coincide con uno de los valores propios  $\alpha$ , el vector  $|\Psi\rangle$  debe coincidir con el vector propio de  $\hat{A}$  correspondiente al valor  $\alpha$

$$|\Psi\rangle = \begin{cases} |n\rangle, & \text{si el espectro es discreto} \\ |x\rangle, & \text{si es continuo} \end{cases} \quad (3.1)$$

- Si la magnitud  $A$  no tiene valor definido, el vector de estado se expresa como

$$|\Psi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\Psi\rangle = \sum_n \psi_n |n\rangle, \quad (3.2)$$

si el espectro es discreto, y por

$$|\Psi\rangle = \int |x\rangle \langle x|\Psi\rangle dx = \int \psi(x) |x\rangle dx \quad (3.3)$$

si, por el contrario, su espectro fuera continuo.

- El valor esperado de una variable dinámica  $A$  cuando el sistema es descrito por el vector de estado  $|\Psi\rangle$  se expresa como

$$\bar{A} = \langle A \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle \quad (3.4)$$

de donde se deduce que, en caso de una base discreta, se tendrá

$$\bar{A} = \sum_n \alpha_n |\psi_n|^2 \quad (3.5)$$

y, si la base es continua, la fórmula será

$$\bar{A} = \int \alpha(x) |\psi(x)|^2 dx \quad (3.6)$$

## 3.2. Operadores de las magnitudes físicas

La forma concreta de los operadores de las magnitudes físicas depende de la base que se ha tomado en el espacio de estados, la cual, como se indicó anteriormente, puede estar conformada por los vectores propios de un operador hermítico correspondiente a una magnitud física.

Pero también va a influir la relación entre las diferentes magnitudes físicas y las posibilidades de que sean medidas simultáneamente. En efecto, como se verá más adelante, esto se va a reflejar en la conmutatividad o no de los correspondientes operadores.

### 3.2.1. Corchetes cuánticos de Poisson

Uno de los mecanismos que ayuda a elegir la forma correcta de los operadores que representan las magnitudes físicas son los **corchetes cuánticos de Poisson**. Éstos pueden ser definidos si se aplica el principio de correspondencia y se parte de las propiedades de los corchetes clásicos.

En ese caso se puede verificar que si se tiene dos operadores  $\hat{F}$  y  $\hat{G}$ , cada uno de los cuales es producto de otros dos, es decir

$$\hat{F} = \hat{F}_1\hat{F}_2 \quad \text{y} \quad \hat{G} = \hat{G}_1\hat{G}_2$$

su corchete cuántico se expresará como

$$\{\hat{F}, \hat{G}\}_Q = \{\hat{F}_1\hat{F}_2, \hat{G}\}_Q = \hat{F}_1\{\hat{F}_2, \hat{G}\}_Q + \{\hat{F}_1, \hat{G}\}_Q\hat{F}_2 \quad (3.7)$$

pero también será igual a

$$\{\hat{F}, \hat{G}\}_Q = \{\hat{F}, \hat{G}_1\hat{G}_2\}_Q = \hat{G}_1\{\hat{F}, \hat{G}_2\}_Q + \{\hat{F}, \hat{G}_1\}_Q\hat{G}_2 \quad (3.8)$$

Por lo tanto, si en la primera relación  $\hat{G}$  se reemplaza por  $\hat{G}_1\hat{G}_2$  se obtiene

$$\{\hat{F}, \hat{G}\}_Q = \hat{F}_1\hat{G}_1\{\hat{F}_2, \hat{G}_2\}_Q + \hat{F}_1\{\hat{F}_2, \hat{G}_1\}_Q\hat{G}_2 + \hat{G}_1\{\hat{F}_1, \hat{G}_2\}_Q\hat{F}_2 + \{\hat{F}_1, \hat{G}_1\}_Q\hat{G}_2\hat{F}_2 \quad (3.9)$$

y, si en la segunda ecuación, en lugar de  $\hat{F}$  se escribe  $\hat{F}_1\hat{F}_2$ , se tendrá

$$\{\hat{F}, \hat{G}\}_Q = \hat{G}_1\hat{F}_1\{\hat{F}_2, \hat{G}_2\}_Q + \hat{G}_1\{\hat{F}_1, \hat{G}_2\}_Q\hat{F}_2 + \hat{F}_1\{\hat{F}_2, \hat{G}_1\}_Q\hat{G}_2 + \{\hat{F}_1, \hat{G}_1\}_Q\hat{F}_2\hat{G}_2 \quad (3.10)$$

Como los términos de la izquierda de las dos últimas ecuaciones son iguales, también deben serlo los de la derecha. En consecuencia, restando miembro a miembro se obtiene

$$0 = \{\hat{F}_1\hat{G}_1 - \hat{G}_1\hat{F}_1\} \{\hat{F}_2, \hat{G}_2\}_Q - \{\hat{F}_1, \hat{G}_1\}_Q \{\hat{F}_2\hat{G}_2 - \hat{G}_2\hat{F}_2\} \quad (3.11)$$

que solo se puede satisfacer si

$$\{\hat{F}_i, \hat{G}_i\}_Q = \alpha \{\hat{F}_i\hat{G}_i - \hat{G}_i\hat{F}_i\} \quad (3.12)$$

Por otro lado,  $\alpha$  debe ser una constante imaginaria. En efecto, el paréntesis cuántico de  $F$  y  $G$  reales debe ser real, es decir  $\{\hat{F}, \hat{G}\}_Q^+ = \{\hat{F}, \hat{G}\}_Q$ . Entonces, de

$$\{\hat{F}, \hat{G}\}_Q^+ = \alpha^* \{\hat{G}^+\hat{F}^+ - \hat{F}^+\hat{G}^+\} = -\alpha^* \{\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}\} \quad (3.13)$$

y

$$\{\hat{F}, \hat{G}\}_Q = \alpha \{\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}\} \quad (3.14)$$

se deduce que  $\alpha$  es imaginario puro.

Basándose en el principio de correspondencia  $\alpha$  se toma igual a  $i/\hbar$  donde  $\hbar = h/2\pi = 1,0546 \times 10^{-27} \text{ erg.s}$ . En consecuencia,

$$\{\hat{F}, \hat{G}\}_Q = \frac{i}{\hbar} \{\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}\} = \frac{i}{\hbar} [\hat{F}, \hat{G}] \quad (3.15)$$

y

$$[\hat{F}, \hat{G}] = -i\hbar \{\hat{F}, \hat{G}\}_Q \quad (3.16)$$



### 3.2.2. Vectores propios y operadores de la coordenada

En particular, como base del espacio puede tomarse el conjunto de vectores propios  $|x\rangle$  del operador de la coordenada  $\hat{x}$ . Es conveniente recordar que la acción del operador sobre sus vectores propios no es otra que la multiplicación por el correspondiente valor propio, es decir,

$$\hat{x} |x\rangle = x |x\rangle \quad (3.17)$$

En primer lugar es necesario definir la representación de los vectores de la base  $|x\rangle$  en la misma base  $\{x\}$ . Para ello es conveniente tener en cuenta que

$$\langle x'' | \hat{x} | x' \rangle = x'' \langle x'' | x' \rangle \quad (3.18)$$

pero también

$$\langle x'' | \hat{x} | x' \rangle = x' \langle x'' | x' \rangle \quad (3.19)$$

Por lo tanto, si se resta miembro a miembro se obtendrá

$$0 = (x'' - x') \langle x'' | x' \rangle \quad (3.20)$$

de donde se deduce que la representación del vector  $|x\rangle$  en la base  $\{x\}$  tiene la siguiente propiedad

$$\langle x'' | x' \rangle \longrightarrow \begin{cases} \neq 0, & x'' = x' \\ = 0, & x'' \neq x' \end{cases} \quad (3.21)$$

Una función de ese tipo no puede ser otra que la función delta de Dirac, es decir,

$$\langle x'' | x' \rangle = \delta(x'' - x') \quad (3.22)$$

En consecuencia el núcleo  $\mathcal{X}(x'', x')$  del operador de la coordenada  $\hat{x}$  en la base  $\{x\}$  se expresará como

$$\mathcal{X}(x'', x') = \langle x'' | \hat{x} | x' \rangle = x'' \delta(x'' - x') \quad (3.23)$$

Gracias a la forma sencilla que tiene el núcleo obtenido, la acción del operador  $\hat{x}$  resulta simplificada. En efecto, la ecuación

$$|\Psi\rangle = \hat{x}|\Phi\rangle$$

en la representación  $\{x\}$  será igual a

$$\psi(x'') = \int x'' \delta(x'' - x') \phi(x') dx' = x'' \phi(x'') \quad (3.24)$$

Por lo tanto

$$|\Psi\rangle = \hat{x}|\Phi\rangle \quad \longrightarrow \quad \psi(x) = x\phi(x) \quad (3.25)$$

### 3.2.3. Vectores propios y operadores del momento lineal

La forma del operador  $\hat{p}$  que representa el momento lineal  $p_x$ , la variable canónica conjugada a la coordenada  $x$ , se puede determinar si se tiene en cuenta que los corchetes clásicos de Poisson

$$\{p_x, x\} = 1$$

debido a lo cual, el correspondiente conmutador será igual a

$$[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar \quad (3.26)$$

y sus elementos de matriz se expresarán como

$$\langle x'' | [\hat{p}, \hat{x}] | x' \rangle = -i\hbar \langle x'' | x' \rangle \quad (3.27)$$

Pero, por otro lado,

$$\langle x'' | [\hat{p}, \hat{x}] | x' \rangle = \langle x'' | (\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}) | x' \rangle \quad (3.28)$$

igualdad que puede ser desarrollada si se tiene presente que

$$x'' | \hat{p}\hat{x} | x' \rangle = \langle x'' | \hat{p} | x' \rangle x' \quad (3.29)$$

y

$$\langle x'' | \hat{x}\hat{p} | x' \rangle = x'' \langle x'' | \hat{p} | x' \rangle \quad (3.30)$$

Debido a lo anterior se obtiene

$$\langle x'' | (-i\hbar) | x' \rangle = (x' - x'') \langle x'' | \hat{p} | x' \rangle \quad (3.31)$$

razón por la cual el núcleo  $\mathcal{P}(x'', x')$  del operador  $\hat{p}$  será igual a

$$\mathcal{P}(x'', x') = \langle x'' | \hat{p} | x' \rangle = i\hbar \frac{\langle x'' | x' \rangle}{x'' - x'} \quad (3.32)$$

y si se emplea la relación (3.22), se expresará como

$$\mathcal{P}(x'', x') = \langle x'' | \hat{p} | x' \rangle = i\hbar \frac{\delta(x'' - x')}{x'' - x'} \quad (3.33)$$

Si se tiene en cuenta las propiedades de la función delta se tendrá

$$\mathcal{P}(x'', x') = \langle x'' | \hat{p} | x' \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \delta(x'' - x') \quad (3.34)$$

o también

$$\mathcal{P}(x'', x') = \langle x'' | \hat{p} | x' \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x''} \delta(x'' - x') = \quad (3.35)$$

Al igual que en el caso de la coordenada, el núcleo de  $\hat{p}$  también es sencillo y permite ejecutar la integración. En efecto, la ecuación

$$|\Psi\rangle = \hat{p}|\Phi\rangle$$

se expresará como

$$\psi(x'') = i\hbar \int \frac{\partial}{\partial x'} (\delta(x'' - x')) \phi(x') dx' \quad (3.36)$$

Al integrar por partes se tendrá

$$\psi(x'') = i\hbar \delta(x'' - x') \phi(x') \Big|_{-\infty}^{\infty} - i\hbar \int \delta(x'' - x') \frac{\partial}{\partial x'} \phi(x') dx' \quad (3.37)$$

y, como la función  $\delta(x'' - x')$  es cero en el infinito, la expresión anterior se reduce a

$$\psi(x'') = -i\hbar \int \delta(x'' - x') \frac{d}{dx'} \phi(x') dx' = -i\hbar \frac{d}{dx''} \phi(x'') \quad (3.38)$$

En consecuencia,

$$|\Psi\rangle = \hat{p} |\Phi\rangle \quad \longrightarrow \quad \psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} \phi(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \phi(x) \quad (3.39)$$

### 3.2.4. Forma de los operadores de otras magnitudes físicas

La forma de los operadores que representan a funciones de las variables canónicas  $x$  y  $p$  se obtiene reemplazando las variables por sus correspondientes operadores. Si su desarrollo en una serie de Taylor no contiene términos cruzados  $px$  ó  $xp$  el operador obtenido resulta hermitico. Así el operador de la energía cinética de una partícula se expresa como

$$\hat{K} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad (3.40)$$

Si, en cambio, el desarrollo contuviera términos cruzados el operador obtenido resulta no hermitico y debe ser hermitizado tomando la suma del operador más su adjunto. Por ejemplo, si el desarrollo contuviera  $xp$  el operador tendrá la forma

$$\hat{N} = \frac{1}{2} (\hat{p}\hat{x} + \hat{x}\hat{p}) \quad (3.41)$$

Si el movimiento de los sistemas cuánticos se realiza en tres dimensiones, las funciones que representan los vectores que describen los estados de los sistemas serán funciones de las tres coordenadas y el tiempo, es decir

$$|\Phi\rangle \quad \longrightarrow \quad \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (3.42)$$

y los operadores constituirán vectores tridimensionales

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x} \quad \text{y} \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} = -i\hbar \nabla \quad (3.43)$$

cuyos conmutadores serán los siguientes

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (3.44)$$

### 3.3. Ecuación de Schrödinger

Uno de los problemas más importantes de la Mecánica Cuántica es determinar cómo evoluciona el estado descrito por un vector arbitrario, que en la representación  $\{\mathbf{x}\}$  se expresa mediante una función de la variable  $x$  y del tiempo  $t$ .

El principio de causalidad establece que *si la función de onda describe totalmente un estado también debe describir su evolución posterior*. Matemáticamente ésto significa que la función de onda en el instante inicial  $\Psi(\mathbf{x}, t_0)$  debe determinar totalmente la función en un instante posterior  $\Psi(\mathbf{x}, t)$ .

Si la función de onda  $\Psi(\mathbf{x}, t_0 + \Delta t)$  correspondiente a un instante  $t = t_0 + \Delta t$  infinitamente cercano al inicial se expandiera en una serie de Taylor se tendría

$$\Psi(\mathbf{x}, t_0 + \Delta t) = \Psi(\mathbf{x}, t_0) + \left\{ \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \right\}_{/t=t_0} \Delta t + \dots \quad (3.45)$$

entonces, aplicando el principio de causalidad se deducirá que la primera derivada de la función de onda se deberá expresar a través de la misma función, es decir será resultado de alguna operación ejecutada sobre la función de onda. En consecuencia,

$$\left\{ \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \right\}_{/t=t_0} = \hat{L}(\mathbf{x}, t_0) \Psi(\mathbf{x}, t_0) \quad (3.46)$$

$\hat{L}$  es el operador que representa la acción realizada sobre la función  $\Psi(\mathbf{x}, t)$  para obtener la primera derivada y como  $t_0$  es un instante arbitrario, entonces se deduce que

$$\frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \hat{L}(\mathbf{x}, t) \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (3.47)$$

La forma del operador al que podemos llamar **operador de desplazamiento en el tiempo** no se puede deducir fácilmente de los principios de la Mecánica Cuántica y debe ser postulado. Sin embargo, considerando que la función de estado debe satisfacer el principio de superposición, se puede indicar que  $\hat{L}$  debe ser un operador lineal.

Por otro lado, se puede afirmar que el operador no debe contener derivadas sobre el tiempo: ni primera, porque lo que se trata es justamente de representar esa derivada a través de otra operación, ni de orden superior, porque ésto contradice el postulado de que para conocer la función en un instante posterior sólo se necesita conocer la función en un instante dado. El operador tampoco puede contener integrales sobre el tiempo, ya que ésto significaría que para determinar la función en un instante posterior se necesita conocerla en todo un lapso, es decir conocer la historia del proceso, lo que contradice lo postulado. En consecuencia, el operador puede contener  $t$  sólo como parámetro.

Finalmente, si se tiene en cuenta que el cuadrado de la función de estado tiene sentido de densidad de probabilidad se tiene que

$$\int_{(V)} |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} = 1 \quad \text{es decir} \quad \frac{d}{dt} \int_{(V)} |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} = 0 \quad (3.48)$$

que al ser desarrollado se transforma en

$$\int_{(V)} \frac{\partial \Psi^*(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{r} + \int_{(V)} \Psi^*(\mathbf{x}, t) \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} d\mathbf{x} = 0 \quad (3.49)$$

Las derivadas de la función  $\Psi(\mathbf{x}, t)$  con respecto del tiempo pueden ser reemplazadas por  $\hat{L}\Psi(\mathbf{x}, t)$ , gracias a lo cual se obtiene

$$\int_{(V)} \hat{L}^+ \Psi^*(\mathbf{x}, t) \Psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{r} + \int_{(V)} \Psi^*(\mathbf{x}, t) \hat{L} \Psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} = 0 \quad (3.50)$$

y esto es igual a

$$\int_{(V)} \Psi^*(\mathbf{x}, t) [\hat{L}^+]^+ \Psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} + \int_{(V)} \Psi^*(\mathbf{x}, t) \hat{L} \Psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} = 0 \quad (3.51)$$

La ecuación anterior implica que

$$\int_{(V)} \Psi^*(\mathbf{x}, t) (\hat{L}^+)^+ \Psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} = \int_{(V)} \Psi^*(\mathbf{x}, t) (-\hat{L}) \Psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \quad (3.52)$$

de donde se deduce que

$$(\hat{L}^+)^+ = -\hat{L} \quad (3.53)$$

lo que significa que el operador  $\hat{L}$  es antihermítico.

Para postular su forma correcta se analiza el movimiento de una partícula con valor definido del momento lineal, que es descrita por una onda de De Broglie

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = N e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})} \quad (3.54)$$

donde

$$E = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} \quad (3.55)$$

Por sustitución directa se puede demostrar que dicha onda satisface la siguiente ecuación diferencial

$$\frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (3.56)$$

la cual puede ser expresada como

$$\frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (3.57)$$

si por  $\hat{H}$  se representa al hamiltoniano del movimiento libre que es igual a

$$\hat{H} = \hat{K} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \quad (3.58)$$

En consecuencia, para el caso de una partícula en movimiento libre el operador  $\hat{L}$  es igual a

$$\hat{L} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \quad (3.59)$$

y la ecuación para la primera derivada de la función del estado es la siguiente

$$\frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (3.60)$$

Este caso particular se generaliza y se postula que para un caso arbitrario la función de onda y su primera derivada están relacionadas por la ecuación diferencial

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\mathbf{x}, t) \quad \text{con} \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}, t), \quad (3.61)$$

la cual puede ser empleada para determinar la evolución de la función de estado, es decir conocer la forma de dicha función en instantes posteriores si se la conoce en un instante dado.

Esta relación recibe el nombre de **ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo** y es uno de los fundamentos de la Mecánica Cuántica. Que su elección ha sido correcta lo ha demostrado la experiencia, la cual establece que las soluciones de la ecuación de Schrödinger describen correctamente los resultados experimentales.

Una de las peculiaridades de la ecuación de Schrödinger es que contiene la unidad imaginaria  $i$ , lo cual permite que siendo una ecuación diferencial de primer orden con respecto del tiempo, tenga soluciones periódicas<sup>1</sup>.

Por su parte la función inicial puede ser determinada cuando se conoce un conjunto de magnitudes físicas que pueden ser medidas simultáneamente. Conociendo sus valores en un instante dado es posible calcular la función inicial la cual se expresará como una combinación lineal del conjunto de funciones propias de los operadores conmutantes que representan a las magnitudes medibles simultáneamente.

### 3.3.1. Ecuación de continuidad

La ecuación de continuidad, una relación que representa la conservación de la cantidad de partículas, se deduce de la ecuación de Schrödinger. Para ello se emplea la ecuación directa y su conjugada compleja, multiplicando la primera por la función conjugada compleja y la segunda

---

<sup>1</sup>A diferencia de lo que sucede en la Física Clásica, donde tales ecuaciones describen procesos irreversibles.

por la función directa.

En presencia de fuerzas conservativas la ecuación directa tiene la forma

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (3.62)$$

y la conjugada compleja

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^*(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}) \Psi^*(\mathbf{x}, t) \quad (3.63)$$

así que luego de hacer las operaciones indicadas arriba y restar miembro a miembro se tendrá

$$i\hbar \left\{ \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right\} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^* \right\} \quad (3.64)$$

La igualdad anterior puede ser expresada como

$$\frac{\partial (\Psi^* \Psi)}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot \left\{ \Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^* \right\} \quad (3.65)$$

o también como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (3.66)$$

donde

$$\rho = \Psi^* \Psi \quad \text{y} \quad \mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi \right\} \quad (3.67)$$

representan la densidad de probabilidad de encontrar la partícula en el punto  $\mathbf{r}$  y la densidad de corriente de probabilidad, respectivamente.

El sentido de la ecuación obtenida resulta más claro si se calcula su integral sobre un volumen finito cualquiera  $V$ . En este caso se tiene

$$\int_V \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} \right\} d\mathbf{x} = 0 \quad (3.68)$$

de lo cual resulta

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho d\mathbf{x} = - \int_V \nabla \cdot \mathbf{j} d\mathbf{x} \quad (3.69)$$

que, si se emplea el teorema de Gauss, puede ser expresado como

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho d\mathbf{x} = - \oint_S \mathbf{j} \cdot d\boldsymbol{\sigma} \quad (3.70)$$

Si se tiene en cuenta que  $\omega$  puede ser entendida como la densidad media de partículas y  $\mathbf{j}$ , como su flujo promedio a través de una superficie unitaria en la unidad de tiempo, entonces la última relación establece que el incremento de la probabilidad de encontrar una partícula en un volumen dado  $V$  es igual al flujo de la corriente de probabilidad a través de la superficie  $S$  que lo rodea.

### 3.3.2. Ecuación de Schrödinger para estados estacionarios

Se denomina **estados estacionarios** a los que tiene un sistema sobre el cual no actúan campos dependientes del tiempo. En este caso el hamiltoniano no depende explícitamente de  $t$  y coincide con la energía total del sistema.

En estos casos, la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\mathbf{x}, t) \quad (3.71)$$

puede ser resuelta mediante separación de variables. En efecto, si

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x})f(t) \quad (3.72)$$

se tendrá

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\psi(\mathbf{x})f(t)] = \hat{H} \psi(\mathbf{x})f(t) \quad (3.73)$$

de donde se obtiene

$$i\hbar \frac{\partial f(t)/\partial t}{f(t)} = \frac{\hat{H} \psi(\mathbf{x})}{\psi(\mathbf{x})} = E \quad (3.74)$$

es decir

$$i\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t} = E f(t) \quad \text{y} \quad \hat{H} \psi(\mathbf{x}) = E \psi(\mathbf{x})$$

La solución de la primera ecuación

$$i\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t} = E f(t) \quad (3.75)$$

es la exponencial

$$f(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad (3.76)$$

La segunda ecuación

$$\hat{H} \psi(\mathbf{x}) = E \psi(\mathbf{x}) \quad (3.77)$$

no es otra cosa que la ecuación para los valores propios del operador de la energía y no se puede resolver si no se da la forma explícita de  $\hat{H}$ . Esta ecuación se conoce como **ecuación de Schrödinger para estados estacionarios**.

Si como  $\psi_n(\mathbf{x})$  se representan las soluciones de la ecuación para los valores propios de  $\hat{H}$ , entonces la solución general de la ecuación de Schrödinger se puede expresar como

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \sum_n \Psi_n(\mathbf{x}, t) = \sum_n C_n \psi_n(\mathbf{x}) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (3.78)$$

donde

$$C_n = \int \psi_n^*(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \quad (3.79)$$



Como la solución de la ecuación temporal es siempre la misma, para resolver la ecuación de Schrödinger es suficiente hacerlo con la ecuación para los valores propios de  $\hat{H}$ , por tal razón a ésta última se denomina **ecuación de Schrödinger para estados estacionarios**. Por su parte, los estados representados por cada una de las funciones propias de  $\hat{H}$  se denominan estacionarios porque tanto su densidad de probabilidad como la corriente no dependen del tiempo. En efecto, la densidad de probabilidad es igual a

$$\begin{aligned}\varrho_n(\mathbf{x}, t) &= |\Psi_n(\mathbf{x}, t)|^2 = \Psi_n^*(\mathbf{x}, t)\Psi_n(\mathbf{x}, t) \\ &= \psi_n^*(\mathbf{x})\psi_n(\mathbf{x}) = |\psi_n(\mathbf{x})|^2\end{aligned}\tag{3.80}$$

y la densidad de corriente

$$\begin{aligned}\mathbf{j}_n(\mathbf{x}, t) &= \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \Psi_n(\mathbf{x}, t) \nabla \Psi_n^*(\mathbf{x}, t) - \Psi_n^*(\mathbf{x}, t) \nabla \Psi_n(\mathbf{x}, t) \right\} \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \psi_n(\mathbf{x}) \nabla \psi_n^*(\mathbf{x}) - \psi_n^*(\mathbf{x}) \nabla \psi_n(\mathbf{x}) \right\}\end{aligned}\tag{3.81}$$

### 3.4. Evolución del valor esperado en el tiempo

La teoría de Schrödinger permite calcular la derivada del valor esperado de un operador y, por lo tanto, de cualquier magnitud física, cuyo sentido físico se puede apreciar a partir de la definición

$$\frac{d}{dt} \langle L \rangle = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle L \rangle(t + \Delta t) - \langle L \rangle(t)}{\Delta t}\tag{3.82}$$

si como  $\langle L \rangle(t)$  se entiende el promedio de las mediciones de la magnitud dada en el instante  $t$ .

La fórmula se obtiene partiendo de la definición  $\langle L \rangle$

$$\langle L \rangle = \int_{(V)} \varrho(\mathbf{x}, t) L d\mathbf{x} = \int_{(V)} \Psi^* \hat{L} \Psi d\mathbf{x}\tag{3.83}$$

y calculando la derivada

$$\frac{d}{dt} \langle L \rangle = \frac{d}{dt} \int_{(V)} \Psi^* \hat{L} \Psi d\mathbf{x}\tag{3.84}$$

la cual resulta igual a

$$\frac{d}{dt} \langle L \rangle = \int_{(V)} \Psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \Psi d\mathbf{x} + \int_{(V)} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{L} \Psi d\mathbf{x} + \int_{(V)} \Psi^* \hat{L} \frac{\partial \Psi}{\partial t} d\mathbf{x}\tag{3.85}$$

Si se emplea la ecuación de Schrödinger y se reemplaza la derivada de la función  $\Psi(\mathbf{x}, t)$ , la ecuación anterior resultará transformada en

$$\frac{d}{dt}\langle L \rangle = \int_{(V)} \Psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \Psi d\mathbf{x} - \frac{1}{i\hbar} \int_{(V)} \hat{H}^+ \Psi^* \hat{L} \Psi d\mathbf{x} + \frac{1}{i\hbar} \int_{(V)} \Psi^* \hat{L} \hat{H} \Psi d\mathbf{x} \quad (3.86)$$

y, gracias a la hermiticidad de los operadores, en

$$\frac{d}{dt}\langle L \rangle = \int_{(V)} \Psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \Psi d\mathbf{x} + \frac{1}{i\hbar} \int_{(V)} \Psi^* \hat{L} \hat{H} \Psi d\mathbf{x} - \frac{1}{i\hbar} \int_{(V)} \Psi^* \hat{H} \hat{L} \Psi d\mathbf{x} \quad (3.87)$$

Por lo tanto,

$$\frac{d}{dt}\langle L \rangle = \int_{(V)} \Psi^* \left\{ \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}] \right\} \Psi d\mathbf{x} = \int_{(V)} \Psi^* \frac{d}{dt} \hat{L} \Psi d\mathbf{x} \quad (3.88)$$

donde

$$\frac{d}{dt} \hat{L} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}] \quad (3.89)$$

De la ecuación anterior se deduce, en particular, que si un operador dado no depende explícitamente del tiempo y conmuta con el hamiltoniano su valor esperado no cambia con el tiempo. En efecto, en este caso

$$\frac{d}{dt} \hat{L} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}] = 0 \quad (3.90)$$

y, por lo tanto, la derivada de su valor esperado es cero. Tal magnitud se denomina **integral de las ecuaciones cuánticas del movimiento**.

Lo mismo sucede con la probabilidad de que en un momento dado la magnitud  $L$  tenga un valor, digamos,  $L_n$ , la cual está relacionada con el peso específico del estado  $\psi_n(\mathbf{x}, t)$  en el estado arbitrario  $\Psi(\mathbf{x}, t)$ . Como éste es igual a

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{x}) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} = \sum_n c_n(t) \psi(\mathbf{x}), \quad (3.91)$$

donde

$$c_n(t) = c_n e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} = c_n(0) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}}, \quad (3.92)$$

entonces

$$\varrho(L_n, t) = |c_n(t)|^2 = |c_n(0)|^2 = \text{const} \quad (3.93)$$

# Capítulo 4

## Algunas aplicaciones sencillas

En el presente capítulo se resolverá la ecuación estacionaria de Schrödinger para algunos casos sencillos. En particular se analizarán problemas unidimensionales con potenciales que permiten obtener soluciones exactas.

### 4.1. Una partícula libre

La energía de una partícula libre, es decir que no soporta interacción alguna es puramente cinética, razón por la cual el hamiltoniano tiene la forma

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (4.1)$$

Por lo tanto, la ecuación de Schrödinger será la siguiente

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x) \quad (4.2)$$

y puede ser expresada como

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0 \quad (4.3)$$

La ecuación anterior tiene la forma

$$y''(x) + k^2 y(x) = 0,$$

con  $k$  real, razón por la cual sus soluciones generales son del tipo

$$e^{\pm i k x}$$

Por lo tanto, las soluciones de la ecuación (4.3) serán

$$\psi(x) = A_+ e^{i k x} + A_- e^{-i k x}, \quad (4.4)$$

donde  $k = p/\hbar = \sqrt{2mE}/\hbar$ , y describirán ondas planas que se desplazan hacia la derecha e izquierda, respectivamente. Esta solución está en concordancia con lo propuesto por De Broglie, es decir, que una partícula en movimiento libre puede ser asociada con una onda plana.

Si el movimiento es hacia la derecha, el coeficiente  $A_- = 0$  y el estado será descrito por la función

$$\psi(x)_{\rightarrow} = A_+ e^{ikx}. \quad (4.5)$$

En cambio, si el cuerpo se mueve a la izquierda  $A_+ = 0$ , la función que describe su estado será

$$\psi(x)_{\leftarrow} = A_- e^{-ikx} \quad (4.6)$$

En ambos casos la energía puede tomar todos los valores positivos posibles, es decir, no hay ninguna restricción adicional y el movimiento de la partícula deberá ser asociado con el de un paquete de ondas con valores de  $k$  muy cercanos.

## 4.2. Una partícula en un escalón de potencial

Se conoce como **escalón de potencial** a un potencial que tiene sólo dos valores, constantes y diferentes en dos sectores distintos. Un caso particular es el potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_0, & x \geq 0 \end{cases} \quad (4.7)$$

En este caso, la ecuación de Schrödinger será distinta para los intervalos con diferente valor del potencial. Por tal motivo, es conveniente analizarla por separado en cada uno de tales intervalos a los cuales les denominaremos “zona A” ( $x < 0$ ) y “zona B” ( $x \geq 0$ ).

En la zona A la ecuación será coincidente con la de la partícula libre, es decir,

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0 \quad (4.8)$$

y su solución

$$\psi_A(x) = A_+ e^{ikx} + A_- e^{-ikx}, \quad (4.9)$$

donde  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ , también coincidirá con la de la partícula libre. Esto es natural ya que en estos sectores la partícula está libre de toda interacción.

En la zona B la ecuación de Schrödinger adopta la la forma siguiente

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V_0 \psi(x) = E \psi(x), \quad (4.10)$$

la cual es equivalente a la ecuación

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \psi(x) = 0 \quad (4.11)$$

y su solución va a depender de la relación entre los valores de la energía  $E$  y del potencial  $V_0$ . Por eso, es necesario ver los dos casos posibles: Cuando  $E > V_0$  y cuando  $E < V_0$ .

**I Caso: Cuando  $E > V_0$ .**

Como el valor de la energía  $E$  de la partícula es mayor que el del potencial  $V_0$ , el segundo término de la ecuación anterior es positivo. Gracias a ello, la solución

$$\psi_B(x) = B_+ e^{ik'x} + B_- e^{-ik'x}, \quad (4.12)$$

donde  $k' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$ , es del mismo tipo que en las zonas donde la partícula se mueve libremente, pero con la diferencia que en este caso su vector de onda y, en consecuencia, su velocidad de grupo van a ser menores.

En conclusión, la solución general de la ecuación de Schrödinger será la siguiente

$$\psi(x) = \begin{cases} A_+ e^{ikx} + A_- e^{-ikx}, & x < 0, \\ B_+ e^{ik'x} + B_- e^{-ik'x}, & x \geq 0. \end{cases} \quad (4.13)$$

Pero, para que describa estados físicos debe satisfacer la condición de continuidad, lo mismo que su primera derivada, en todos los puntos del dominio.

En particular, en  $x = 0$  estas condiciones se expresarán mediante las ecuaciones

$$\begin{aligned} A_+ + A_- &= B_+ + B_- \\ A_+ - A_- &= \frac{k'}{k} B_+ - \frac{k'}{k} B_- \end{aligned} \quad (4.14)$$

las cuales permiten encontrar los valores de  $A_-$  y  $B_+$  como funciones de  $A_+$  y  $B_-$ .

Por ejemplo, si en el momento inicial la partícula se desplazara por la zona A hacia la derecha, se tendría que  $B_- = 0$ . Por lo tanto las condiciones anteriores se transformarán en

$$\begin{aligned} A_- - B_+ &= -A_+ \\ A_- + \frac{k'}{k} B_+ &= A_+ \end{aligned} \quad (4.15)$$

de donde se obtiene

$$B_+ = \frac{2k}{k + k'} A_+ \quad \text{y} \quad A_- = \frac{k - k'}{k + k'} A_+ \quad (4.16)$$

La densidad de corriente, que en este caso se expresa mediante la fórmula

$$j = \begin{cases} \hbar k (|A_+|^2 - |A_-|^2)/m, & x < 0, \\ \hbar k' |B_+|^2/m, & x > 0, \end{cases} \quad (4.17)$$

debe ser constante.

En efecto, de la ecuación anterior se obtiene

$$\frac{|A_-|^2}{|A_+|^2} + \frac{k'}{k} \frac{|B_+|^2}{|A_+|^2} = 1 \quad (4.18)$$

relación que se satisface si se tiene en cuenta los valores de  $B_+$  y  $A_-$ , obtenidos en (4.16).

Por analogía con la Óptica, el primer término de la expresión anterior

$$R = \frac{|A_-|^2}{|A_+|^2} = \frac{(k - k')^2}{(k + k')^2} \quad (4.19)$$

es denominado **coeficiente de reflexión** y el segundo

$$T = \frac{k'}{k} \frac{|B_+|^2}{|A_+|^2} = \frac{4 k k'}{(k + k')^2} \quad (4.20)$$

se conoce como **coeficiente de transmisión**.

Efectivamente, el coeficiente  $T$  expresa el flujo relativo de probabilidad hacia la derecha en la zona B, el cual está relacionado con el movimiento hacia el infinito positivo. Por su parte,  $R$  representa el flujo de probabilidad hacia la izquierda en la zona A, es decir del movimiento de retorno hacia el infinito negativo. **Este fenómeno no tiene análogo en la Física Clásica**, según la cual sólo es posible el movimiento hacia la derecha.

## II Caso: Cuando $E < V_0$ .

En este caso la ecuación en la zona B puede expresarse como

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \psi(x) = 0 \quad (4.21)$$

y va a tener otro tipo de soluciones, ya que el segundo término tiene signo negativo.

En efecto, la solución general se expresa como

$$\psi(x) = B_+ e^{+k'x} + B_- e^{-k'x}, \quad (4.22)$$

donde  $k' = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ , pero los coeficientes deben ser tales que la función no sea divergente cuando  $x \rightarrow \infty$ . Esto es posible si  $B_+ = 0$  debido a lo cual

$$\psi_B(x) = B e^{-k'x}. \quad (4.23)$$

El resultado anterior tampoco tiene análogo en la Física Clásica. En efecto, la probabilidad de que la partícula se encuentre en la zona B no es estrictamente igual a cero, como en el caso clásico, sino se expresa mediante la función

$$\rho(x > 0) = B^2 e^{-2k'x}, \quad (4.24)$$

La función anterior tiende a cero muy rápidamente. Sin embargo, **el hecho mismo de no hacerse cero en el mismo límite es un fenómeno exclusivamente cuántico**.

### 4.3. Una partícula en una barrera de potencial

Se denomina **barrera de potencial** a un potencial que es diferente de cero y, adicionalmente, constante sólo en un intervalo finito de la coordenada. En particular, la barrera simétrica tiene la forma

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & |x| \leq a, \\ 0, & |x| > a \end{cases} \quad (4.25)$$

Como en el caso anterior, la ecuación de Schrödinger será distinta para los intervalos con diferente valor del potencial. Por tal motivo, también debe ser analizada por separado en cada uno de tales intervalos a los cuales les denominaremos “zona A” ( $x < -a$ ), “zona B” ( $|x| \leq a$ ) y “zona C” ( $x > a$ ).

En las zonas A y C el potencial es nulo. Por lo tanto, la ecuación de Schrödinger será la de una partícula libre, es decir,

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0 \quad (4.26)$$

y su solución, naturalmente, coincide con la de la partícula libre.

En consecuencia, para la zona A

$$\psi_A(x) = A_+ e^{ikx} + A_- e^{-ikx}, \quad (4.27)$$

y para la zona C

$$\psi_C(x) = C_+ e^{ikx} + C_- e^{-ikx}, \quad (4.28)$$

En la zona B la forma de la ecuación es la siguiente

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V_0 \psi(x) = E \psi(x), \quad (4.29)$$

que es equivalente a

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\psi(x) = 0 \quad (4.30)$$

y su solución va a ser distinta para los dos casos posibles: Cuando  $E > V_0$  y cuando  $E < V_0$ .

#### I Caso: Cuando $E > V_0$ .

Cuando el valor de la energía  $E$  de la partícula es mayor que el del potencial  $V_0$ , el segundo término de la ecuación anterior es positivo. Por lo tanto, su solución también representará ondas planas

$$\psi_B(x) = B_+ e^{ik'x} + B_- e^{-ik'x}, \quad (4.31)$$

donde  $k' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$ .

En consecuencia, la solución general será la siguiente

$$\psi(x) = \begin{cases} A_+ e^{ikx} + A_- e^{-ikx}, & x < -a, \\ B_+ e^{ik'x} + B_- e^{-ik'x}, & |x| \leq a, \\ C_+ e^{ikx} + C_- e^{-ikx}, & x > a \end{cases} \quad (4.32)$$

y el movimiento va a depender de las condiciones iniciales.

Supongamos, por ejemplo, que al principio la partícula viene del infinito negativo y lo hace con una velocidad igual a  $v_a$ . Al llegar al límite entre las zonas A y B ( $x = -a$ ) el movimiento puede continuar de dos maneras.

Por un lado, existe la probabilidad

$$\rho_B^{\rightarrow} \propto |B_+|^2 \quad (4.33)$$

de que la partícula ingrese a esta zona y siga en su movimiento hacia la derecha con velocidad  $v_b$ . Pero también hay una probabilidad

$$\rho_A^{\leftarrow} \propto |A_-|^2 \quad (4.34)$$

de que el cuerpo regrese a la zona A y comience a desplazarse hacia la izquierda con el mismo valor de la velocidad inicial  $v_a$ .

Al llegar al límite con la zona C ( $x = a$ ) se observa la misma situación que en el límite entre las zonas A y B. También acá la partícula puede continuar en su movimiento hacia la derecha con una probabilidad

$$\rho_C^{\rightarrow} \propto |C_+|^2. \quad (4.35)$$

en cuyo caso el cuerpo recupera inmediatamente y de manera instantánea su antigua velocidad  $v_c = v_a$ . Pero, igualmente, existe una probabilidad

$$\rho_B^{\leftarrow} \propto |B_-|^2$$

de que pueda desplazarse en sentido contrario, es decir, hacia la izquierda, con velocidad  $v_b$ .

## II Caso: Cuando $E < V_0$ .

En este caso el movimiento en las zonas A y C en las cuales el potencial es cero será igual que en el caso anterior. En consecuencia, para la zona A se tendrá

$$\psi_A(x) = A_+ e^{ikx} + A_- e^{-ikx}, \quad (4.36)$$

y para la zona C

$$\psi_C(x) = C_+ e^{ikx} + C_- e^{-ikx}, \quad (4.37)$$

donde  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ .



Pero en la zona  $B$  la ecuación

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \psi(x) = 0 \quad (4.38)$$

que también puede expresarse como

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \psi(x) = 0 \quad (4.39)$$

va a tener otro tipo de soluciones, ya que el coeficiente que acompaña al segundo término es negativo.

En efecto, la solución será la siguiente

$$\psi(x) = B_+ e^{+k'x} + B_- e^{-k'x}, \quad (4.40)$$

donde  $k' = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ , y se caracteriza porque no constituye ondas planas, razón por la cual no puede describir el movimiento de partículas en su sentido clásico.

De acuerdo con la teoría clásica las zonas donde el potencial es mayor que la energía de la partícula son áreas donde el movimiento no es posible. Los límites de tales zonas se denominan puntos de inflexión ya que un cuerpo en movimiento sólo puede llegar hasta esos puntos y luego tiene que retornar a las zonas donde el potencial es menor.

En el caso cuántico la solución general

$$\psi(x) = \begin{cases} A_+ e^{ikx} + A_- e^{-ikx}, & x < -a, \\ B_+ e^{k'x} + B_- e^{-k'x}, & |x| \leq a, \\ C_+ e^{ikx} + C_- e^{-ikx}, & x > a \end{cases} \quad (4.41)$$

es tal que existe la posibilidad de que si al principio la partícula estaba desplazándose por la zona A hacia la derecha, en cuyo caso  $C_- = 0$ , también resulte en la zona C.

En efecto, al analizar las relaciones de continuidad se puede establecer que el coeficiente  $C_+$  que está relacionado con el movimiento del cuerpo en la zona C hacia la derecha es diferente de cero y se expresa como función de  $A_+$ .

En  $x = -a$  las relaciones de continuidad se expresan mediante las ecuaciones

$$A_+ e^{-ika} + A_- e^{ika} = B_+ e^{-k'a} + B_- e^{k'a} \quad (4.42)$$

$$A_+ e^{-ika} - A_- e^{ika} = -\frac{ik'}{k} (B_+ e^{-k'a} - B_- e^{k'a})$$

de las cuales se deduce que

$$A_+ = \frac{1}{2} \left\{ B_+ \left[ 1 - ik'/k \right] e^{(ik-k')a} + B_- \left[ 1 + ik'/k \right] e^{(ik+k')a} \right\} \quad (4.43)$$

y

$$A_- = \frac{1}{2} \left\{ B_+ \left[ 1 + ik'/k \right] e^{-(ik+k')a} + B_- \left[ 1 - ik'/k \right] e^{-(ik-k')a} \right\} \quad (4.44)$$

igualdades que pueden ser expresadas en forma matricial

$$\begin{pmatrix} A_+ \\ A_- \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} [1 - ik'/k] e^{(ik-k')a} & [1 + ik'/k] e^{(ik+k')a} \\ [1 + ik'/k] e^{-(ik+k')a} & [1 - ik'/k] e^{-(ik-k')a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_+ \\ B_- \end{pmatrix} \quad (4.45)$$

Por su parte, las relaciones de continuidad en el punto  $x = a$  conducen a las igualdades

$$B_+ e^{k'a} + B_- e^{-k'a} = C_+ e^{ika} + C_- e^{-ika} \quad (4.46)$$

$$B_+ e^{k'a} - B_- e^{-k'a} = \frac{ik}{k'} (C_+ e^{ika} - C_- e^{-ika})$$

de las que se obtiene

$$B_+ = \frac{1}{2} \left\{ C_+ \left[ 1 + ik/k' \right] e^{(ik-k')a} + C_- \left[ 1 - ik/k' \right] e^{-(ik+k')a} \right\} \quad (4.47)$$

y

$$B_- = \frac{1}{2} \left\{ C_+ \left[ 1 - ik/k' \right] e^{(ik+k')a} + C_- \left[ 1 + ik/k' \right] e^{-(ik-k')a} \right\} \quad (4.48)$$

que también pueden ser expresadas como producto de matrices

$$\begin{pmatrix} B_+ \\ B_- \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} [1 + ik/k'] e^{(ik-k')a} & [1 - ik/k'] e^{-(ik+k')a} \\ [1 - ik/k'] e^{(ik+k')a} & [1 + ik/k'] e^{-(ik-k')a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix} \quad (4.49)$$

Si se aprovecha el resultado anterior y en la ecuación (4.45) se reemplaza la matriz conformada por los coeficientes  $B$  se obtendrá

$$\begin{pmatrix} A_+ \\ A_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [\cosh 2k'a - (i\varepsilon/2)\sinh 2k'a] e^{2ika} & +(i\eta/2)\sinh 2k'a \\ -(i\eta/2)\sinh 2k'a & [\cosh 2k'a + (i\varepsilon/2)\sinh 2k'a] e^{-2ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix} \quad (4.50)$$

donde

$$\eta = \frac{k'}{k} + \frac{k}{k'} \quad \text{y} \quad \varepsilon = \frac{k'}{k} - \frac{k}{k'} \quad (4.51)$$

Si  $C_- = 0$  de la ecuación anterior se obtendrá

$$A_+ = \left( \cosh 2k'a - \frac{i\varepsilon}{2} \sinh 2k'a \right) e^{2ika} C_+, \quad (4.52)$$

y

$$A_- = -\frac{i\eta}{2} \sinh(2k'a) C_+, \quad (4.53)$$

Por lo tanto,

$$C_+ = \frac{e^{-2ika}}{\cosh 2k'a - i(\varepsilon/2)\sinh 2k'a} A_+ \quad (4.54)$$

y

$$A_- = -\frac{i\eta}{2} \frac{e^{-2ika} \sinh 2k'a}{\cosh 2k'a - i(\varepsilon/2)\sinh 2k'a} A_+ \quad (4.55)$$

En consecuencia, el coeficiente de transmisión será igual a

$$T = \frac{1}{\cosh^2 2k'a + (\varepsilon/2)^2 \sinh^2 2k'a} \quad (4.56)$$

y el de reflexión se expresará como

$$R = \frac{1}{4} \frac{\eta^2 \sinh^2 2k'a}{\cosh^2 2k'a + (\varepsilon/2)^2 \sinh^2 2k'a} \quad (4.57)$$

## 4.4. Un pozo de potencial

El **pozo de potencial** es un potencial del tipo

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & |x| < a \\ 0, & |x| \geq a \end{cases} \quad (4.58)$$

debido a lo cual la ecuación de Schrödinger será

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0, \quad (4.59)$$

con  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ , para  $|x| \geq a$  y

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k'^2\psi(x) = 0, \quad (4.60)$$

donde  $k' = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$ , cuando  $|x| < a$ .

Como en los casos anteriores, también en el pozo de potencial es necesario analizar dos casos: Cuando  $E > 0$  y  $E < 0$ .

### I Caso: $E > 0$ .

En este caso  $k$  y  $k'$  son positivas, razón por la cual la solución general es de tipo ondulatorio

$$\psi(x) = \begin{cases} A_+ e^{ikx} + A_- e^{-ikx}, & x < -a, \\ B_+ e^{ik'x} + B_- e^{-ik'x}, & |x| \leq a, \\ C_+ e^{ikx} + C_- e^{-ikx}, & x > a \end{cases} \quad (4.61)$$

En otras palabras, éste también es un caso de dispersión de una partícula en un potencial seccionalmente constante. Sus características más importantes lo constituyen los coeficientes de transmisión y reflexión, para cuyo cálculo es necesario expresar los coeficientes  $C_+$  y  $A_-$  a través de  $A_+$ .

De las condiciones de continuidad se obtiene

$$\begin{pmatrix} A_+ \\ A_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [\cos 2k'a - (i\varepsilon'/2)\text{sen}2k'a]e^{2ika} & -(i\eta'/2)\text{sen}2ka \\ -(i\eta'/2)\text{sen}2ka & [\cos 2k'a + (i\varepsilon'/2)\text{sen}2k'a]e^{-2ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix} \quad (4.62)$$

donde

$$\eta' = \frac{k'}{k} + \frac{k}{k'} \quad y \quad \varepsilon = \frac{k'}{k} - \frac{k}{k'} \quad (4.63)$$

En consecuencia, el coeficiente de transmisión será

$$T = \frac{1}{\cos^2 2k'a + (\varepsilon'/2)^2 \text{sen}^2 2k'a} \quad (4.64)$$

## II Caso: $E < 0$ .

En este caso las ecuaciones de Schrödinger serán

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k'^2 \psi(x) = 0 \quad (4.65)$$

donde  $k' = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$ , en la zona  $|x| \leq a$  y

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \kappa^2 \psi(x) = 0 \quad (4.66)$$

donde  $\kappa = \sqrt{-2mE}/\hbar$ , en la zona  $|x| > a$ .

Dentro del pozo las soluciones son

$$\psi_B(x) = B_P \cos k'x + B_I \text{sen}k'x, \quad (4.67)$$

donde la primera es par, mientras que la segunda es impar. En cambio fuera del pozo, se tendrá

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{\kappa x}, & \text{cuando } x < -a, \\ C e^{-\kappa x}, & \text{cuando } x > a. \end{cases} \quad (4.68)$$

Por lo tanto, la solución general será

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{\kappa x}, & x < -a, \\ B_P \cos k'x + B_I \text{sen}k'x, & |x| \leq a, \\ C e^{-\kappa x}, & x > a. \end{cases} \quad (4.69)$$

Las condiciones de continuidad en un punto dado  $x_0$ , que también pueden expresarse mediante relaciones del tipo límite

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi_A(x_0 - \varepsilon) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi_A(x_0 + \varepsilon) \quad (4.70)$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi'_A(x_0 - \varepsilon) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi'_A(x_0 + \varepsilon),$$

se pueden agrupar en una sola

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{\psi(x)} \frac{d\psi(x)}{dx} \right\} /_{x=x_0-\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{\psi(x)} \frac{d\psi(x)}{dx} \right\} /_{x=x_0+\varepsilon}, \quad (4.71)$$

denominada **derivada logarítmica**.

Si la solución general que sólo incluye soluciones pares es evaluada  $x = -a$  y  $x = a$ , la relación de continuidad se transforma en

$$k' \cot(-k'a) = \kappa \quad (4.72)$$

$$k' \cot(k'a) = -\kappa$$

de las cuales, si se tiene presente algunas identidades trigonométricas, se obtiene

$$\text{sen}(-k'a) = \frac{k'}{\sqrt{k'^2 + \kappa^2}} = \frac{\hbar k'}{\sqrt{2mV_0}} \quad (4.73)$$

$$\text{sen}(k'a) = -\frac{k'}{\sqrt{k'^2 + \kappa^2}} = -\frac{\hbar k'}{\sqrt{2mV_0}}$$

Si se continúa con las transformaciones trigonométricas se tendrá

$$\begin{aligned} -k'a &= m\pi + \arcsen\left(\frac{\hbar k'}{\sqrt{2mV_0}}\right) \\ +k'a &= m'\pi - \arcsen\left(\frac{\hbar k'}{\sqrt{2mV_0}}\right) \end{aligned} \quad (4.74)$$

de donde se obtiene la ecuación

$$k'a = \frac{n\pi}{2} - \arcsen\left(\frac{\hbar k'}{\sqrt{2mV_0}}\right), \quad (4.75)$$

donde  $n$  es un número natural.

La ecuación obtenida establece algunas restricciones a los valores posibles de la energía. En primer lugar, el argumento de la función “arcsen” debe ser

$$\frac{\hbar k'}{\sqrt{2mV_0}} \leq 1 \quad \text{de donde se infiere que} \quad k' \leq \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} \quad (4.76)$$

Por otro lado,  $k'$  tomará sólo un conjunto discreto de valores que serán los que correspondan a la intersección de la recta que representa a la función de la izquierda con las curvas que expresan la función de la derecha. Para cada valor de  $n$  habrá un y sólo un valor de la energía, es decir

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n'^2}{2m} \quad (4.77)$$

Finalmente es necesario subrayar que para que la igualdad (4.75) se satisfaga, es decir exista intersección entre las líneas que representan las funciones de la izquierda y derecha, se debe cumplir que cuando  $k = \sqrt{2mV_0}/\hbar$

$$ka > \frac{n\pi}{2} - \arcsen(1) \quad \longrightarrow \quad \sqrt{2ma^2V_0}/\hbar > \frac{\pi}{2} (n-1). \quad (4.78)$$

Esto se cumple para cualquier pozo de potencial, por lo menos, para  $n = 1$ . El número de posibles valores de la energía dependerá del valor de  $n$  para el cual se satisface la desigualdad anterior.

El número de estados que puede haber para una profundidad dada del pozo  $V_0$  se puede definir de la relación

$$\frac{\pi}{2} (n-1) < \sqrt{2ma^2V_0}/\hbar \leq \frac{n\pi}{2} \quad (4.79)$$

# Capítulo 5

## El oscilador armónico

Una de las aplicaciones más sencillas del formalismo de Schrödinger y a la vez más importantes por su utilidad es el **oscilador armónico monodimensional**. En efecto, mediante una *correcta elección* de las coordenadas generalizadas, el movimiento de cualquier sistema de partículas que ejecuta pequeñas oscilaciones puede ser expresado como el de un conjunto de osciladores independientes.

Por otro lado, el oscilador armónico no representa un sistema real, sino es una idealización. La fórmula de su energía potencial implica que a medida que el oscilador se aleja de su posición de equilibrio la fuerza de interacción, que provoca el retorno del sistema a esa posición de equilibrio, crece ilimitadamente. En cambio, en los sistemas reales la dependencia de la fuerza con respecto de la deformación tiende a cero a partir de ciertos valores de  $x$  (y la energía potencial a una constante). Sin embargo, para pequeñas amplitudes, esta idealización es totalmente lícita y justificada.

### 5.1. Ecuación del oscilador armónico

El hamiltoniano del oscilador armónico se obtiene aplicando normas generales de la Mecánica Cuántica, es decir reemplazando las variables canónicas por sus respectivos operadores. Su fórmula es la siguiente

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \quad (5.1)$$

es decir,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2. \quad (5.2)$$

En consecuencia, la ecuación de Schrödinger para los estados estacionarios se expresa como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}\psi = E \psi \quad (5.3)$$

y adquiere la forma

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - a^4x^2\psi(x) + k^2\psi(x) = 0 \quad (5.4)$$

si

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad \text{y} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (5.5)$$

Para resolver la ecuación anterior es conveniente hacer el cambio de variable  $x \rightarrow y = a^2x^2$  después de lo cual se obtiene

$$\left\{ y \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} \frac{d}{dy} + \left( \frac{k^2}{4a^2} - \frac{y}{4} \right) \right\} \psi(y) = 0, \quad (5.6)$$

es decir,

$$\left\{ y \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} \frac{d}{dy} + \left( \varepsilon - \frac{y}{4} \right) \right\} \psi(y) = 0 \quad (5.7)$$

donde

$$\varepsilon = \frac{k^2}{4a^2} = \frac{2mE/\hbar^2}{4m\omega/\hbar} = \frac{E}{2\hbar\omega} \quad (5.8)$$

### 5.1.1. Comportamiento asintótico de $\psi(y)$ .

El comportamiento asintótico de la ecuación en el infinito es similar al de una función exponencial. En efecto, en el infinito sólo son relevantes los términos proporcionales a  $y$ , es decir, la ecuación se transforma en

$$\left\{ y \frac{d^2}{dy^2} - \frac{y}{4} \right\} \psi_{as}(y) = 0 \quad (5.9)$$

y tiene dos soluciones

$$e^{\frac{1}{2}y} \quad \text{y} \quad e^{-\frac{1}{2}y} \quad (5.10)$$

La primera solución es divergente, razón por la cual tiene que ser desechada. Por eso, como solución de la ecuación asintótica se toma

$$\psi_{as}(y) = e^{-\frac{1}{2}y} \quad (5.11)$$

y la solución general puede ser expresada como

$$\psi(y) = \psi_{as}(y) f(y) = e^{-\frac{1}{2}y} f(y) \quad (5.12)$$

donde  $f(y)$  es una función a determinar.

La ecuación diferencial que satisface  $f(y)$  se obtiene al reemplazar  $\psi(y)$  en la ecuación general,

$$\left\{ y \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} \frac{d}{dy} + \left( \varepsilon - \frac{y}{4} \right) \right\} e^{-\frac{1}{2}y} f(y) = 0 \quad (5.13)$$

y no es otra que

$$y \frac{d^2}{dy^2} (e^{-\frac{1}{2}y} f(y)) + \frac{1}{2} \frac{d}{dy} (e^{-\frac{1}{2}y} f(y)) + \left( \varepsilon - \frac{y}{4} \right) (e^{-\frac{1}{2}y} f(y)) = 0 \quad (5.14)$$



### 5.1.2. Ecuación para la función $f(y)$ .

Después de tomar las derivadas de la función exponencial, la ecuación anterior se transforma en

$$y \frac{d^2 f(y)}{dy^2} + \left(\frac{1}{2} - y\right) \frac{df(y)}{dy} + \left(\varepsilon - \frac{1}{4}\right) f(y) = 0, \quad (5.15)$$

ecuación que es de la forma

$$y f''(y) + (\gamma - y) f'(y) - \alpha f(y) = 0 \quad (5.16)$$

si

$$\gamma = 1/2 \quad y \quad \alpha = \varepsilon - 1/4 \quad (5.17)$$

Ésta es la ecuación para las **funciones hipergeométricas confluyentes**, que, además de depender de la variable  $y$ , contienen dos parámetros  $\alpha$  y  $\gamma$  y se representan por  $F(\alpha, \gamma, y)$ . Las funciones hipergeométricas tienen, entre otras, las siguientes propiedades

- Se definen mediante la serie

$$F(\alpha, \gamma, y) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_{\nu}}{(\gamma)_{\nu}} \frac{y^{\nu}}{\nu!} \quad \text{con} \quad (\alpha)_0 = 1, \quad (\alpha)_{\nu} = \alpha(\alpha+1) \cdots (\alpha+\nu) \quad (5.18)$$

- En el infinito se comportan como

$$F(\alpha, \gamma, y) \longrightarrow \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} e^y y^{\alpha-\gamma} \quad (5.19)$$

- Para cada valor de  $\alpha$  y  $\gamma$  la ecuación diferencial tiene dos soluciones independientes:

$$F(\alpha, \gamma, y) \quad y \quad y^{1-\gamma} F(\alpha - \gamma + 1, 2 - \gamma, y)$$

Por lo tanto, la función  $f(y)$  se expresará como una combinación lineal de ambas funciones con coeficientes constantes, es decir

$$f(y) = D_1 F(1/4 - \varepsilon; 1/2; y) + D_2 y^{1/2} F(3/4 - \varepsilon; 3/2; y) \quad (5.20)$$

y la función total será

$$\psi(y) = D_1 F(1/4 - \varepsilon; 1/2; y) e^{-\frac{1}{2}y} + D_2 y^{1/2} F(3/4 - \varepsilon; 3/2; y) e^{-\frac{1}{2}y} \quad (5.21)$$

### 5.1.3. Valores propios de la energía.

Como  $\psi(y)$  debe tender a cero en el infinito, entonces es necesario exigir que ambas funciones hipergeométricas tengan un comportamiento análogo, es decir tiendan a cero.

Para que la primera solución

$$F(1/4 - \varepsilon; 1/2; y) \longrightarrow 0 \quad \text{cuando} \quad y \longrightarrow \infty$$

es indispensable que

$$\Gamma(1/4 - \varepsilon) \longrightarrow \infty, \quad \text{ya que} \quad \Gamma(1/2) \neq 0 \quad (5.22)$$

Esta condición se puede cumplir si el argumento de la función  $\Gamma$  toma valores enteros no positivos. En consecuencia

$$\varepsilon = m + 1/4 \quad \text{con} \quad m = 0, 1, 2, \dots, \quad (5.23)$$

es decir,

$$E = \hbar\omega (2m + 1/2) \quad (5.24)$$

Para que la segunda solución tienda a cero, es decir para que

$$F(3/4 - \varepsilon; 3/2; y) \longrightarrow 0 \quad \text{si} \quad y \longrightarrow \infty$$

se requiere que

$$\Gamma(3/4 - \varepsilon) \longrightarrow \infty, \quad \text{puesto que} \quad \Gamma(3/2) \neq 0,$$

lo cual, al igual que en el caso anterior, se satisface si el argumento de la función  $\Gamma$  toma valores enteros no positivos. Por lo tanto,

$$\varepsilon = m + 3/4 \quad \text{con} \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (5.25)$$

y

$$E = \hbar\omega (2m + 1 + 1/2) \quad (5.26)$$

En consecuencia,  $\psi(y)$  tiene propiedades de función de onda sólo para los siguientes valores de la energía

$$E_n = \hbar\omega (n + 1/2) \quad \text{con} \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (5.27)$$

relación que agrupa las dos restricciones obtenidas anteriormente.

En consecuencia, **la energía resulta cuantizada y, lo que también es muy importante, tiene un valor mínimo igual a  $\hbar\omega/2$** . Estas dos propiedades son totalmente diferentes a las que tiene la energía de un oscilador clásico, la cual puede tomar cualquier valor, incluyendo el cero.

## 5.2. Polinomios de Hermite.

Cuando  $\alpha$  es un entero no positivo, la ecuación para las funciones hipergeométricas se transforma en la ecuación para los **polinomios de Hermite**. En efecto, si en lugar de  $y$  se introduce la variable  $\xi = \sqrt{y} = ax$  la ecuación diferencial para  $f$  se transforma en

$$\frac{\partial^2 f(\xi)}{\partial \xi^2} - 2\xi \frac{\partial f(\xi)}{\partial \xi} + (4\varepsilon - 1)f(\xi) = 0 \quad (5.28)$$

$$\frac{\partial^2 f(\xi)}{\partial \xi^2} - 2\xi \frac{\partial f(\xi)}{\partial \xi} + 2nf(\xi) = 0,$$

que es la ecuación para los polinomios de Hermite, y sus soluciones independientes se expresan así

$$f(\xi) \equiv H_{2n}(\xi) \propto F(-n; 1/2; \xi^2) \quad (5.29)$$

y

$$f(\xi) \equiv H_{2n+1}(\xi) \propto \xi F(-n; 3/2; \xi^2) \quad (5.30)$$

Los polinomios de Hermite tienen las siguientes propiedades:

- Se expresan a través de las funciones hipergeométricas mediante la fórmula:

$$H_{2n}(\xi) = (-1)^n \frac{(2n)!}{n!} F(-n, 1/2, \xi^2) \quad (5.31)$$

y

$$H_{2n+1}(\xi) = (-1)^n \frac{(2n+1)!}{n!} 2\xi F(-n, 3/2, \xi^2) \quad (5.32)$$

- Son polinomios de orden  $n$ , es decir pueden ser expresados mediante relaciones del tipo

$$H_n(\xi) = c_n \xi^n + c_{n-2} \xi^{n-2} + \dots \quad (5.33)$$

- Su fórmula de Rodrigues es la siguiente

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \quad (5.34)$$

- Satisfacen las siguientes relaciones de recurrencia:

$$\xi H_n(\xi) = n H_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi) \quad (5.35)$$

y

$$\frac{dH_n(\xi)}{d\xi} = 2n H_{n-1}(\xi) \quad (5.36)$$

- Satisfacen la siguiente condición de normalización

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) d\xi = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{nm} \quad (5.37)$$

### 5.2.1. Funciones propias del oscilador armónico.

Sobre la base de los resultados obtenidos es posible definir funciones propias del oscilador armónico. Su fórmula es

$$\psi(x) = N e^{-\frac{1}{2}a^2x^2} H_n(ax) \quad (5.38)$$

donde  $N$  es un coeficiente de normalización, cuyo valor puede ser calculado empleando las propiedades de normalización de los polinomios de Hermite.

En efecto, de la integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} N^* e^{-\frac{1}{2}a^2x^2} H_n(ax) N e^{-\frac{1}{2}a^2x^2} H_n(ax) dx = 1, \quad (5.39)$$

que no es otra cosa que

$$|N|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a^2x^2} H_n^2(ax) dx = 1 \quad (5.40)$$

se obtiene

$$|N|^2 \frac{1}{a} \sqrt{\pi} 2^n n! = 1 \quad \text{de donde} \quad N = \left\{ \frac{a}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \right\}^{1/2} \quad (5.41)$$

En consecuencia, las funciones propias  $\psi_n(x)$  ortonormalizadas se expresan mediante la fórmula

$$\psi_n(x) = \left\{ \frac{a}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \right\}^{1/2} e^{-\frac{1}{2}a^2x^2} H_n(ax) \quad (5.42)$$

y satisfacen las relaciones de recurrencia

$$\xi \psi_n(x) = \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x) \quad (5.43)$$

$$\frac{d}{d\xi} \psi_n(x) = \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x)$$

### 5.2.2. Valores propios de las magnitudes físicas.

Empleando las relaciones de recurrencia de las funciones propias se puede demostrar que en el estado  $n$ -ésimo

$$\langle x \rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \hat{x} \psi_n(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) x \psi_n(x) dx = 0 \quad (5.44)$$

$$\langle p \rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \hat{p} \psi_n(x) dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \frac{d}{dx} \psi_n(x) dx = 0$$

en consecuencia la relación de incertidumbre para tales magnitudes es

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle = \langle x^2\rangle\langle p^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (5.45)$$

Por otro lado, la energía media del oscilador está dada por la fórmula

$$\langle E\rangle = \frac{\langle p^2\rangle}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\langle x^2\rangle \geq \frac{\langle p^2\rangle}{2m} + \frac{m\omega^2\hbar^2}{8\langle p^2\rangle} \quad (5.46)$$

es decir, siempre será mayor que cero.

Si se calcula la derivada del valor esperado de la energía con respecto de  $\langle p^2\rangle$  y se la iguala a cero se ve que el mínimo se obtiene para

$$\langle p^2\rangle = \frac{m\omega\hbar}{2} \quad (5.47)$$

en consecuencia, el valor mínimo de la energía resulta igual a

$$\text{mín } \langle E\rangle = \frac{\hbar\omega}{2} \quad (5.48)$$

coincidente con el valor de la energía para el estado fundamental.

### 5.3. El oscilador armónico en la representación de Fock

Las relaciones de recurrencia para las funciones propias del oscilador armónico son tales que permiten introducir dos operadores cuya acción sobre tales funciones es especialmente sencilla. En efecto, si se suma y resta miembro a miembro ambas ecuaciones se obtiene lo siguiente:

$$\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right) \psi_n(x) = \sqrt{2n} \psi_{n-1}(x) \quad (5.49)$$

$$\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right) \psi_n(x) = \sqrt{2(n+1)} \psi_{n+1}(x)$$

#### 5.3.1. Operadores de creación y aniquilación.

Las combinaciones que se encuentran entre paréntesis en los términos de la izquierda son operadores que al actuar sobre una función dada  $\psi_n$  la transforman en la inmediata inferior  $\psi_{n-1}$  o superior  $\psi_{n+1}$ . Por tal razón a tales combinaciones multiplicadas por un apropiado factor constante se les representa por  $\hat{a}$  y  $\hat{a}^+$ .

Después de dividir todo entre  $\sqrt{2}$  y de pasar de la coordenada adimensional  $\xi$  a la coordenada física  $x$ , los operadores  $\hat{a}$  y  $\hat{a}^+$  resultan expresados como

$$\begin{aligned}\hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( ax + \frac{1}{a} \frac{d}{dx} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \sqrt{m\omega} \hat{x} + \frac{i\hat{p}}{\sqrt{m\omega}} \right)\end{aligned}\tag{5.50}$$

y

$$\begin{aligned}\hat{a}^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( ax - \frac{1}{a} \frac{d}{dx} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \sqrt{m\omega} \hat{x} - \frac{i\hat{p}}{\sqrt{m\omega}} \right)\end{aligned}\tag{5.51}$$

### Propiedades de $\hat{a}$ y $\hat{a}^+$ .

Los operadores  $\hat{a}$  y  $\hat{a}^+$  tienen las siguientes propiedades:

- No son operadores hermíticos. En efecto el adjunto de  $\hat{a}$  será

$$(\hat{a})^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left\{ \left( \sqrt{m\omega} \hat{x} + \frac{i\hat{p}}{\sqrt{m\omega}} \right) \right\}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \sqrt{m\omega} \hat{x} - \frac{i\hat{p}}{\sqrt{m\omega}} \right)\tag{5.52}$$

En consecuencia

$$(\hat{a})^\dagger \neq \hat{a} \quad \text{pero en cambio} \quad (\hat{a})^\dagger = \hat{a}^+\tag{5.53}$$

- El producto  $\hat{a}^+\hat{a}$ , representado por  $\hat{N}$ , es un operador hermítico. En efecto, su adjunto

$$\hat{N}^\dagger = (\hat{a}^+\hat{a})^\dagger = (\hat{a})^\dagger(\hat{a}^+)^\dagger = \hat{a}^+\hat{a} = \hat{N}\tag{5.54}$$

- El conmutador de  $[\hat{a}, \hat{a}^+]$  es igual a 1. Efectivamente

$$\begin{aligned}[\hat{a}, \hat{a}^+] &= \frac{1}{2\hbar} \left\{ \left( \sqrt{m\omega} \hat{x} + \frac{i\hat{p}}{\sqrt{m\omega}} \right) \left( \sqrt{m\omega} \hat{x} - \frac{i\hat{p}}{\sqrt{m\omega}} \right) - \right. \\ &\quad \left. \left( \sqrt{m\omega} \hat{x} - \frac{i\hat{p}}{\sqrt{m\omega}} \right) \left( \sqrt{m\omega} \hat{x} + \frac{i\hat{p}}{\sqrt{m\omega}} \right) \right\}\end{aligned}\tag{5.55}$$

por lo tanto,

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \frac{1}{2\hbar} \{ 2i\hat{p}\hat{x} - 2i\hat{x}\hat{p} \} = \frac{i}{\hbar} \{ \hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} \} = 1\tag{5.56}$$

- También se puede verificar que

$$[\hat{a}^n, \hat{N}] = n \hat{a}^n \quad \text{y} \quad [(\hat{a}^+)^n, \hat{N}] = -n (\hat{a}^+)^n \quad (5.57)$$

En efecto, cuando  $n = 1$  se tendrá

$$[\hat{a}, \hat{N}] = [\hat{a}, \hat{a}^+ \hat{a}] = \hat{a}^+ [\hat{a}, \hat{a}] + [\hat{a}, \hat{a}^+] \hat{a} = \hat{a} \quad (5.58)$$

La demostración se completa suponiendo que se cumple para un valor  $n$  y verificando que se satisface para  $n + 1$ .

$$\begin{aligned} [\hat{a}^{n+1}, \hat{N}] &= [\hat{a}^{n+1}, \hat{N}] = \hat{a}^n [\hat{a}, \hat{N}] + [\hat{a}^n, \hat{N}] \hat{a} \\ &= \hat{a}^n \hat{a} + n \hat{a}^n \hat{a} = (n + 1) \hat{a}^{n+1} \end{aligned} \quad (5.59)$$

### 5.3.2. Operadores de las magnitudes físicas.

Los operadores de la coordenada, el momento y la energía se pueden expresar a través de  $\hat{a}$  y  $\hat{a}^+$ . En efecto, sumando miembro a miembro las definiciones de  $\hat{a}$  y  $\hat{a}^+$  se obtiene

$$\hat{a} + \hat{a}^+ = \left\{ 2\sqrt{m\omega}/\sqrt{2\hbar} \right\} \hat{x} \quad (5.60)$$

de donde

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^+) \quad (5.61)$$

Si se toma la diferencia se obtendrá

$$\hat{a} - \hat{a}^+ = \left\{ 2i/\sqrt{2\hbar m\omega} \right\} \hat{p} \quad (5.62)$$

es decir

$$\hat{p} = \left\{ \sqrt{2\hbar m\omega}/2i \right\} (\hat{a} - \hat{a}^+) = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^+) \quad (5.63)$$

En consecuencia el hamiltoniano se expresará como

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m} \left\{ -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^+) \right\}^2 + \frac{m\omega^2}{2} \left\{ \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^+) \right\}^2 \\ &= -\frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a} - \hat{a}^+)^2 + \frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a} + \hat{a}^+)^2 \end{aligned} \quad (5.64)$$

de donde

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^+) = \hbar\omega (\hat{N} + 1/2) \quad (5.65)$$

### 5.3.3. Vectores propios en la representación de Fock

El hamiltoniano conmuta con el operador  $\hat{N}$ . En consecuencia, los vectores propios de  $\hat{H}$  también lo son de  $\hat{N}$ , es decir, si

$$\hat{N}|N\rangle = n|N\rangle \quad \longrightarrow \quad \hat{H}|N\rangle = E_n|N\rangle \quad (5.66)$$

y poseen las siguientes propiedades:

- Los valores propios del operador  $\hat{N}$  son todos enteros no negativos. En efecto, de la definición de norma como un valor positivo

$$\|\hat{a}|N\rangle\|^2 = \langle N|\hat{a}^+\hat{a}|N\rangle = \langle N|\hat{N}|N\rangle = n\langle N|N\rangle \quad (5.67)$$

se desprende que  $n \geq 0$ .

- Si  $n > 0$  entonces  $\hat{a}|N\rangle$  es un vector propio perteneciente al valor propio  $n - 1$

$$\begin{aligned} \hat{N}\hat{a}|N\rangle &= (\hat{a}^+\hat{a})\hat{a}|N\rangle = (\hat{a}\hat{a}^+ - 1)\hat{a}|N\rangle \\ &= \hat{a}(\hat{a}^+\hat{a} - 1)|N\rangle = \hat{a}(\hat{N} - 1)|N\rangle \\ &= (n - 1)\hat{a}|N\rangle \end{aligned} \quad (5.68)$$

y  $\hat{a}^m|N\rangle$  corresponde al valor propio  $n - m$ , es decir

$$\hat{N}(\hat{a}^m|N\rangle) = (n - m)(\hat{a}^m|N\rangle) \quad (5.69)$$

- Si  $m = n$

$$(\hat{a})^n|N\rangle = |0\rangle \quad (5.70)$$

donde el vector  $|0\rangle$  que se define como

$$|0\rangle = |N\rangle - |N\rangle$$

- De la propiedad anterior se desprende que

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \quad (5.71)$$

- Por su parte  $\hat{a}^+|N\rangle$  es vector propio correspondiente al valor  $n + 1$  y  $(\hat{a}^+)^q|N\rangle$  corresponde a  $n + q$ . Es decir,

$$\hat{N}\hat{a}^+|N\rangle = (n + 1)\hat{a}^+|N\rangle \quad (5.72)$$

y

$$\hat{N}(\hat{a}^+)^{m'}|N\rangle = (n + m')(\hat{a}^+)^{m'}|N\rangle \quad (5.73)$$



Las propiedades enumeradas anteriormente permiten definir todos los vectores propios en una representación dada. En efecto, la relación

$$\hat{a}|0\rangle = 0, \quad (5.74)$$

permite definir la forma del vector  $|0\rangle$  y los otros vectores se obtendrán empleando el operador de creación  $\hat{a}^+$ .

En particular, en la representación de coordenadas la ecuación anterior será igual a

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi + \frac{d}{d\xi} \right) |0\rangle \quad (5.75)$$

y su solución, que viene a ser el vector  $|0\rangle$  en la representación de coordenadas, es la función

$$\langle \xi | 0 \rangle \equiv \psi_0(\xi) = C e^{-\xi^2/2} \quad (5.76)$$

la que después de normalizada y del cambio de variable tiene la forma

$$\langle x | 0 \rangle \equiv \psi_0(x) = \left( \frac{a}{\sqrt{\pi}} \right)^{-1/2} e^{-a^2 x^2/2} \quad (5.77)$$

Los otros vectores se obtienen mediante la aplicación de  $\hat{a}^+$  sobre  $|0\rangle$ . Pero tienen que ser normalizados ya que su norma resulta diferente de la unidad. En efecto,

$$\| (\hat{a}^+)^n |0\rangle \|^2 = \langle 0 | \hat{a}^n (\hat{a}^+)^n |0\rangle = \langle 0 | \hat{a}^{n-1} (\hat{a} \hat{a}^+) (\hat{a}^+)^{n-1} |0\rangle \quad (5.78)$$

expresión que puede ser transformada si se tiene en cuenta el conmutador  $[\hat{a}, \hat{a}^+]$ .

Gracias a ello se obtiene

$$\begin{aligned} \| (\hat{a}^+)^n |0\rangle \|^2 &= \langle 0 | \hat{a}^{n-1} (\hat{N} + 1) (\hat{a}^+)^{n-1} |0\rangle = n \langle 0 | \hat{a}^{n-1} (\hat{a}^+)^{n-1} |0\rangle \\ &= n \langle 0 | \hat{a}^{n-2} (\hat{a} \hat{a}^+) (\hat{a}^+)^{n-2} |0\rangle \end{aligned} \quad (5.79)$$

que, si se vuelve a emplear el conmutador  $[\hat{a}, \hat{a}^+]$ , resulta igual a

$$\| (\hat{a}^+)^n |0\rangle \|^2 = n \langle 0 | \hat{a}^{n-2} (\hat{N} + 1) (\hat{a}^+)^{n-2} |0\rangle = n(n-1) \langle 0 | \hat{a}^{n-2} (\hat{a}^+)^{n-2} |0\rangle \quad (5.80)$$

Es claro que después de  $n$  transformaciones se obtendrá

$$\| (\hat{a}^+)^n |0\rangle \|^2 = n(n-1) \cdots 1 \langle 0 | 0 \rangle = n! \quad (5.81)$$

En consecuencia, los vectores normalizados se escribirán

$$|n\rangle = \frac{|N\rangle}{\sqrt{n!}} = \frac{(\hat{a}^+)^n |0\rangle}{\sqrt{n!}} \quad (5.82)$$

La acción de  $\hat{a}^+$  sobre los  $|n\rangle$ , ya normalizados, resulta igual a

$$\begin{aligned}\hat{a}^+|n\rangle &= \hat{a}^+ \left\{ \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n |0\rangle \right\} = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^{n+1} |0\rangle \\ &= \frac{\sqrt{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}} (\hat{a}^+)^{n+1} |0\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle\end{aligned}\tag{5.83}$$

La acción de  $\hat{a}$  dará el resultado

$$\hat{a}|n\rangle = \hat{a} \left\{ \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n |0\rangle \right\} = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a} \hat{a}^+ (\hat{a}^+)^{n-1} |0\rangle\tag{5.84}$$

el cual puede ser expresado como

$$\begin{aligned}\hat{a}|n\rangle &= \frac{\hat{N}+1}{\sqrt{n!}} \sqrt{(n-1)!} |n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} (\hat{N}+1) |n-1\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n}} (n-1+1) |n-1\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle\end{aligned}\tag{5.85}$$

En consecuencia, sus elementos de matriz en el estado  $n$ -ésimo son iguales a

$$\begin{aligned}\langle n' | \hat{a}^+ | n \rangle &= \langle n' | \sqrt{n+1} | n+1 \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} \\ \langle n' | \hat{a} | n \rangle &= \langle n' | \sqrt{n} | n-1 \rangle = \sqrt{n} \delta_{n',n-1}\end{aligned}\tag{5.86}$$

Por su parte, los elementos de matriz de los operadores  $\hat{x}$  y  $\hat{p}$  también pueden ser calculados fácilmente si se les expresa a través de  $\hat{a}$  y  $\hat{a}^+$ . En efecto, para

$$\begin{aligned}\langle n' | \hat{x} | n \rangle &= \langle n' | \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^+) | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n' | (\hat{a} + \hat{a}^+) | n \rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left\{ \sqrt{n} \delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} \right\}\end{aligned}\tag{5.87}$$

y para

$$\begin{aligned}\langle n' | \hat{p} | n \rangle &= \langle n' | -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^+) | n \rangle = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \langle n' | (\hat{a} - \hat{a}^+) | n \rangle \\ &= -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \left\{ \sqrt{n} \delta_{n',n-1} - \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} \right\}\end{aligned}\tag{5.88}$$

Finalmente, los elementos de matriz del operador de la energía también tienen una expresión sumamente sencilla

$$\begin{aligned}\langle n' | \hat{H} | n \rangle &= \hbar\omega \langle n' | \hat{N} + 1/2 | n \rangle = \hbar\omega (n + 1/2) \langle n' | n \rangle \\ &= \hbar\omega (n + 1/2) \delta_{n',n}\end{aligned}\tag{5.89}$$

La introducción del operador  $\hat{N}$  permite interpretar los estados con un valor definido de la energía como un estado en el cual hay  $n$  partículas idénticas, cada una con la misma energía igual a  $\hbar\omega/2$ . Estas partículas aparecen y desaparecen por la acción de los operadores  $\hat{a}^+$  y  $\hat{a}$ , respectivamente. Es por esos que a éstos últimos se les ha denominado **operadores de creación y aniquilación** de partículas.

### 5.3.4. El oscilador armónico en varias dimensiones.

El formalismo de los operadores de creación y aniquilación es muy empleado en sistemas de  $s$  dimensiones. En estos casos tales sistemas se entienden como un conjunto de osciladores independientes<sup>1</sup>, cada uno con sus propios parámetros, y su hamiltoniano se expresa como

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^s \hat{h}_i = \sum_{i=1}^s \frac{1}{2m_i} \left\{ \hat{p}_i^2 + m_i^2 \omega_i^2 \hat{x}_i^2 \right\} \quad (5.90)$$

El espacio de vectores de estado resulta siendo el producto vectorial de los espacios unidimensionales. Así que un vector arbitrario tendrá la forma

$$|n\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_s\rangle = \prod_{i=1}^s |n_i\rangle \quad \text{con} \quad n = \sum_{i=1}^s n_i \quad (5.91)$$

donde  $|n_i\rangle$  es el vector propio del hamiltoniano correspondiente al oscilador  $i$ -ésimo.

En este caso se introduce operadores de creación y aniquilación de cada tipo de partículas, de modo que un estado arbitrario se puede expresar como

$$\begin{aligned} |n\rangle &= (n_1! \cdot n_2! \cdot \dots \cdot n_s!)^{-1/2} \hat{a}_1^+ |0_1\rangle \hat{a}_2^+ |0_2\rangle \dots \hat{a}_s^+ |0_s\rangle \\ &= (n_1! \cdot n_2! \cdot \dots \cdot n_s!)^{-1/2} \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^+ \dots \hat{a}_s^+ |0\rangle \end{aligned} \quad (5.92)$$

donde

$$|0\rangle = |0_1\rangle |0_2\rangle \dots |0_s\rangle \quad (5.93)$$

y  $|0_i\rangle$  es el estado fundamental del  $i$ -ésimo oscilador unidimensional.

La energía del estado  $n$  tiene la siguiente fórmula

$$E_n = \sum_{i=1}^s \hbar \omega_i (n_i + 1/2) \quad (5.94)$$

---

<sup>1</sup>Que corresponderían a los modos normales de oscilación en el caso clásico

# Capítulo 6

## Teoría del momento cinético

En la Mecánica Cuántica hay algunos operadores vectoriales cuya propiedad fundamental es que el conmutador de dos componentes diferentes siempre es proporcional a la tercera componente. Tales operadores se denominan operadores de momento cinético y de manera genérica se representan por  $\hat{\mathbf{j}}$ .

La propiedad fundamental que satisfacen se expresa mediante las fórmulas:

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_k] = i \hbar \varepsilon_{ikl} \hat{j}_l \quad \text{ó} \quad \hat{\mathbf{j}} \times \hat{\mathbf{j}} = i \hbar \hat{\mathbf{j}} \quad (6.1)$$

donde, en la primera fórmula,  $\varepsilon_{ikl}$  es el tensor totalmente antisimétrico de tercer rango y se presupone sumación sobre los índices que se repiten dos veces, y en la segunda se emplea la definición de producto vectorial.

Una de las primeras consecuencias que se derivan de la propiedad anterior es que el cuadrado del operador del momento siempre conmuta con una de las componentes. En efecto, aplicando la propiedad fundamental se obtiene

$$[\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_i] = \left[ \sum_k \hat{j}_k^2, \hat{j}_i \right] = \sum_k [\hat{j}_k^2, \hat{j}_i] = \sum_k \left\{ \hat{j}_k [\hat{j}_k, \hat{j}_i] + [\hat{j}_k, \hat{j}_i] \hat{j}_k \right\}, \quad (6.2)$$

así que después de reemplazar los conmutadores se tendrá

$$[\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_i] = i\hbar \sum_k \left\{ \hat{j}_k \varepsilon_{kin} \hat{j}_n + \varepsilon_{kin} \hat{j}_n \hat{j}_k \right\} = i\hbar \sum_k \left\{ \hat{j}_k \varepsilon_{kin} \hat{j}_n + \varepsilon_{nik} \hat{j}_k \hat{j}_n \right\} \quad (6.3)$$

gracias a lo cual

$$[\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_i] = i\hbar \hat{j}_k \hat{j}_n \sum_k \left\{ \varepsilon_{kin} + \varepsilon_{nik} \right\} = i\hbar \hat{j}_k \hat{j}_n \sum_k \left\{ \varepsilon_{kin} - \varepsilon_{kin} \right\} = 0 \quad (6.4)$$

Estas dos propiedades se toman como una definición de un operador de momento cinético. En consecuencia, independientemente de si tiene análogo clásico o no, *se denomina operador de momento cinético a todo operador vectorial que satisfaga las condiciones*

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_k] = i\hbar \varepsilon_{ikl} \hat{j}_l \quad \text{y} \quad [\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_i] = 0 \quad (6.5)$$

De la primera relación se deduce que *las componentes del operador  $\hat{\mathbf{j}}$  no pueden simultáneamente tener valores definidos*, es decir las tres componentes no conforman un conjunto de magnitudes simultáneamente observables.

En cambio, la segunda refleja el hecho de que *sí es posible medir simultáneamente el cuadrado del vector y una de sus componentes*, lo que significa que *ambas magnitudes tienen un conjunto común de funciones propias*.

## 6.1. Momento orbital

De acuerdo con el principio de correspondencia el operador del momento orbital debe depender de los operadores de la coordenada e impulso de la misma manera como el momento clásico depende de las correspondientes magnitudes físicas. En consecuencia

$$\hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{x}} \times \frac{\hbar}{i} \hat{\nabla} = -i\hbar \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\nabla} \quad (6.6)$$

En coordenadas cartesianas las componentes del momento orbital tienen la forma

$$\hat{l}_i = \varepsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k = -i\hbar \varepsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k} \quad (6.7)$$

y satisfacen las siguientes relaciones de conmutación

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar \hat{l}_z, \quad [\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hbar \hat{l}_x, \quad [\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hbar \hat{l}_y \quad (6.8)$$

En coordenadas esféricas las componentes del momento orbital se expresan a través de las siguientes fórmulas

$$\begin{aligned} \hat{l}_x &= i\hbar \left\{ \text{sen}\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} + \cot\vartheta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right\} \\ \hat{l}_y &= -i\hbar \left\{ \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} - \cot\vartheta \text{sen}\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right\} \\ \hat{l}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi} \end{aligned} \quad (6.9)$$

de tal manera que el operador  $\hat{\mathbf{l}}^2$  tiene la siguiente expresión

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\text{sen}\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} (\text{sen}\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta}) + \frac{1}{\text{sen}^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right\} \quad (6.10)$$

### 6.1.1. Valores propios y vectores propios del momento orbital.

Debido a que en coordenadas esféricas los operadores  $\hat{l}^2$  y  $\hat{l}_z$  se expresan como operaciones diferenciales sobre las coordenadas angulares, sus vectores propios en la representación de coordenadas serán representados por funciones  $F(\vartheta, \varphi)$  de esas mismas coordenadas y las ecuaciones para sus valores propios tendrán la forma

$$\hat{l}_z F(\vartheta, \varphi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} F(\vartheta, \varphi) = \hbar \alpha F(\vartheta, \varphi) \quad (6.11)$$

y

$$\hat{l}^2 F(\vartheta, \varphi) = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} F(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 \beta F(\vartheta, \varphi) \quad (6.12)$$

Estas ecuaciones pueden ser resueltas mediante separación de variables, es decir, asumiendo que  $F(\vartheta, \varphi) = \Theta(\vartheta) \Phi(\varphi)$ , gracias a lo cual la primera ecuación se transforma en

$$-i\hbar \frac{\partial \Phi(\varphi)}{\partial \varphi} = \hbar \alpha \Phi(\varphi) \quad (6.13)$$

y su solución es la función

$$\Phi(\varphi) = e^{i\alpha\varphi} \quad (6.14)$$

La solución obtenida debe ser única. Por lo tanto, debe ser la misma tanto para  $\varphi = 0$  como para  $\varphi = 2\pi$ , lo que significa que

$$e^{\pm 2\pi\alpha} = 1 \quad (6.15)$$

que se cumple sólo si  $\alpha$  es entero, razón por la cual usualmente es representada por  $m$ .

La segunda ecuación se expresará como

$$-\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \Theta(\vartheta) \Phi(\varphi) = \hbar^2 \beta \Theta(\vartheta) \Phi(\varphi) \quad (6.16)$$

y, ya que

$$\frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} = -m^2 \Phi(\varphi), \quad (6.17)$$

se transforma en

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) \Theta(\vartheta) - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \Theta(\vartheta) = -\beta \Theta(\vartheta) \quad (6.18)$$

Si  $\cos \vartheta = \xi$  entonces  $-1 \leq \xi \leq 1$  y  $d\xi = -\sin \vartheta d\vartheta$  y la ecuación para  $\Theta(\xi)$  adquiere la forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi} \left\{ (1 - \xi^2) \frac{\partial \Theta(\xi)}{\partial \xi} \right\} - \frac{m^2}{1 - \xi^2} \Theta(\xi) + \beta \Theta(\xi) &= 0 \\ \left\{ 1 - \xi^2 \right\} \frac{\partial^2 \Theta(\xi)}{\partial \xi^2} - 2\xi \frac{d\Theta(\xi)}{d\xi} + \left\{ \beta - \frac{m^2}{1 - \xi^2} \right\} \Theta(\xi) &= 0, \end{aligned} \quad (6.19)$$

coincidente con la ecuación para los polinomios asociados de Legendre.

**Ecuación de Legendre.**

Cuando  $m = 0$  la ecuación anterior se reduce a

$$(1 - \xi^2) \frac{d^2\Theta(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{d\Theta(\xi)}{d\xi} + \beta \Theta(\xi) = 0 \quad (6.20)$$

que es la ecuación para los polinomios ordinarios de Legendre  $P_\ell(\xi)$ , siempre que  $\beta$  se relacione con  $\ell$  mediante la fórmula  $\beta = \ell(\ell + 1)$ .

Su solución puede ser buscada como una serie de potencias de la variable  $\xi$

$$\Theta(\xi) = C_0 + \xi C_1 + \xi^2 C_2 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \xi^n \quad (6.21)$$

cuyos coeficientes se definen al reemplazar la serie en la ecuación diferencial.

En efecto, de la ecuación diferencial se obtiene la siguiente relación de recurrencia

$$C_{i+2} = \frac{i(i+1) - \beta}{(i+1)(i+2)} C_i \quad (6.22)$$

de donde se puede deducir que para valores grandes de  $i$

$$\frac{C_{i+2}}{C_i} \longrightarrow 1,$$

razón por la cual se comporta de manera similar a la serie geométrica, es decir, converge para  $\xi < 1$  y diverge cuando  $\xi = 1$ .

Como la solución también debe existir  $\xi = 1$ , es necesario exigir que la serie se trunque en el término  $\ell$ , es decir, se transforme en un polinomio de orden  $\ell$ . Eso es posible si

$$\beta = \ell(\ell + 1)$$

La fórmula de recurrencia es tal que si se conoce  $C_0$  y  $C_1$  se puede calcular el polinomio completo. Por lo general uno de los coeficientes se toma igual a cero y el otro diferente de cero. Cuando  $\ell$  es par, se elige  $C_0 \neq 0$  y el polinomio contendrá sólo potencias pares. En cambio, si  $\ell$  es impar se toma  $C_1 \neq 0$  y se obtiene un polinomio compuesto sólo por potencias impares.

Los polinomios de Legendre también se definen a través de la fórmula de Rodrigues

$$P_\ell(\xi) = \frac{1}{2^\ell \cdot \ell!} \frac{d^\ell}{d\xi^\ell} (\xi^2 - 1)^\ell \quad (6.23)$$

de donde se puede deducir que

$$P_\ell(1) = 1 \quad \text{y} \quad P_\ell(-\xi) = (-1)^\ell P_\ell(\xi) \quad (6.24)$$

y también que

$$\int P_\ell(\xi) P_n(\xi) d\xi = \frac{2}{2n+1} \delta_{ln} \quad \text{y} \quad \int P_\ell(\xi) d\xi = \delta_{\ell 0} \quad (6.25)$$

Además se puede verificar que se cumplen las siguientes relaciones de recurrencia

$$\xi(2\ell+1) P_\ell(\xi) = (\ell+1) P_{\ell+1}(\xi) + \ell P_{\ell-1}(\xi) \quad (6.26)$$

y

$$(2\ell+1) P_\ell(\xi) = \frac{d}{d\xi} P_{\ell+1} - \frac{d}{d\xi} P_{\ell-1} \quad (6.27)$$

### Ecuación asociada de Legendre.

Antes de resolver la ecuación general

$$\left\{1 - \xi^2\right\} \frac{\partial^2 \Theta(\xi)}{\partial \xi^2} - 2\xi \frac{d\Theta(\xi)}{d\xi} + \left\{\beta - \frac{m^2}{1 - \xi^2}\right\} \Theta(\xi) = 0 \quad (6.28)$$

es conveniente ver su comportamiento en los puntos especiales. Para eso se introduce la variable  $z = \xi \mp 1$  con respecto de la cual los puntos especiales resultan ubicados en  $z = 0$ , la ecuación toma la forma

$$\frac{d^2 \Theta(z)}{dz^2} + \frac{2(z \pm 1)}{z(z \pm 2)} \frac{d\Theta(z)}{dz} - \left\{ \frac{\beta}{z(z \pm 2)} + \frac{m^2}{z^2(z \pm 2)^2} \right\} \Theta(z) = 0 \quad (6.29)$$

y la función  $\Theta(z)$  puede ser expresada como

$$\Theta(z) = z^\gamma \Upsilon(z) \quad \text{donde} \quad \Upsilon(z) = \sum_{n=0}^{\infty} D_n z^n \quad (6.30)$$

de modo que para  $z \rightarrow 0$  la función puede ser aproximada como  $\Theta(z) \propto z^\gamma$ .

En la cercanía de los puntos especiales la ecuación (6.29) adopta la forma

$$\gamma(\gamma-1) z^{\gamma-2} + \frac{2(z \pm 1)}{z(z \pm 2)} \gamma z^{\gamma-1} - \left\{ \frac{a}{z(z \pm 2)} + \frac{m^2}{z^2(z \pm 2)^2} \right\} z^\gamma = 0, \quad (6.31)$$

es decir,

$$\gamma(\gamma-1) z^{\gamma-2} + 2 \frac{z \pm 1}{z \pm 2} \gamma z^{\gamma-2} - \frac{a}{z \pm 2} z^{\gamma-1} \mp \frac{m^2}{(z \pm 2)^2} z^{\gamma-2} = 0$$

$$\gamma(\gamma-1) z^{\gamma-2} + \gamma z^{\gamma-2} - \frac{a}{2} z^{\gamma-1} - \frac{m^2}{4} z^{\gamma-2} = 0 \quad (6.32)$$

$$\gamma(\gamma-1) z^{\gamma-2} + \gamma b_0 z^{\gamma-2} - \frac{m^2}{4} z^{\gamma-2} = 0$$



de donde resulta

$$\gamma(\gamma - 1) + \gamma - \frac{m^2}{4} = 0 \quad \text{ó} \quad \gamma = \pm m/2 \quad (6.33)$$

Para que la solución no sea divergente en los puntos especiales es necesario que  $\gamma$  tome sólo valores positivos. Por eso es conveniente considerar que  $\gamma = m/2$ , cuando  $m$  sea positivo, o también  $\gamma = -m/2$ , si  $m$  es negativo. Cuando  $m$  es positivo<sup>1</sup> la solución se postula como

$$\Theta(\xi) \propto (1 - \xi^2)^{m/2} \Upsilon(\xi) \quad (6.34)$$

con lo cual la ecuación (6.19) se transforma en una relación para  $\Upsilon(\xi)$

$$(1 - \xi^2) \frac{d^2 \Upsilon(\xi)}{d\xi^2} - 2(m+1)\xi \frac{d\Upsilon(\xi)}{d\xi} + (\beta - m - m^2) \Upsilon(\xi) = 0 \quad (6.35)$$

Como  $\Upsilon(\xi)$  se expresa a través de una serie de potencias sobre  $\xi$ , sus derivadas también se expresarán de manera análoga. Así que después de reemplazar la función y sus derivadas en la ecuación se obtiene la serie

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} \left\{ (\nu+2)(\nu+1) D_{\nu+2} - \nu(\nu-1) D_{\nu} - 2\nu(m+1) D_{\nu} + (\beta - m - m^2) D_{\nu} \right\} \xi^{\nu} = 0 \quad (6.36)$$

cuyos coeficientes deben ser ceros. Por lo tanto

$$(\nu+2)(\nu+1) D_{\nu+2} = \left\{ \nu(\nu-1) + 2\nu(m+1) - \beta + m + m^2 \right\} D_{\nu} \quad (6.37)$$

de donde

$$D_{\nu+2} = \frac{\nu(\nu-1) + 2\nu(m+1) - \beta + m + m^2}{(\nu+2)(\nu+1)} D_{\nu} \quad (6.38)$$

Para que  $\Upsilon(\xi)$  no diverga es necesario que sea un polinomio de orden  $k$  y esto es posible sólo si los coeficientes para las potencias mayores son todos iguales a cero. Para que tal situación tenga lugar es indispensable que el numerador de la fórmula de recurrencia sea igual a cero

$$\left\{ \nu(\nu-1) + 2\nu(m+1) - \beta + m + m^2 \right\} /_{\nu=k} = 0 \quad (6.39)$$

de donde se deduce que

$$\begin{aligned} \beta &= k^2 + k + 2km + m + m^2 \\ &= (k+m)(k+m+1) \\ &= \ell(\ell+1) \end{aligned} \quad (6.40)$$

Las constantes  $\ell$  y  $m$  están relacionadas de tal modo que  $m$  está limitada por los valores de  $\ell$ . En consecuencia

$$\ell = 0, 1, 2, \dots \quad (6.41)$$

$$m = \ell - k = 0, 1, 2, \dots, \ell$$

---

<sup>1</sup>El caso  $m < 0$  se verá más adelante.

Al derivar la ecuación diferencial (6.35) se obtiene la relación

$$(1 - \xi^2) \frac{d^3 \Upsilon(\xi)}{d\xi^3} - 2 \xi \{(m+1) + 1\} \frac{d^2 \Upsilon}{d\xi^2} + \{\beta - (m+1) - (m+1)^2\} \frac{d\Upsilon}{d\xi} = 0$$

la cual puede ser expresada como

$$(1 - \xi^2) \frac{d^2}{d\xi^2} \Upsilon'(\xi) - 2 \xi \{(m+1) + 1\} \frac{d}{d\xi} \Upsilon'(\xi) + \{\beta - (m+1) - (m+1)^2\} \Upsilon'(\xi) = 0 \quad (6.42)$$

La ecuación anterior es la misma ecuación (6.35), pero para  $m+1$  (en lugar de  $m$ ) y su solución va a coincidir con la derivada de la solución para  $m$ . Esto significa que para  $m+1$  la ecuación diferencial ya no hay que resolverlo sino sólo derivar la solución obtenida para  $m$ .

En consecuencia, si la solución de la ecuación (6.19) para  $m=0$  se representa por  $P_\ell$ , entonces la solución para  $m>0$ , que se representa por  $P_\ell^m$ , se expresará como

$$P_\ell^m(\xi) = (1 - \xi^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\xi^m} P_\ell(\xi) = (1 - \xi^2)^{m/2} \frac{d^{m+\ell}}{d\xi^{m+\ell}} (\xi^2 - 1)^\ell \quad (6.43)$$

La ecuación para  $\Theta(\xi)$  es invariante con respecto a la sustitución de  $m$  por  $-m$ , debido que dicho parámetro aparece como  $m^2$ . En efecto, cuando en la ecuación para  $\Upsilon(\xi)$  reemplazamos  $m$  por  $-m$  obtenemos

$$(1 - \xi^2) \frac{d^2 \Upsilon(\xi)}{d\xi^2} + 2(m-1) \xi \frac{d\Upsilon(\xi)}{d\xi} + (\beta + m - m^2) \Upsilon(\xi) = 0 \quad (6.44)$$

que es la misma que se obtiene de la ecuación para  $\Theta(\xi)$ , si en lugar de  $m$  escribimos  $-m$ .

Por tal motivo, para valores negativos de  $m$  la solución, que podríamos escribirla como

$$\Theta(\xi) \propto (1 - \xi^2)^{-m/2} \frac{d^{\ell-m}}{d\xi^{\ell-m}} (\xi^2 - 1)^\ell,$$

resulta proporcional a la solución para  $m$  positivos, es decir,

$$\Theta(-m) \propto \Theta(m),$$

Si empleamos la proporcionalidad de las dos soluciones podemos escribir

$$C_- (1 - \xi^2)^{-m/2} \frac{d^{\ell-m}}{d\xi^{\ell-m}} (\xi^2 - 1)^\ell = C_+ (1 - \xi^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{d\xi^{\ell+m}} (\xi^2 - 1)^\ell$$

y cuando derivemos las potencias mayores  $\xi^{2\ell}$  se obtendrá

$$C_- (-1)^m (\ell - m)! = C_+ (\ell + m)$$

Usualmente  $C_+$  se toma igual al inverso de  $2^\ell \ell!$ , debido a lo cual

$$C_- = \frac{(-1)^m (\ell + m)!}{2^\ell \ell! (\ell - m)!}$$

En consecuencia, para la misma ecuación se tendrá

$$P_\ell^m(\xi) = (1 - \xi^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{d\xi^{\ell+m}} \frac{(\xi^2 - 1)^\ell}{2^\ell \ell!}$$

pero también

$$P_\ell^m(\xi) = (-1)^m \frac{(\ell + m)!}{(\ell - m)!} (1 - \xi^2)^{-m/2} \frac{d^{\ell-m}}{d\xi^{\ell-m}} \frac{(\xi^2 - 1)^\ell}{2^\ell \ell!}$$

de donde se obtiene que

$$P_\ell^{-m}(\xi) = (-1)^m \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!} P_\ell^m(\xi) \quad (6.45)$$

Se puede verificar que los polinomios  $P_\ell^m$  resultan normalizados de la siguiente manera

$$\int P_\ell^m P_{\ell'}^m = \frac{2}{2\ell + 1} \frac{(\ell + m)!}{(\ell - m)!} \delta_{\ell\ell'} \quad (6.46)$$

y satisfacen las siguientes relaciones de recurrencia

$$\xi P_\ell^m = \frac{\ell - m + 1}{2\ell + 1} P_{\ell+1}^m + \frac{\ell + m}{2\ell + 1} P_{\ell-1}^m \quad (6.47)$$

$$(1 - \xi^2)^{1/2} P_\ell^m(\xi) = \frac{1}{2\ell + 1} P_{\ell+1}^{m+1} - \frac{1}{2\ell + 1} P_{\ell-1}^{m+1}$$

así como

$$(1 - \xi^2) \frac{dP_\ell^m}{d\xi} = (\ell + 1) \xi P_\ell^m - (\ell + 1 - m) P_{\ell+1}^m \quad (6.48)$$

### Armónicos esféricos.

En consecuencia, las funciones propias del operador  $\hat{\mathbf{l}}^2$ , ya normalizadas, se expresarán de la siguiente manera

$$Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2\ell + 1)}{4\pi}} \sqrt{\frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} P_\ell^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (6.49)$$

Éstas se conocen como armónicos esféricos y poseen siguientes propiedades:

1. La suma sobre todos los valores de  $\ell$  y  $m$  del producto de dos armónicos que dependen de diferentes ángulos se expresa como:

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_\ell^{m*}(\vartheta, \varphi) Y_\ell^m(\vartheta', \varphi') = \frac{\delta(\vartheta - \vartheta') \delta(\varphi - \varphi')}{\sin \vartheta} = \delta(\Omega - \Omega') \quad (6.50)$$

2. La propiedades de paridad se expresan a través de las siguientes relaciones

$$Y_\ell^{m*}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m Y_\ell^{-m}(\vartheta, \varphi) \quad (6.51)$$

$$Y_\ell^m(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) = (-1)^\ell Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)$$

3. Satisfacen las siguientes relaciones de recurrencia:

$$\begin{aligned} \xi Y_\ell^m &= \sqrt{\frac{(\ell + m + 1)(\ell - m + 1)}{(2\ell + 1)(2\ell + 3)}} Y_{\ell+1}^m + \sqrt{\frac{(\ell + m)(\ell - m)}{(2\ell + 1)(2\ell - 1)}} Y_{\ell-1}^m \\ \sqrt{1 - \xi^2} Y_\ell^m &= \left\{ -\sqrt{\frac{(\ell - m + 1)(\ell - m + 2)}{(2\ell + 1)(2\ell + 3)}} Y_{\ell+1}^{m-1} + \sqrt{\frac{(\ell + m)(\ell + m - 1)}{(2\ell + 1)(2\ell - 1)}} Y_{\ell-1}^{m-1} \right\} e^{i\varphi} \end{aligned} \quad (6.52)$$

## 6.2. Teoría general del momento angular.

Los valores propios y vectores propios de los operadores  $\hat{\mathbf{j}}^2$  y  $\hat{j}_z$ , que son medibles simultáneamente, pueden ser definidos de manera general.

En primer lugar se puede demostrar que  $\hat{\mathbf{j}}^2$  es un operador positivo, es decir un operador cuyos valores propios siempre son mayores o iguales a cero. En efecto, si se representa por  $|j, m\rangle^2$  los vectores propios de  $\hat{\mathbf{j}}^2$  y por  $\hbar^2 \beta$  sus valores propios correspondientes se tendrá

$$\langle j, m | \hat{\mathbf{j}}^2 | j, m \rangle = \langle j, m | \hat{\mathbf{j}} \cdot \hat{\mathbf{j}} | j, m \rangle \geq 0, \quad (6.53)$$

por ser la norma del vector  $\hat{\mathbf{j}} | j, m \rangle$ , y

$$\langle j, m | \hat{\mathbf{j}}^2 | j, m \rangle = \hbar^2 \beta \langle j, m | j, m \rangle \quad (6.54)$$

de donde, si se considera que la norma de cualquier vector (p. ej.  $|j, m\rangle$ ) es siempre positiva, se deduce que  $\beta \geq 0$ .

También se puede demostrar que los valores propios de  $\hat{j}_z$  están limitados desde arriba y desde abajo por magnitudes relacionadas con los valores propios de  $\hat{\mathbf{j}}^2$ . Si se representa por  $\hbar m$  los valores propios de  $\hat{j}_z$ , es decir

$$\hat{j}_z | j, m \rangle = \hbar m | j, m \rangle \quad (6.55)$$

y se emplea la relación

$$\langle j, m | \hat{\mathbf{j}}^2 | j, m \rangle \geq \langle j, m | \hat{j}_z^2 | j, m \rangle \quad (6.56)$$

---

<sup>2</sup>El sentido de cada parámetro, lo mismo que los valores que toman, se verán más adelante.

la cual resulta expresada como

$$\hbar^2 \beta \langle j, m | j, m \rangle \geq \hbar^2 m^2 \langle j, m | j, m \rangle \quad (6.57)$$

se obtiene

$$\hbar^2 \beta \geq \hbar^2 m^2 \quad \text{es decir} \quad \beta \geq \alpha^2 \quad (6.58)$$

de donde se deduce que

$$-\sqrt{\beta} \leq m \leq \sqrt{\beta} \quad (6.59)$$

### 6.2.1. Operadores de ascenso y descenso

Para determinar con exactitud la relación entre los valores propios de ambos operadores es conveniente introducir los operadores  $\hat{j}_{\pm}$  que se definen de la siguiente manera

$$\hat{j}_{\pm} = \hat{j}_x \pm i \hat{j}_y \quad (6.60)$$

y tienen, entre otras, las siguientes propiedades:

1. El producto  $\hat{j}_{\pm} \hat{j}_{\mp}$  siempre se expresa a través de  $\hat{j}^2$  y  $\hat{j}_z$ . En efecto:

$$\hat{j}_{\pm} \hat{j}_{\mp} = \{\hat{j}_x \pm i \hat{j}_y\} \{\hat{j}_x \mp i \hat{j}_y\} = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 \pm \hbar \hat{j}_z$$

de donde

$$\hat{j}_{\pm} \hat{j}_{\mp} = \hat{j}^2 - \hat{j}_z^2 \pm \hbar \hat{j}_z \quad (6.61)$$

2. El conmutador de ambos operadores también se expresa a través de  $\hat{j}_z$  y su anticonmutador a través de  $\hat{j}^2$  y  $\hat{j}_z$ . En efecto restando y sumando miembro a miembro la relación con los signos superiores y la relación con los inferiores se obtiene

$$\{\hat{j}_+, \hat{j}_-\} = 2 (\hat{j}^2 - \hat{j}_z^2) \quad \text{y} \quad [\hat{j}_+, \hat{j}_-] = 2 \hbar \hat{j}_z \quad (6.62)$$

3. El conmutador de  $\hat{j}_z$  con una potencia  $n$ -ésima de los operadores  $\hat{j}_{\pm}$  es proporcional a la potencia  $n$ -ésima de estos mismos operadores  $\hat{j}_{\pm}$ , es decir

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_{\pm}^n] = \pm n \hbar \hat{j}_{\pm}^n \quad (6.63)$$

Esta relación se demuestra por inducción, es decir se muestra que se cumple para  $n = 1$  y luego, asumiendo que se cumple para un valor arbitrario de  $n$ , se demuestra que se cumple para  $n + 1$ . Cuando  $n = 1$  se tiene:

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_{\pm}] = [\hat{j}_z, \hat{j}_x \pm i \hat{j}_y] = [\hat{j}_z, \hat{j}_x] \pm i [\hat{j}_z, \hat{j}_y]$$

es decir

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_{\pm}] = i \hbar \hat{j}_y \pm i (-i \hbar \hat{j}_x) = \pm \hbar (\hat{j}_x \pm i \hat{j}_y).$$

Por lo tanto

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_{\pm}] = \pm \hbar \hat{j}_{\pm} \quad (6.64)$$

Para  $n + 1$  se tendrá:

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_\pm^{n+1}] = [\hat{j}_z, \hat{j}_\pm^n \hat{j}_\pm] = \hat{j}_\pm^n [\hat{j}_z, \hat{j}_\pm] + [\hat{j}_z, \hat{j}_\pm^n] \hat{j}_\pm$$

de modo que si se asume que

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_\pm^n] = \pm n \hbar \hat{j}_\pm^n$$

se tendrá

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_\pm^{n+1}] = \hat{j}_\pm^n (\pm \hbar \hat{j}_\pm) \pm n \hbar \hat{j}_\pm^n \hat{j}_\pm,$$

es decir,

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_\pm^{n+1}] = \pm \hbar (n + 1) \hat{j}_\pm^{n+1} \quad (6.65)$$

### Acción de los operadores $\hat{j}_\pm$

Si se tiene en cuenta las propiedades anteriormente enumeradas se puede llegar a determinar cuál es el resultado de la acción de  $\hat{j}_\pm$  sobre los vectores propios  $|j, m\rangle$  de los operadores  $\hat{\mathbf{j}}$  y  $\hat{j}_z$ , donde  $j$  está relacionado con  $\beta$  y  $m$ . En efecto, si a la relación

$$\hat{j}_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle \quad (6.66)$$

se aplica el operador  $\hat{j}_\pm$  se obtiene

$$\hat{j}_\pm \hat{j}_z |j, m\rangle = \hat{j}_\pm \hbar m |j, m\rangle$$

de modo que al emplear el conmutador  $[\hat{j}_z, \hat{j}_\pm] = \pm \hbar \hat{j}_\pm$  se obtiene

$$\hat{j}_\pm \hat{j}_z |j, m\rangle = (\hat{j}_z \hat{j}_\pm \mp \hbar \hat{j}_\pm) |j, m\rangle = \hbar m \hat{j}_\pm |j, m\rangle$$

lo que significa que

$$\hat{j}_z \hat{j}_\pm |j, m\rangle = \hbar (m \pm 1) \hat{j}_\pm |j, m\rangle \quad (6.67)$$

En consecuencia, la acción de  $\hat{j}_\pm$  sobre un vector propio  $|j, m\rangle$  es tal que lo transforma en el vector propio de  $\hat{j}_z$ , correspondiente al valor  $m \pm 1$  y se representará por  $|j, m \pm 1\rangle^3$ .

### 6.2.2. Valores propios del momento

Las propiedades de  $\hat{j}_\pm$  permiten determinar con exactitud los valores propios de los operadores  $\hat{\mathbf{j}}^2$  y  $\hat{j}_z$ . En efecto, si se tiene en cuenta que los valores propios  $m$  tienen un máximo  $m_{max}$  y un mínimo  $m_{min}$ , entonces al aplicar los operadores de ascenso y descenso a los vectores correspondientes se tendrá

$$\hat{j}_+ |j, m_{max}\rangle = 0 \quad \text{y} \quad \hat{j}_- |j, m_{min}\rangle = 0 \quad (6.68)$$

<sup>3</sup>Por tal razón a veces se les denomina *operadores de ascenso (aumento de  $m$ )* y *descenso (disminución de  $m$ )*

Si a la primera ecuación se aplica  $\hat{j}_-$  se tendrá

$$\hat{j}_- \hat{j}_+ |j, m_{max}\rangle = \left\{ \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{j}_z^2 - \hbar \hat{j}_z \right\} |j, m_{max}\rangle = 0$$

de donde

$$\left\{ \hbar^2 \beta - \hbar^2 m_{max}^2 - \hbar^2 m_{max} \right\} |j, m_{max}\rangle = 0 \quad (6.69)$$

Como el vector  $|j, m_{max}\rangle \neq 0$ , entonces se obtiene

$$\hbar^2 \beta - \hbar^2 m_{max}^2 - \hbar^2 m_{max} = 0$$

y

$$\beta = m_{max} (m_{max} + 1) \quad (6.70)$$

Si a la segunda ecuación (6.68) se aplica  $\hat{j}_+$ , se obtiene

$$\beta = m_{min} (m_{min} - 1) \quad (6.71)$$

y si se compara con el resultado anterior se tendrá

$$m_{max} (m_{max} + 1) = m_{min} (m_{min} - 1) \quad (6.72)$$

Por otro lado, si hay un vector  $|j, m_{min}\rangle$  y otro  $|j, m_{max}\rangle$ , es posible transformar uno en otro empleando los operadores de ascenso o descenso un número  $N$  de veces. En consecuencia, se puede afirmar que

$$\hat{j}_+^N |j, m_{min}\rangle = |j, m_{max}\rangle \quad \text{ó} \quad \hat{j}_-^N |j, m_{max}\rangle = |j, m_{min}\rangle \quad (6.73)$$

y si se aplica el operador  $\hat{j}_z$ , por ejemplo, a la segunda relación se obtendrá

$$\hat{j}_z \hat{j}_-^N |j, m_{max}\rangle = \hat{j}_z |j, m_{min}\rangle$$

Al emplear el correspondiente conmutador, la expresión anterior se transforma en

$$\left\{ \hat{j}_-^N \hat{j}_z - N \hbar \hat{j}_-^N \right\} |j, m_{max}\rangle = \hat{j}_z |j, m_{min}\rangle,$$

es decir, en

$$\hat{j}_-^N \hbar m_{max} |j, m_{max}\rangle - N \hbar \hat{j}_-^N |j, m_{max}\rangle = \hbar m_{min} |j, m_{min}\rangle$$

de donde se obtiene

$$\left\{ \hbar m_{max} - N \hbar \right\} \hat{j}_-^N |j, m_{max}\rangle = \hbar m_{min} |j, m_{min}\rangle \quad (6.74)$$

o también

$$m_{max} - N = m_{min} \quad \longrightarrow \quad m_{max} - m_{min} = N \quad (6.75)$$

Después de combinar esta ecuación con la relación entre  $m_{max}$  y  $m_{min}$  (6.72) se obtendrá

$$m_{max} = N/2 \quad \text{y} \quad m_{min} = -N/2 \quad (6.76)$$

lo que significa que los valores propios de  $\hat{j}_z$  conforman un conjunto simétrico con respecto del cero, es decir toma los mismos valores en el dominio positivo que en el negativo.

Si a  $N/2$  se le denota por  $j$ , entonces

$$m_{max} = j, \quad m_{min} = -j \quad \text{y} \quad \beta = j(j+1) \quad (6.77)$$

Como  $N$  es un número entero positivo, ya que representa el número de veces que se ha aplicado el operador  $\hat{j}_\pm$  los valores propios de  $\hat{\mathbf{j}}$  y  $\hat{j}_z$  tendrán la siguiente estructura

$$j = N/2 = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots \quad (6.78)$$

$$m = j, j-1, \dots, -(j-1), -j$$

y sus ecuaciones correspondientes serán las siguientes

$$\hat{\mathbf{j}}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle \quad (6.79)$$

$$\hat{j}_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle$$

### 6.2.3. Vectores propios del momento

Para determinar los vectores propios de los operadores del momento se emplea las propiedades de los operadores  $\hat{j}_\pm$  de transformar un vector  $|j, m\rangle$  en alguno de los vectores vecinos  $|j, m \pm 1\rangle$ . En efecto, si se conociera alguno de los vectores propios y éste estuviera normalizado, los otros podrían ser encontrados empleando los operadores  $\hat{j}_\pm$ .

Las propiedades de estos operadores también permiten determinar ese vector propio que puede servir de punto de partida. En efecto, el vector “inicial” puede ser determinado de las ecuaciones

$$\hat{j}_+ |j, j\rangle = 0 \quad \text{ó} \quad \hat{j}_- |j, -j\rangle = 0 \quad (6.80)$$

Este vector, luego de ser normalizado, puede ser empleado para obtener los demás vectores. Pero, hay que tener en cuenta que éstos, inmediatamente después de la acción de  $\hat{j}_\pm$ , no van a resultar normalizados.

Así, la norma del vector  $\hat{j}_\pm |j, m\rangle$ , obtenido a partir de un  $|j, m\rangle_N$ , ya normalizado, por acción de  $\hat{j}_\pm$ , es igual

$$\| \hat{j}_\pm |j, m\rangle_N \| = \langle j, m | \hat{j}_\mp | \hat{j}_\pm |j, m\rangle_N \quad (6.81)$$

de donde se obtiene

$$\| \hat{j}_\pm |j, m\rangle_N \| = \langle j, m | \hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{j}_z^2 \mp \hbar \hat{j}_z |j, m\rangle_N$$

Al reemplazar la acción de los operadores por sus correspondientes valores propios la ecuación anterior se transforma en

$$\| \hat{j}_\pm |j, m\rangle_N \| = \langle j, m | \hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 m^2 \mp \hbar^2 m |j, m\rangle_N,$$



es decir, en

$$\| \hat{j}_{\pm} |j, m\rangle_N \| = \left\{ \hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 m^2 \mp \hbar^2 m \right\} \langle j, m | j, m \rangle_N$$

de donde se obtiene

$$\| \hat{j}_{\pm} |j, m\rangle_N \| = \left\{ \hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 m^2 \mp \hbar^2 m \right\} \neq 1 \quad (6.82)$$

En consecuencia, para ser normalizados, los vectores obtenidos tendrán que ser divididos por la raíz de lo obtenido y quedarán expresados mediante la siguiente fórmula

$$|j, m \pm 1\rangle_N = \hbar^{-1} \left\{ j(j+1) - m^2 \mp m \right\}^{-1/2} \hat{j}_{\pm} |j, m\rangle_N \quad (6.83)$$

o también

$$|j, m \pm 1\rangle_N = \hbar^{-1} \left\{ (j \mp m)(j \pm m + 1) \right\}^{-1/2} \hat{j}_{\pm} |j, m\rangle_N \quad (6.84)$$

Empleando los operadores  $\hat{j}_{\pm}$ , se puede obtener la fórmula que permite calcular un vector arbitrario  $|j, m\rangle$  a partir de  $|j, \pm j\rangle$ <sup>4</sup>. Así, para  $m = j - 1$  se tendrá

$$\begin{aligned} |j, j-1\rangle &= \hbar^{-1} \left\{ (j+j)(j-j+1) \right\}^{-1/2} \hat{j}_- |j, j\rangle \\ &= \hbar^{-1} \left\{ (2j)(1) \right\}^{-1/2} \hat{j}_- |j, j\rangle \end{aligned} \quad (6.85)$$

y si  $m = j - 2$  la fórmula será

$$\begin{aligned} |j, j-2\rangle &= \hbar^{-1} \left\{ (j+j-1)(j-j+1+1) \right\}^{-1/2} \hat{j}_- |j, j-1\rangle \\ &= \hbar^{-1} \left\{ (2j-1)(2) \right\}^{-1/2} \hat{j}_- \times \hbar^{-1} \left\{ (2j)(1) \right\}^{-1/2} \hat{j}_- |j, j\rangle \\ &= \hbar^{-2} \left\{ (2j)(2j-1)(1)(2) \right\}^{-1/2} \hat{j}_-^2 |j, j\rangle \end{aligned} \quad (6.86)$$

de donde se puede inferir que para un  $m = j - s$  se debe obtener

$$|j, j-s\rangle = \hbar^{-s} \left\{ (2j) \cdots (2j-(s-1))(1)(2) \cdots (s) \right\}^{-1/2} \hat{j}_-^s |j, j\rangle \quad (6.87)$$

Para demostrar que la fórmula anterior es correcta es suficiente verificar que se cumple para  $m = j - (s+1)$ , siempre que se asuma que se cumple para  $m = j - s$ . En este caso se tendrá

$$|j, j-(s+1)\rangle = \hbar^{-1} \left\{ (j+j-s)(j-j+s+1) \right\}^{-1/2} \hat{j}_- |j, j-s\rangle,$$

---

<sup>4</sup>De aquí en adelante se asume que todos los vectores están normalizados, por eso dejamos que colocarles el subíndice  $N$

y si se tiene en cuenta que el término de la derecha se transforma en

$$\hbar^{-1} \left\{ (2j-s)(s+1) \right\}^{-1/2} \hat{j}_- \times \hbar^{-s} \left\{ (2j) \cdots (2j-s+1)(1) \cdots (s) \right\}^{-1/2} \hat{j}_-^s |j, j\rangle$$

entonces el resultado será

$$|j, j-(s+1)\rangle = \hbar^{-(s+1)} \left\{ (2j) \cdots (2j-s)(1) \cdots (s+1) \right\}^{-1/2} \hat{j}_-^{(s+1)} |j, j\rangle \quad (6.88)$$

En consecuencia, cualquier vector  $|j, j-s\rangle$  puede ser obtenido mediante la acción de  $\hat{j}_\pm$  y expresado como se indica en la fórmula (6.87). Tal fórmula puede ser expresada como

$$|j, j-s\rangle = \hbar^{-s} \left\{ (2j) \cdots (2j-s+1)(s!) \right\}^{-1/2} \left\{ \frac{(2j-s)!}{(2j-s)!} \right\}^{-1/2} \hat{j}_-^s |j, j\rangle,$$

es decir,

$$|j, j-s\rangle = \sqrt{\frac{(2j-s)!}{(2j)!s!}} \left( \frac{\hat{j}_-}{\hbar} \right)^s |j, j\rangle \quad (6.89)$$

Finalmente, si se tiene en cuenta que al cabo de  $s$  pasos se llega al estado  $|j, m\rangle$ , es decir se hace el siguiente cambio de variable  $j-s=m$ , la fórmula se hace más sencilla

$$|j, m\rangle = \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}} \left( \frac{\hat{j}_-}{\hbar} \right)^{j-m} |j, j\rangle \quad (6.90)$$

Es necesario indicar que de manera análoga se puede partir del vector  $|j, -j\rangle$  y emplear el operador  $\hat{j}_+$  durante  $j+m$  veces. En este caso la fórmula tiene la siguiente forma

$$|j, m\rangle = \sqrt{\frac{(j-m)!}{(2j)!(j+m)!}} \left( \frac{\hat{j}_+}{\hbar} \right)^{j+m} |j, -j\rangle \quad (6.91)$$

### 6.3. El momento orbital en el formalismo general.

En caso del momento orbital las ecuaciones para sus operadores tendrán la forma

$$\hat{\mathbf{l}}^2 |\ell m\rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1) |\ell m\rangle \quad (6.92)$$

$$\hat{l}_z |\ell m\rangle = \hbar m |\ell m\rangle$$

y, como los operadores  $\hat{\mathbf{l}}^2$  y  $\hat{l}_z$  se expresan a través de las variables  $\vartheta$  y  $\varphi$ , en la representación de coordenadas los correspondientes vectores propios deben ser funciones de las variables angulares

$$\hat{\mathbf{l}}^2 F_\ell^m(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) F_\ell^m(\vartheta, \varphi) \quad (6.93)$$

$$\hat{l}_z F_\ell^m(\vartheta, \varphi) = \hbar m F_\ell^m(\vartheta, \varphi)$$

La forma explícita de las funciones  $F_\ell^m$  se determina de manera estándar: Primero se encuentra  $F_\ell^{\pm\ell}$  y luego empleando los operadores  $\hat{l}_\pm$  las demás funciones. Para encontrar  $F_\ell^{\pm\ell}$ , además de la ecuación para  $\hat{l}_\pm$ , es necesario emplear la ecuación para  $\hat{l}_z$ . Ésto significa que es necesario resolver el sistema siguiente

$$\hat{l}_\pm F_\ell^{\pm\ell}(\vartheta, \varphi) = 0 \quad (6.94)$$

$$\hat{l}_z F_\ell^{\pm\ell}(\vartheta, \varphi) = \pm \hbar \ell F_\ell^{\pm\ell}(\vartheta, \varphi)$$

Expresando la función  $F_\ell^{\pm\ell}$  como un producto de dos funciones

$$F_\ell^{\pm\ell}(\vartheta, \varphi) = \Phi_{\pm\ell}(\varphi) \Theta_\ell(\vartheta) \quad (6.95)$$

la segunda ecuación se transforma en

$$-i \hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi_{\pm\ell}(\varphi) = \pm \hbar \ell \Phi_{\pm\ell}(\varphi) \quad (6.96)$$

y su solución es la función

$$\Phi_{\pm\ell}(\varphi) = e^{\pm i\ell\varphi} \quad (6.97)$$

donde, como se vio en la primera sección,  $\ell$  es entero.

La otra ecuación del sistema toma la forma

$$\left\{ \pm \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\} e^{\pm i\ell\varphi} \Theta_\ell(\vartheta) = 0 \quad (6.98)$$

$$\left\{ \pm \frac{d}{d\vartheta} \mp \ell \cot \vartheta \right\} \Theta_\ell(\vartheta) = 0$$

y se transforma en

$$\frac{d\Theta_\ell(\vartheta)}{\Theta_\ell(\vartheta)} = \ell \frac{d(\text{sen}\vartheta)}{\text{sen}\vartheta} \quad (6.99)$$

cuya solución es la función

$$\Theta_\ell(\vartheta) = \text{sen}^\ell \vartheta \quad (6.100)$$

En consecuencia,

$$F_\ell^{\pm\ell} = C_\ell^{\pm\ell} \text{sen}^\ell \vartheta e^{\pm i\ell\varphi} \quad (6.101)$$

donde  $C_\ell^{\pm\ell}$  debe ser definida de la condición de normalización

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |C_\ell^{\pm\ell}|^2 \text{sen}^{2\ell} \vartheta d\vartheta d\varphi = |C_\ell^{\pm\ell}|^2 2\pi \frac{2^{2\ell+1}(\ell!)^2}{(2\ell+1)!} = 1$$

De la ecuación anterior se obtiene

$$C_\ell^{\pm\ell} = \frac{1}{2^\ell \cdot \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}} \quad (6.102)$$

y la función  $F_\ell^{\pm\ell}$  adquiere la forma

$$F_\ell^{\pm\ell} = \frac{1}{2^\ell \cdot \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}} \text{sen}^\ell \vartheta e^{\pm i\ell\varphi} \quad (6.103)$$

Los demás vectores pueden ser calculados a partir de estos últimos empleando la regla estándar

$$|\ell, m\rangle = \sqrt{\frac{(\ell \mp m)!}{(2\ell)!(\ell \pm m)!}} \left(\frac{\hat{l}_\pm}{\hbar}\right)^{\ell \pm m} |\ell, \mp \ell\rangle \quad (6.104)$$

la cual, en la representación de coordenadas, se expresa como

$$F_\ell^{\pm\ell}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{2^\ell \cdot \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}} \sqrt{\frac{(\ell \mp m)!}{(\ell \pm m)!}} \left\{ e^{\pm i\varphi} \left[ \pm \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \right\}^{\ell \pm m} \text{sen}^\ell \vartheta e^{\pm i\ell\varphi} \quad (6.105)$$

donde la acción del operador de ascenso (descenso) sobre la función  $e^{im\varphi}\Theta(\vartheta)$  es equivalente a

$$\hat{l}_\pm^s e^{im\varphi}\Theta(\vartheta) = (\mp \hbar)^s e^{i(m\pm s)\varphi} \left\{ \text{sen}^{s\pm m}(\vartheta) \frac{d^s}{d(\cos \vartheta)^s} \text{sen}^{\mp m}(\vartheta) \right\} \Theta(\vartheta) \quad (6.106)$$

Verificar la relación anterior es algo complicado. Por eso, es conveniente mostrar que se cumple para algunos valores, por ejemplo, para  $s = 1$ . En efecto, en este caso se puede verificar que de la expresión que está en la derecha se puede llegar a la de la izquierda

$$\begin{aligned} &= -\hbar e^{i(m+1)\varphi} \left\{ \text{sen}^{1+m}\vartheta \frac{d}{d(\cos \vartheta)} \text{sen}^{-m}\vartheta \right\} \Theta(\vartheta) \\ &= -\hbar e^{i(m+1)\varphi} \text{sen}^{1+m}\vartheta \left\{ -m \text{sen}^{-m-1}\vartheta \frac{d(\text{sen}\vartheta)}{d(\cos \vartheta)} \Theta(\vartheta) + \text{sen}^{-m}\vartheta \frac{d\Theta}{d(\cos \vartheta)} \right\} \\ &= -\hbar e^{i(m+1)\varphi} \text{sen}^{1+m}\vartheta \left\{ m \text{sen}^{-m-1}\vartheta \frac{\cos \vartheta}{\text{sen}\vartheta} \Theta(\vartheta) - \frac{\text{sen}^{-m}\vartheta}{\text{sen}\vartheta} \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right\} \quad (6.107) \\ &= -\hbar e^{i(m+1)\varphi} \left\{ m \cot \vartheta \Theta(\vartheta) - \frac{d\Theta(\vartheta)}{d\vartheta} \right\} = \hbar e^{i\varphi} \left\{ \frac{\partial}{\partial \vartheta} - m \cot \vartheta \right\} \Theta(\vartheta) e^{im\varphi} \\ &= \hbar e^{i\varphi} \left\{ \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\} \Theta(\vartheta) e^{im\varphi} = \hat{l}_\pm \Theta(\vartheta) e^{im\varphi} \end{aligned}$$

En consecuencia, un vector cualquiera  $|\ell, m\rangle$ , que en coordenadas esféricas se representa

como  $Y_\ell^m(\vartheta, \phi)$ , se expresa con ayuda de la siguiente fórmula

$$\begin{aligned} Y_\ell^m(\vartheta, \phi) &= \sqrt{\frac{(\ell - m)!}{(2\ell)!(\ell + m)!}} e^{i(\ell+m-\ell)\varphi} \left\{ \text{sen}^{\ell+m-\ell}\vartheta \frac{d^{\ell+m}}{d(\cos \vartheta)^{\ell+m}} \text{sen}^\ell\vartheta \right\} C_\ell^{-\ell} \text{sen}^\ell\vartheta \\ &= (-1)^m C_\ell^{-\ell} \sqrt{\frac{(\ell - m)!}{(2\ell)!(\ell + m)!}} e^{im\varphi} \text{sen}^m\vartheta \frac{d^{\ell+m}}{d(\cos \vartheta)^{\ell+m}} \text{sen}^{2\ell}\vartheta \end{aligned} \quad (6.108)$$

Después de reemplazar  $C_\ell^{-\ell}$  por su valor, se obtiene

$$\begin{aligned} Y_\ell^m(\vartheta, \phi) &= \sqrt{\frac{(2\ell + 1)!}{4\pi}} \sqrt{\frac{(\ell - m)!}{(2\ell)!(\ell + m)!}} \frac{1}{2^\ell \cdot \ell!} \text{sen}^m\vartheta \frac{d^{\ell+m}}{d(\cos \vartheta)^{\ell+m}} \text{sen}^{2\ell}\vartheta e^{im\varphi} \\ &= \sqrt{\frac{(2\ell + 1)!}{4\pi}} \sqrt{\frac{(\ell - m)!}{(2\ell)!(\ell + m)!}} P_\ell^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \end{aligned} \quad (6.109)$$

donde

$$P_\ell^m(\cos \vartheta) = \frac{1}{2^\ell \cdot \ell!} \text{sen}^m\vartheta \frac{d^{\ell+m}}{d(\cos \vartheta)^{\ell+m}} \text{sen}^{2\ell}\vartheta \quad (6.110)$$

son los *polinomios asociados de Legendre*.

## 6.4. Spin

El spin fue introducido en la Mecánica Cuántica por Wolfgang Pauli, y fundamentado por Ulenbeck y otros, para explicar algunas discrepancias de los datos experimentales relacionados con algunos fenómenos con la teoría de la época. Entre los más importantes se puede mencionar los siguientes:

1. Los experimentos de Stern y Herlach sobre cuantización espacial como resultado de los cuales se observó que los haces de átomos de hidrógeno en el estado  $s$ , es decir, con momento orbital igual a cero, se dividen en dos al pasar por un campo magnético no homogéneo  $\mathbf{B}$ .

Ésto indica claramente que, aunque el momento orbital de los átomos es cero, en los haces hay un momento magnético tal que su proyección sobre la dirección del campo tiene sólo dos valores.

2. Los espectros de los átomos, incluso de los que tienen un sólo electrón óptico, son más complicados que lo que establece la teoría. Por ejemplo, en la transición  $2p \rightarrow 1s$  del sodio

aparecen dos líneas cercanas con longitudes de onda de 5895,93Å y 5889,95Å.

De acuerdo con la teoría de Schrödinger el nivel  $2p$  ( $n = 2$ ,  $\ell = 1$ ) debe tener tres subniveles ( $m = 0, \pm 1$ ) los cuales resultan degenerados en ausencia de campos externos y se separan sólo en presencia de éstos.

En cambio, la presencia del doblete en el espectro del sodio, incluso en ausencia de campos exteriores, hace necesario considerar que el nivel  $2p$ , como todos los demás con  $\ell \neq 0$ , consta de dos niveles cercanos. Este fenómeno se denomina **estructura fina**.

Éstos y otros fenómenos resultan fácilmente explicados si se asume que el electrón, incluso cuando su momento orbital es igual a cero, tiene un momento magnético propio igual a un magnetón de Bohr  $\mu_B$  y sólo dos proyecciones sobre la dirección de  $\mathbf{B}$

$$\mu_z = \pm \frac{e\hbar}{2\mu c} = \pm \mu_B \quad (6.111)$$

Así, la cuantización espacial se produce porque en el campo magnético los haces experimentan fuerzas distintas, las que se expresan mediante la fórmula

$$\mathbf{F} = (\boldsymbol{\mu} \cdot \nabla) \mathbf{B} \quad (6.112)$$

Por su parte, la estructura fina se explica por la interacción del momento magnético propio del electrón con las corrientes internas creadas por su movimiento, debido a lo cual los niveles con diferente valor del momento cinético resultan con diferente energía. En efecto, considerando que las corrientes internas resultan proporcionales al momento orbital, se llega a la conclusión que la energía de interacción

$$W \propto (\mathbf{l} \cdot \boldsymbol{\mu}) \quad (6.113)$$

Este momento magnético propio  $\boldsymbol{\mu}$  está relacionado con la presencia de un momento cinético propio  $\mathbf{s}$  que tiene sólo dos proyecciones sobre cualquier dirección. En consecuencia

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = -\frac{e}{\mu c} \hat{\mathbf{s}} \quad \text{y} \quad \hat{\mu}_z = -\frac{e}{\mu c} \hat{s}_z \quad (6.114)$$

En la actualidad, el spin se entiende como una propiedad de las partículas elementales como el electrón, protón, fotón y otras y puede ser tanto entero, como semientero. Las partículas con espin semientero son descritas por la ecuación de Dirac.

En particular, para el electrón, protón y neutrón los valores propios del spin y su proyección,  $s$  y  $m_s$ , respectivamente, toman los valores:  $s = 1/2$  y  $m_s = \pm 1/2$ . En consecuencia, el conjunto de sus vectores propios está conformado por dos elementos

$$|1/2, 1/2\rangle \equiv |1/2\rangle \quad \text{y} \quad |1/2, -1/2\rangle \equiv |-1/2\rangle \quad (6.115)$$

tales que

$$\hat{\mathbf{s}}^2 |\pm 1/2\rangle = \hbar^2 s(s+1) |\pm 1/2\rangle = 3/4 \hbar^2 |\pm 1/2\rangle \quad (6.116)$$

$$\hat{s}_z |\pm 1/2\rangle = \hbar m_s |\pm 1/2\rangle = \pm \hbar/2 |\pm 1/2\rangle$$

Por su parte, las matrices de los operadores que actúan sobre los vectores del correspondiente espacio tienen que ser matrices  $2 \times 2$ . Su fórmula general es la siguiente

$$\langle m_s | \hat{O} | m'_s \rangle = \begin{pmatrix} \langle 1/2 | \hat{O} | 1/2 \rangle & \langle 1/2 | \hat{O} | -1/2 \rangle \\ \langle -1/2 | \hat{O} | 1/2 \rangle & \langle -1/2 | \hat{O} | -1/2 \rangle \end{pmatrix} \quad (6.117)$$

Para determinar la representación concreta de los operadores también es necesario tener presente que:

$$\begin{aligned} \hat{s}_+ | -1/2 \rangle &= \hbar \sqrt{[1/2 - (-1/2)][1/2 + (-1/2) + 1]} | -1/2 \rangle = \hbar | 1/2 \rangle \\ \hat{s}_- | -1/2 \rangle &= \hbar \sqrt{[1/2 + (-1/2)][1/2 - (-1/2) + 1]} | -1/2 \rangle = 0 | -1/2 \rangle = 0 \\ \hat{s}_- | 1/2 \rangle &= \hbar \sqrt{[1/2 + 1/2][1/2 - 1/2 + 1]} | 1/2 \rangle = \hbar | 1/2 \rangle \\ \hat{s}_+ | 1/2 \rangle &= \hbar \sqrt{[1/2 - (1/2)][1/2 + (1/2) + 1]} | 1/2 \rangle = 0 | 1/2 \rangle = 0 \end{aligned} \quad (6.118)$$

Por eso, las matrices de  $s_{\pm}$  tienen la forma

$$s_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad s_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.119)$$

y las de los operadores  $s_i$

$$s_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad s_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.120)$$

Los operadores del spin se expresan a través de las *matrices de Pauli*  $\sigma_i$ , cuyas formas explícitas son

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.121)$$

y tienen las siguientes propiedades

$$\begin{aligned} \sigma_i \sigma_j &= -\sigma_j \sigma_i \\ \text{Det } \sigma_i &= -1 \\ \text{Tr } \sigma_i &= 0 \\ \sigma_i^2 &= 1 \end{aligned} \quad (6.122)$$

Para dos vectores arbitrarios las matrices de Pauli satisfacen la siguiente relación

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i \boldsymbol{\sigma} (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \quad (6.123)$$

## 6.5. Adición de momentos cinéticos.

El operador del momento total de un sistema es la suma vectorial de los operadores de los momentos que tiene, operación que es asociativa, es decir, puede ser ejecutada por partes. Por eso, es suficiente analizar el acoplamiento de dos momentos, ya que en caso de que haya un número mayor el acoplamiento puede hacerse de dos en dos hasta lograr acoplar todos los momentos.

En consecuencia, si se tiene dos momentos  $\hat{\mathbf{J}}_a$  y  $\hat{\mathbf{J}}_b$ , el momento total  $\hat{\mathbf{J}}$  es un operador cuyos componentes se definen como la suma de los respectivos componentes de los sumandos. Es decir

$$\hat{J}_i = \hat{j}_{a_i} + \hat{j}_{b_i} \quad (6.124)$$

Se puede demostrar que los componentes del momento total satisfacen las mismas relaciones de conmutación. En efecto, para dos de sus componentes, cualesquiera que sean, se tiene<sup>5</sup>

$$\begin{aligned} [\hat{J}_i, \hat{J}_k] &= [(\hat{j}_{a_i} + \hat{j}_{b_i}), (\hat{j}_{a_k} + \hat{j}_{b_k})] \\ &= [\hat{j}_{a_i}, \hat{j}_{a_k}] + [\hat{j}_{a_i}, \hat{j}_{b_k}] + [\hat{j}_{b_i}, \hat{j}_{a_k}] + [\hat{j}_{b_i}, \hat{j}_{b_k}] \end{aligned} \quad (6.125)$$

de tal modo que al reemplazar los conmutadores de los momentos de cada partícula resulta

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_k] = i \hbar \varepsilon_{ikl} \hat{j}_{a_l} + i \hbar \varepsilon_{ikl} \hat{j}_{b_l} = i \hbar \varepsilon_{ikl} \{\hat{j}_{a_l} + \hat{j}_{b_l}\}$$

de donde

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_k] = i \hbar \varepsilon_{ikl} \hat{J}_l \quad (6.126)$$

El cuadrado del momento también resulta conmutante con una de sus proyecciones. Eso se puede verificar al calcular el conmutador

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_i] = \left[ \sum_k \hat{J}_k^2, \hat{J}_i \right] = \sum_k [\hat{J}_k^2, \hat{J}_i] = \sum_k \left\{ \hat{J}_k [\hat{J}_k, \hat{J}_i] + [\hat{J}_k, \hat{J}_i] \hat{J}_k \right\}$$

Al reemplazar los conmutadores de los componentes del momento total se tendrá

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_i] = \sum_k \left\{ \hat{J}_k (i \hbar \varepsilon_{kil} \hat{J}_l) + (i \hbar \varepsilon_{kil} \hat{J}_l) \hat{J}_k \right\} = \sum_k i \hbar \{ \varepsilon_{kil} \hat{J}_l \hat{J}_k + \varepsilon_{lik} \hat{J}_k \hat{J}_l \},$$

es decir,

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_i] = \sum_k i \hbar \{ \varepsilon_{kil} - \varepsilon_{kil} \} \hat{J}_k \hat{J}_l.$$

En consecuencia,

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_i] = 0 \quad (6.127)$$

Podría esperarse que los vectores propios de  $\hat{\mathbf{J}}^2$  y  $\hat{J}_z$ , que denotaremos como  $|JM\rangle$ , resulten expresados como el producto de los vectores propios de los componentes, es decir que

$$|JM\rangle \propto |j_a m_a\rangle |j_b m_b\rangle$$

<sup>5</sup>Se asume que las componentes de momentos diferentes conmutan. Es decir,  $[\hat{j}_{b_i}, \hat{j}_{a_k}] = 0$



Sin embargo vectores de este tipo sólo son vectores propios de la proyección del momento total  $\hat{J}_z$ , pero no del operador  $\hat{\mathbf{J}}^2$ .

En efecto, si se aplica el operador  $\hat{J}_z$  sobre el producto  $|j_a, m_a\rangle|j_b, m_b\rangle$  se tendrá<sup>6</sup>  
 $\hat{J}_z |j_a, m_a\rangle|j_b, m_b\rangle = \{\hat{j}_{a_z} + \hat{j}_{b_z}\} |j_a, m_a\rangle|j_b, m_b\rangle = \hat{j}_{a_z} |j_a, m_a\rangle|j_b, m_b\rangle + \hat{j}_{b_z} |j_a, m_a\rangle|j_b, m_b\rangle$   
 de modo que

$$\hat{J}_z |j_a, m_a\rangle|j_b, m_b\rangle = \hbar m_a |j_a, m_a\rangle|j_b, m_b\rangle + \hbar m_b |j_a, m_a\rangle|j_b, m_b\rangle,$$

es decir,

$$\hat{J}_z |j_a, m_a\rangle|j_b, m_b\rangle = \hbar \{m_a + m_b\} |j_a, m_a\rangle|j_b, m_b\rangle \quad (6.128)$$

lo que significa que, efectivamente,  $|j_a, m_a\rangle|j_b, m_b\rangle$  es vector propio de  $\hat{J}_z$ .

En cambio, como el operador  $\hat{\mathbf{J}}^2$  es igual a

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}^2 &= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 = (\hat{j}_{a_x} + \hat{j}_{b_x})^2 + (\hat{j}_{a_y} + \hat{j}_{b_y})^2 + (\hat{j}_{a_z} + \hat{j}_{b_z})^2 \\ &= \hat{j}_{a_x}^2 + \hat{j}_{a_y}^2 + \hat{j}_{a_z}^2 + \hat{j}_{b_x}^2 + \hat{j}_{b_y}^2 + \hat{j}_{b_z}^2 + 2\hat{j}_{a_x}\hat{j}_{b_x} + 2\hat{j}_{a_y}\hat{j}_{b_y} + 2\hat{j}_{a_z}\hat{j}_{b_z} \\ &= \hat{\mathbf{j}}_a^2 + \hat{\mathbf{j}}_b^2 + 2\hat{j}_{a_z}\hat{j}_{b_z} + \hat{j}_{a+}\hat{j}_{b-} + \hat{j}_{a-}\hat{j}_{b+}, \end{aligned} \quad (6.129)$$

o sea, contiene operadores de ascenso y descenso de los momentos componentes, los productos  $|j_a, m_a\rangle|j_b, m_b\rangle$  no pueden ser sus vectores propios, ya que cuando ese operador actúa sobre éstos, los operadores de ascenso (descenso) van a cambiar los estados individuales con lo que, como resultado, se obtiene una combinación lineal de estados individuales con diferentes valores de  $m_a$  y  $m_b$ .

Sin embargo, como  $\hat{\mathbf{J}}^2$  conmuta con  $\hat{J}_z$ , ambos deben tener un conjunto de vectores propios comunes. Éstos pueden ser postulados como combinaciones lineales de  $|j_a, m_a\rangle|j_b, m_b\rangle$ , es decir, como

$$|J, M\rangle = \sum_{m_a, m_b} |j_a, m_a\rangle|j_b, m_b\rangle C(j_a, j_b, J/m_a, m_b, M) \quad (6.130)$$

donde

$$C(j_a, j_b, J/m_a, m_b, M) = \langle j_a, m_a | \langle j_b, m_b | J, M \rangle \quad (6.131)$$

y se denominan *coeficientes de Clebsh-Gordan*.

Los coeficientes de Clebsh-Gordan se definen a partir de las ecuaciones para los valores propios del momento total. Así, la acción del operador  $\hat{J}_z$  sobre  $|J, M\rangle$

$$\hat{J}_z |J, M\rangle = \sum_{m_a, m_b} \hat{J}_z |j_a, m_a\rangle|j_b, m_b\rangle C(j_a, j_b, J/m_a, m_b, M)$$

---

<sup>6</sup>Los operadores de los momentos componentes actúan sólo sobre sus vectores propios.

resulta expresada como

$$\sum_{m_a, m_b} \left\{ \hat{j}_{a_z} |j_a, m_a\rangle |j_b, m_b\rangle + \hat{j}_{b_z} |j_a, m_a\rangle |j_b, m_b\rangle \right\} C(j_a, j_b, J/m_a, m_b, M)$$

Si se tiene en cuenta cuál es la acción de cada operador  $\hat{j}_z$  sobre su respectivo vector se tendrá

$$\sum_{m_a, m_b} \left\{ \hbar m_a |j_a, m_a\rangle |j_b, m_b\rangle + \hbar m_b |j_a, m_a\rangle |j_b, m_b\rangle \right\} C(j_a, j_b, J/m_a, m_b, M)$$

de tal modo que al agrupar los factores dentro de la suma, lo anterior resulta expresado como

$$\sum_{m_a, m_b} \hbar \{m_a + m_b\} |j_a, m_a\rangle |j_b, m_b\rangle C(j_a, j_b, J/m_a, m_b, M)$$

y no puede ser igual al vector inicial, salvo en caso de que  $m_a + m_b = M^7$ , donde  $M$  debe tener un valor fijo. En este caso, puede ser sacado de la sumatoria obteniéndose

$$\hat{J}_z |J, M\rangle = \hbar M |J, M\rangle$$

Si se tiene en cuenta la restricción que acaba de ser obtenida, la acción del operador  $\hat{J}^2$  se entenderá como

$$\hat{J}^2 |J, M\rangle = \sum_{m_a, m_b}^{m_a + m_b = M} \hat{J}^2 |j_a, m_a\rangle |j_b, m_b\rangle C(j_a, j_b, J/m_a, m_b, M) \quad (6.132)$$

y si se le multiplica por  $\langle j_a, m_a | \langle j_b, m_b |$ , desde la izquierda, se obtendrá

$$\langle j_a, m'_a | \langle j_b, m'_b | \hat{J}^2 |J, M\rangle = \sum_{m_a, m_b} \langle j_a, m'_a | \langle j_b, m'_b | \hat{J}^2 |j_a, m_a\rangle |j_b, m_b\rangle C(j_a, j_b, J/m_a, m_b, M)$$

Al reemplazar  $\hat{J}^2$  a través de los operadores sumandos, el término de la derecha se transforma en

$$\sum_{m_a, m_b} \langle j_a, m'_a | \langle j_b, m'_b | \left\{ \hat{j}_a^2 + \hat{j}_b^2 + 2\hat{j}_{a_z}\hat{j}_{b_z} + \hat{j}_{a_+}\hat{j}_{b_-} + \hat{j}_{a_-}\hat{j}_{b_+} \right\} |j_a, m_a\rangle |j_b, m_b\rangle C(j_a, j_b, J/m_a, m_b, M)$$

mientras que el término de la izquierda puede ser transformado, si, en primer lugar, el operador  $\hat{J}^2$  es reemplazado por sus valores propios  $\hbar^2 J(J+1)$ , y luego el vector  $|J, M\rangle$  a través de su fórmula. Después de estas operaciones se obtendrá

$$\sum_{m_a, m_b} \langle j_a, m'_a | \langle j_b, m'_b | \hbar^2 J(J+1) |j_a, m_a\rangle |j_b, m_b\rangle C(j_a, j_b, J/m_a, m_b, M)$$

---

<sup>7</sup>Lo que significa que, para que sea vector propio de  $\hat{J}_z$ , las sumas se ejecutan sólo sobre aquellos valores de  $m_a$  y  $m_b$  que satisfacen la relación

Si se tiene en cuenta que la acción combinada de  $\hat{j}_{a\pm}$  y  $\hat{j}_{b\mp}$  sobre  $|j_a, m_a\rangle|j_b, m_b\rangle$  es la siguiente

$$\hat{j}_{a\pm}\hat{j}_{b\mp}|j_a, m_a\rangle|j_b, m_b\rangle = \hbar^2\sqrt{(j_a \mp m_a)(j_a \pm m_a + 1)(j_b \pm m_b)(j_b \mp m_b + 1)}|j_a, m_a \pm 1\rangle|j_b, m_b \mp 1\rangle$$

y, además, que

$$\langle j_a, m'_a|\langle j_b, m'_b|j_a, m_a\rangle|j_b, m_b\rangle = \langle j_a, m'_a|j_a, m_a\rangle\langle j_b, m'_b|j_b, m_b\rangle = \delta_{m'_a, m_a} \delta_{m'_b, m_b}$$

la ecuación para los valores propios de  $\hat{\mathbf{J}}^2$  se puede expresar como

$$\begin{aligned} & \left\{ j_a(j_a + 1) + j_b(j_b + 1) + 2m_a m_b - J(J + 1) \right\} C(j_a, j_b, J/m_a, m_b, M) + \\ & \sqrt{(j_a - m_a)(j_a + m_a + 1)(j_b + m_b)(j_b - m_b + 1)} C(j_a, j_b, J/m_a + 1, m_b - 1, M) \\ & \sqrt{(j_b - m_b)(j_b + m_b + 1)(j_a + m_a)(j_a - m_a + 1)} C(j_a, j_b, J/m_a - 1, m_b + 1, M) = 0 \end{aligned} \quad (6.133)$$

que es un sistema de  $N$  ecuaciones para los coeficientes de Clebsh-Gordan, cuyo número es igual

$$N = \min\{(2j_a + 1), (2j_b + 1)\}$$

Los valores propios que puede adoptar el momento total  $J$  resultan dependientes de los de los momentos componentes  $j_a$  y  $j_b$ . En efecto, las ecuaciones que acaban de ser obtenidas constituyen un sistema homogéneo y tienen soluciones no triviales sólo si el determinante conformado por sus coeficientes es igual a cero. Al calcular el determinante para los valores de  $J$  se obtiene la relación

$$|j_a - j_b| \leq J \leq j_a + j_b \quad (6.134)$$

Por otro lado, de la relación  $M = m_a + m_b$  se deduce que para el estado en el cual los vectores componentes sean paralelos y sus correspondientes proyecciones sean máximas se tendrá

$$J_{max} = m_{amax} + m_{bmax} = j_a + j_b \quad (6.135)$$

en cambio para el estado con vectores antiparalelos y valores máximos de sus proyecciones el resultado será

$$J_{min} = |m_{amax} - m_{bmax}| = |j_a - j_b| \quad (6.136)$$

También son posibles una serie de situaciones intermedias (en las cuales los vectores no son paralelos ni antiparalelos). Cada una de las ellas se diferenciará de la anterior en que el valor de  $J$  irá disminuyendo en una unidad hasta alcanzar su valor mínimo.

Como en todo operador de momento angular, las relaciones entre los valores del momento total ( $J$ ) y su proyección ( $M$ ) son las mismas que para los momentos sumandos, es decir

$$-J \leq M \leq J \quad (6.137)$$

### 6.5.1. Acoplamiento de un momento orbital con un spin 1/2

Si  $j_a$  es el momento orbital  $\ell$  y  $j_b$ , el spin  $s = 1/2$  el número de ecuaciones para los coeficientes de Clebsh-Gordan estará determinado por el valor del spin que es el menor<sup>8</sup> y será igual a dos.

La primera ecuación se obtiene cuando  $m_b = 1/2$  ( $m_a = M - 1/2$ ) y es la siguiente:

$$\begin{aligned} & \{\ell(\ell + 1) + 1/2(1/2 + 1) + 2(M - 1/2)(1/2) - J(J + 1)\} C(\ell, 1/2, J/M - 1/2, 1/2, M) + \\ & \sqrt{(\ell - M + 1/2)(\ell + M + 1/2)(1/2 + 1/2)(1/2 - 1/2 + 1)} C(\ell, 1/2, J/M + 1/2, -1/2, M) + \\ & \sqrt{(1/2 - 1/2)(1/2 + 1/2 + 1)(\ell + M - 1/2)(\ell - M + 3/2)} C(\ell, 1/2, J/M - 3/2, 3/2, M) = 0 \end{aligned}$$

y la segunda, cuando  $m_b = -1/2$  ( $m_a = M + 1/2$ ) y resulta igual a

$$\begin{aligned} & \{\ell(\ell + 1) + 1/2(1/2 + 1) + 2(M + 1/2)(-1/2) - J(J + 1)\} C(\ell, 1/2, J/M + 1/2, -1/2, M) + \\ & \sqrt{(\ell - M - 1/2)(\ell + M + 3/2)(1/2 - 1/2)(1/2 + 1/2 + 1)} C(\ell, 1/2, J/M + 3/2, -3/2, M) + \\ & \sqrt{(1/2 + 1/2)(1/2 - 1/2 + 1)(\ell + M + 1/2)(\ell - M + 1/2)} C(\ell, 1/2, J/M - 1/2, +1/2, M) = 0 \end{aligned}$$

Hay dos coeficientes que no corresponden a la situación física  $C(\ell, 1/2, J/M + 3/2, -3/2, M)$  y  $C(\ell, 1/2, J/M - 3/2, 3/2, M)$  ya que la máxima (mínima) proyección del spin es  $1/2(-1/2)$ . Sin embargo, ambos desaparecen porque están multiplicados por factores iguales a cero.

En consecuencia, el sistema de dos ecuaciones tiene sólo dos incógnitas que son los coeficientes  $C(\ell, 1/2, J/M - 1/2, +1/2, M)$  y  $C(\ell, 1/2, J/M + 1/2, -1/2, M)$  a los que denotaremos como  $C^\uparrow$  y  $C^\downarrow$ , respectivamente. En forma matricial, el mencionado sistema es el siguiente:

$$\begin{pmatrix} \ell(\ell + 1) + 1/4 + M - J(J + 1) & \sqrt{(\ell + M + 1/2)(\ell - M + 1/2)} \\ \sqrt{(\ell - M + 1/2)(\ell + M + 1/2)} & \ell(\ell + 1) + 1/4 - M - J(J + 1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C^\uparrow \\ C^\downarrow \end{pmatrix} = 0 \quad (6.138)$$

Para que un sistema homogéneo de ecuaciones lineales tenga soluciones no triviales es necesario que el determinante conformado por los coeficientes (que en este caso dependen de los diferentes números cuánticos) sea igual a cero, es decir

$$\left\{ \ell(\ell + 1) + 1/4 + M - J(J + 1) \right\} \left\{ \ell(\ell + 1) + 1/4 - M - J(J + 1) \right\} - (\ell + M + 1/2)(\ell - M + 1/2) = 0$$

<sup>8</sup>Salvo para  $\ell = 0$ , que es un caso trivial por cuanto en esta situación el momento total  $J = 1/2$

lo cual se puede expresar como

$$\left\{ \ell(\ell + 1) + 1/4 - J(J + 1) \right\}^2 - M^2 - \left\{ \ell + 1/2 \right\}^2 + M^2 = 0$$

de donde se obtiene que

$$\ell(\ell + 1) + 1/4 - J(J + 1) = \pm(\ell + 1/2)$$

en consecuencia

$$J(J + 1) = \ell^2 + \ell + 1/4 \mp \ell \mp 1/2 = (\ell \mp 1/2)(\ell \mp 1/2 + 1)$$

es decir

$$J = \ell \mp 1/2$$

El resultado obtenido refleja el hecho de que el momento orbital y el spin sólo pueden ser paralelos o antiparalelos, porque al combinarse, de acuerdo con la regla general, el valor del momento total variará desde  $\ell + 1/2$  hasta  $\ell - 1/2$ .

Cuando  $J = \ell + 1/2$  el sistema de ecuaciones resulta igual a

$$\left\{ (\ell + 1/2)^2 + M - (\ell + 1/2)^2 - (\ell + 1/2) \right\} C^\uparrow + \sqrt{(\ell + M + 1/2)(\ell - M + 1/2)} C^\downarrow = 0$$

$$\sqrt{(\ell + M + 1/2)(\ell - M + 1/2)} C^\uparrow + \left\{ (\ell + 1/2)^2 + M - (\ell + 1/2)^2 - (\ell + 1/2) \right\} C^\downarrow = 0$$

es decir se reduce a una sola ecuación, la cual tiene la forma

$$\sqrt{(\ell - M + 1/2)} C^\uparrow + \sqrt{(\ell + M + 1/2)} C^\downarrow = 0$$

de donde se obtiene la relación

$$C^\uparrow = \sqrt{\frac{\ell + M + 1/2}{\ell - M + 1/2}} C^\downarrow$$

Para determinar los valores concretos de cada uno de los coeficientes se tiene que recurrir a la condición de normalización del vector  $|J, M\rangle$ . Como ahora, éste se expresa así

$$|J, M\rangle = C^\uparrow |\ell, M - 1/2\rangle |1/2, 1/2\rangle + C^\downarrow |\ell, M + 1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle$$

entonces de la condición de normalización se obtiene que

$$C^{\uparrow 2} + C^{\downarrow 2} = \frac{\ell + M + 1/2}{\ell - M + 1/2} C^{\downarrow 2} + C^{\downarrow 2} = \frac{2\ell + 1}{\ell - M + 1/2} C^{\downarrow 2} = 1$$

es decir

$$C^\downarrow = \sqrt{\frac{\ell - M + 1/2}{2\ell + 1}} \quad \text{y} \quad C^\uparrow = \sqrt{\frac{\ell + M + 1/2}{2\ell + 1}}$$

Cuando  $J = \ell - 1/2$  las ecuaciones para los coeficientes de Clebsh-Gordan resultan expresadas como

$$\left\{ \ell(\ell + 1) + 1/4 + M - (\ell - 1/2)(\ell - 1/2 + 1) \right\} C^\uparrow + \sqrt{(\ell + M + 1/2)(\ell - M + 1/2)} C^\downarrow = 0$$

$$\sqrt{(\ell - M + 1/2)(\ell + M + 1/2)} C^\uparrow + \left\{ \ell(\ell + 1) + 1/4 - M - (\ell - 1/2)(\ell - 1/2 + 1) \right\} C^\downarrow = 0$$

es decir ambas se reducen a la siguiente relación

$$\{\ell + M + 1/2\} C^\uparrow + \sqrt{(\ell + M + 1/2)(\ell - M + 1/2)} C^\downarrow = 0$$

que es lo mismo que

$$\sqrt{\ell + M + 1/2} C^\uparrow + \sqrt{\ell - M + 1/2} C^\downarrow = 0$$

de donde se obtiene

$$C^\uparrow = -\sqrt{\frac{\ell - M + 1/2}{\ell + M + 1/2}} C^\downarrow$$

Después de emplear la condición de normalización se obtiene

$$C^\downarrow = \sqrt{\frac{\ell + M + 1/2}{2\ell + 1}} \quad \text{y} \quad C^\uparrow = -\sqrt{\frac{\ell - M + 1/2}{2\ell + 1}}$$

### 6.5.2. Reglas de recurrencia para los coeficientes de Clebsh-Gordan.

Los Coeficientes de Clebsh-Gordan tienen muchas propiedades que permiten calcularlos para todos los casos posibles. En este acápite se va a analizar una relación de recurrencia muy útil para calcular algunos de tales coeficientes.

Si a la ecuación (9.24) se le aplica los operadores de ascenso (descenso)  $\hat{J}_\pm$  se tendrá

$$\hat{J}_\pm |J, M\rangle = \sum_{m_a, m_b} C_{j_a, m_a, j_b, m_b}^{JM} \hat{J}_\pm |j_a, m_a\rangle |j_b, m_b\rangle$$

de donde, si se tiene en cuenta que  $\hat{J}_\pm = \hat{j}_{a\pm} + \hat{j}_{b\pm}$ , se obtiene

$$\hat{J}_\pm |J, M\rangle = \sum_{m_a, m_b} C_{j_a, m_a, j_b, m_b}^{JM} \hat{j}_{a\pm} |j_a, m_a\rangle |j_b, m_b\rangle + \sum_{m_a, m_b} C_{j_a, m_a, j_b, m_b}^{JM} \hat{j}_{b\pm} |j_a, m_a\rangle |j_b, m_b\rangle$$

Al ejecutar, en ambos lados de la ecuación precedente, las operaciones de los operadores de ascenso (descenso) resulta

$$\sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} |J, M \pm 1\rangle =$$

$$\sum_{m_a, m_b} \sqrt{(j_a \mp m_a)(j_a \pm m_a + 1)} C_{j_a, m_a, j_b, m_b}^{JM} |j_a, m_a \pm 1\rangle |j_b, m_b\rangle +$$

$$\sum_{m_a, m_b} \sqrt{(j_b \mp m_b)(j_b \pm m_b + 1)} C_{j_a, m_a, j_b, m_b}^{JM} |j_a, m_a\rangle |j_b, m_b \pm 1\rangle$$

y al multiplicar por  $\langle j_a, j_b, m'_a, m'_b |$  se tendrá

$$\begin{aligned} & \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} \langle j_a, j_b, m'_a, m'_b | J, M \pm 1 \rangle = \\ & \sum_{m_a, m_b} \sqrt{(j_a \mp m_a)(j_a \pm m_a + 1)} C_{j_a, m_a, j_b, m_b}^{JM} \langle j_a, m'_a | j_a, m_a \pm 1 \rangle \langle j_b, m'_b | j_b, m_b \rangle + \\ & \sum_{m_a, m_b} \sqrt{(j_b \mp m_b)(j_b \pm m_b + 1)} C_{j_a, m_a, j_b, m_b}^{JM} \langle j_a, m'_a | j_a, m_a \rangle \langle j_b, m'_b | j_b, m_b \pm 1 \rangle \end{aligned}$$

Si se tiene en cuenta la ortonormalidad de los vectores de los momentos componentes

$$\begin{aligned} & \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} C_{j_a, m'_a, j_b, m'_b}^{J, M \pm 1} = \\ & \sum_{m_a, m_b} \sqrt{(j_a \mp m_a)(j_a \pm m_a + 1)} \delta_{m'_1, m_a \pm 1} \delta_{m'_2, m_b} C_{j_a, m_a, j_b, m_b}^{JM} + \\ & \sum_{m_a, m_b} \sqrt{(j_b \mp m_b)(j_b \pm m_b + 1)} \delta_{m'_1, m_a} \delta_{m'_2, m_b \pm 1} C_{j_a, m_a, j_b, m_b}^{JM} \end{aligned}$$

y al ejecutar las sumas indicadas

$$\begin{aligned} & \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} C_{j_a, m'_a, j_b, m'_b}^{J, M \pm 1} = \\ & \sqrt{(j_a \mp (m'_a \mp 1))(j_a \pm (m'_a \mp 1) + 1)} C_{j_a, m'_a \mp 1, j_b, m'_b}^{JM} + \\ & \sqrt{(j_b \mp (m'_b \mp 1))(j_b \pm (m'_b \mp 1) + 1)} C_{j_a, m'_a, j_b, m'_b \mp 1}^{JM} \end{aligned}$$

de donde se obtiene

$$\begin{aligned} & \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} C_{j_a, m_a, j_b, m_b}^{J, M \pm 1} = \\ & \sqrt{(j_a \pm m_a)(j_a \mp m_a + 1)} C_{j_a, m_a \mp 1, j_b, m_b}^{JM} + \\ & \sqrt{(j_b \pm m_b)(j_b \mp m_b + 1)} C_{j_a, m_a, j_b, m_b \mp 1}^{JM} \end{aligned} \tag{6.139}$$

En particular, si  $M = J$ ,  $m_a = j_a$  y  $m_b = J - j_a - 1$  y tomamos el signo de abajo se tendrá

$$\sqrt{2J} C_{j_a, j_a, j_b, J - j_a - 1}^{JJ-1} = \sqrt{(j_b - J + m_a + 1)(j_b + J - j_a)} C_{j_a, j_a, j_b, J - j_a}^{JJ} \tag{6.140}$$

Si  $j_a = 1$ ,  $j_b = 1/2$  y  $J = 3/2$ , entonces al aplicar la relación precedente se tendrá

$$\sqrt{2(3/2)} C_{1,1,1/2,-1/2}^{3/2,1/2} = \sqrt{(1/2 - 3/2 + 1 + 1)(1/2 + 3/2 - 1)} C_{1,1,1/2,1/2}^{3/2,3/2}$$

de donde

$$C_{1,1,1/2,-1/2}^{3/2,1/2} = \frac{1}{\sqrt{3}} C_{1,1,1/2,1/2}^{3/2,3/2} = \frac{1}{\sqrt{3}} \tag{6.141}$$

# Capítulo 7

## Movimiento en campos centrales.

### 7.1. Propiedades generales del problema.

Si un cuerpo está sometido a un campo de fuerzas del tipo

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = F(r) \frac{\mathbf{x}}{r}$$

el movimiento va a tener simetría esférica ya que la energía potencial va depender sólo del módulo de la posición, es decir de  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ . En efecto, de

$$dV = -\mathbf{F}(\mathbf{x}) \cdot d\mathbf{x} = -F(r) \frac{xdx + ydy + zdz}{r}$$

se obtiene que

$$V(\mathbf{x}) = - \int_{\infty}^r \mathbf{F}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = - \int_{\infty}^r F(r) dr \equiv V(r) \quad (7.1)$$

Por lo tanto es recomendable analizarlo en coordenadas esféricas en las que el hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{x})$$

se expresa mediante la fórmula

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{2mr^2} + V(r) \quad (7.2)$$

donde

$$\hat{p}_r^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right), \quad (7.3)$$

es decir, depende exclusivamente de  $r$  y puede ser entendido como el operador de la componente radial del impulso, mientras que  $\hat{\mathbf{l}}^2$  no es otra cosa que el operador de momento orbital y se expresa como

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \quad (7.4)$$



De lo anterior se deduce que el hamiltoniano del sistema conmuta con los operadores del cuadrado del momento orbital  $\hat{\mathbf{l}}^2$  y de su proyección  $\hat{l}_z$ . En efecto, gracias a la estructura del hamiltoniano, se puede verificar que

$$[\hat{H}, \hat{l}_z] = [\hat{H}, \hat{\mathbf{l}}^2] = 0$$

Por lo tanto, el sistema puede encontrarse en un estado con valores definidos de la energía ( $E$ ), el cuadrado del momento orbital  $\mathbf{l}^2$  y su proyección sobre un eje  $\hat{l}_z$ , y las funciones que describen tales estados

$$\psi(\mathbf{x}) \equiv \psi_{E,\ell,m}(r, \vartheta, \varphi).$$

van a ser funciones propias de los tres operadores.

La estructura del hamiltoniano permite ejecutar la separación de variables. En efecto, si asumimos que

$$\psi(\mathbf{x}) \equiv \psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) F(\vartheta, \varphi)$$

entonces la ecuación de Schrödinger

$$\hat{H} \psi(\mathbf{x}) = E \psi(\mathbf{x})$$

se expresa como

$$\left\{ \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{2mr^2} + V(r) \right\} R(r) F(\vartheta, \varphi) = E R(r) F(\vartheta, \varphi)$$

de donde se obtiene

$$\frac{\hat{\mathbf{l}}^2 F(\vartheta, \varphi)}{F(\vartheta, \varphi)} = -r^2 \frac{\hat{p}_r^2 R(r)}{R(r)} + 2mr^2 [E - V(r)]$$

Como el término de la izquierda debe depender sólo de las variables angulares  $\vartheta$  y  $\varphi$ , y el de la derecha, sólo de  $r$ , la única posibilidad es que ambos sean iguales a una constante  $\lambda$ . Debido a esto obtenemos dos ecuaciones

$$\begin{aligned} -r^2 \hat{p}_r^2 R(r) + 2mr^2 [E - V(r)] R(r) &= \lambda R(r) \\ \hat{\mathbf{l}}^2 F(\vartheta, \varphi) &= \lambda F(\vartheta, \varphi), \end{aligned} \tag{7.5}$$

La segunda ecuación no es otra que la de los valores propios del cuadrado del momento orbital  $\hat{\mathbf{l}}^2$  y de su proyección  $\hat{l}_z$ . Esto significa que  $\lambda$  es igual a  $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$  y las funciones  $F(\vartheta, \varphi)$  no son otras que los armónicos esféricos, es decir,

$$F(\vartheta, \varphi) = Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)$$

Si se tiene en cuenta lo anterior, para la función  $R(r)$  se obtiene la ecuación

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left[ \hat{p}_r^2 + \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{r^2} \right] + V(r) - E \right\} R(r) = 0,$$

la cual, después de que se reemplaza el operador  $\hat{p}_r^2$ , se transforma en

$$\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left[ r^2 \frac{d}{dr} \right] - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] \right\} R(r) = 0 \quad (7.6)$$

La ecuación para la función radial  $R(r)$  va a depender de la forma concreta del potencial  $V(r)$  y debe ser resuelta en cada caso. Como la fuerza no depende de las variables angulares, en el espacio no hay un sentido preferente y la función radial  $R(r)$  no puede depender de  $m$ , pero sí de  $\ell$  y, por supuesto, de la energía  $E$ . Por lo tanto, deberá ser representada por  $R_{E\ell}(r)$ .

La función radial  $R_{E\ell}(r)$  debe satisfacer algunas condiciones especiales. En primer lugar debe cumplirse que

$$R_{E\ell}(r) \longrightarrow 0 \quad \text{cuando} \quad r \longrightarrow \infty,$$

en cambio cuando

$$r \longrightarrow 0 \quad \text{es suficiente que} \quad r R_{E\ell}(r) \longrightarrow 0,$$

En efecto, el operador  $\hat{p}_r^2$  debe ser hermítico. Ésto significa que  $\hat{p}_r$ , que puede ser expresado como

$$\hat{p}_r \equiv -i\frac{\hbar}{r} \frac{\partial}{\partial r} r$$

tiene que ser hermítico. Y para ésto es suficiente verificar que

$$\langle \psi(\mathbf{x}) | \hat{p}_r \psi(\mathbf{x}) \rangle - \langle \psi(\mathbf{x}) | \hat{p}_r \psi(\mathbf{x}) \rangle^* = 0,$$

es decir, que

$$\int \left\{ \psi^*(\mathbf{x}) [\hat{p}_r \psi(\mathbf{x})] - [\hat{p}_r \psi(\mathbf{x})]^* \psi(\mathbf{x}) \right\} d\mathbf{x} = 0$$

Después de ejecutar algunas operaciones en la izquierda se obtiene el integral

$$-i\hbar \int d\Omega \int_0^\infty \left\{ \frac{\partial}{\partial r} |r\psi(\mathbf{x})|^2 \right\} dr$$

y si se tiene en cuenta la relación de ortonormalización de los armónicos esféricos, se tendrá

$$-i\hbar \int_0^\infty \left\{ \frac{\partial}{\partial r} |r R(r)|^2 \right\} dr \quad (7.7)$$

el cual es igual a 0, sólo si

$$\lim_{r \rightarrow 0} [r R(r)] = 0 \quad (7.8)$$

## 7.2. Una partícula libre.

El problema de una partícula libre puede ser resuelto en coordenadas cartesianas. En este caso, el hamiltoniano conmuta con el operador del momento lineal  $\hat{\mathbf{p}}$ , razón por la cual la ecuación de Shrödinger tiene como soluciones a las funciones propias del momento lineal, es decir, a las funciones

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad \text{con} \quad \mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$$

que son de mucha utilidad cuando se describen movimientos de traslación.

Pero este problema también puede ser tratado como un caso especial de movimiento en campos de fuerzas centrales con  $V(r) = 0$ . En este caso, la ecuación para la función radial resulta igual a

$$\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right\} R(r) = 0 \quad (7.9)$$

Si se ejecuta el cambio de variable  $r \rightarrow \rho = kr$ , donde  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ , la ecuación precedente se reduce a

$$\rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} R(\rho) + \frac{2\rho}{r} \frac{d}{d\rho} R(\rho) + [\rho^2 - \ell(\ell+1)] R(\rho) = 0 \quad (7.10)$$

que es la ecuación para las funciones esféricas de Bessel  $j_\ell(\rho)$ . Por lo tanto, la solución de la ecuación radial se expresará como

$$R(r) = C_\ell j_\ell(kr) \quad (7.11)$$

En general, las funciones esféricas de Bessel se expresan como

$$j_\ell(z) = \frac{z^\ell}{2^{\ell+1} \ell!} \int_{-1}^{+1} e^{izs} (1-s^2)^\ell ds \quad (7.12)$$

de donde, después de integrar por partes  $\ell$  veces, se obtiene

$$j_\ell(z) = \frac{1}{2i^\ell} \int_{-1}^{+1} e^{izs} P_\ell(s) ds \quad (7.13)$$

Si se continúa con la integración por partes se puede verificar que

$$j_\ell(\rho) \cong \frac{\cos[\rho - (\ell+1)\pi/2]}{\rho} \quad \text{para} \quad (\rho \gg \ell) \quad (7.14)$$

Resulta de interés relacionar las soluciones expresadas en coordenadas cartesianas con las obtenidas en coordenadas esféricas. Las primeras son ondas planas con valor definido del momento lineal  $\mathbf{p}$ , una de cuyas propiedades que constituyen un conjunto infinito y no enumerable, mientras que las otras representan un conjunto infinito pero enumerable de estados con valor

definido del cuadrado del momento orbital  $\ell$  y de su proyección  $m$ , sobre un eje dado.

Debido a que las soluciones que acabamos de obtener constituyen un conjunto completo, se tendrá

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} C_{\ell m} j_{\ell}(kr) Y_{\ell}^m(\vartheta, \varphi) \quad (7.15)$$

Si el eje  $z$  se elige en el sentido del vector  $\mathbf{k}$  y se introduce la variable  $\xi = \cos \vartheta$ , la fórmula anterior se reduce a

$$e^{ikz} = e^{ikr\xi} = \sum_{\ell=0}^{\infty} A_{\ell} j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\xi) \quad (7.16)$$

Después de multiplicar ambos términos por  $P_{\ell'}(\xi)$  e integrar sobre  $\xi$  se obtiene

$$A_{\ell} j_{\ell}(kr) = \frac{2\ell+1}{2} \int_{-1}^{+1} e^{ikr\xi} P_{\ell}(\xi) d\xi \quad (7.17)$$

de modo que al compararlo con la definición de la funciones esféricas de Bessel obtendremos

$$A_{\ell} = i^{\ell} (2\ell+1)$$

y

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \vartheta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} (2\ell+1) j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \vartheta) \quad (7.18)$$

En general, cuando  $\mathbf{k}$  está orientado en un sentido arbitrario, se tendrá

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} (2\ell+1) j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\mathbf{e}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{x}}) \quad (7.19)$$

que también puede ser expresado en función de los armónicos esféricos de la siguiente manera

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} i^{\ell} j_{\ell}(kr) [Y_{\ell}^m(\beta, \alpha)]^* Y_{\ell}^m(\vartheta, \varphi) \quad (7.20)$$

donde  $\beta$  y  $\alpha$  son los ángulos del vector  $\mathbf{k}$ .

Las fórmulas obtenidas son de mucha utilidad en la teoría de dispersión.

### 7.3. El pozo esférico de potencial.

El pozo esférico de potencial<sup>1</sup> es descrito por la función

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < a \\ V_o, & r > a, \end{cases} \quad (7.21)$$

de tal manera que la ecuación para la función radial resultará expresada como

$$\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right\} R_{E\ell}(r) = 0, \quad \text{cuando } r < a \quad (7.22)$$

$$\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V_o] \right\} R_{E\ell}(r) = 0, \quad \text{si } r > a$$

### 7.3.1. Caso A: $\ell = 0$ .

Cuando  $\ell = 0$ , la ecuación para la función radial

$$\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{2mE}{\hbar^2} \right\} R_E(r) = 0, \quad \text{cuando } r < a \quad (7.23)$$

$$\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V_o] \right\} R_E(r) = 0, \quad \text{si } r > a$$

se resuelve fácilmente si se hace la siguiente sustitución  $R(r) = \chi(r)/r$ .

En efecto, después de ejecutar las operaciones indicadas, para la función  $\chi(r)$  se obtiene las ecuaciones

$$\frac{d^2}{dr^2} \chi(r) + \frac{2mE}{\hbar^2} \chi(r) = 0, \quad \text{cuando } r < a$$

$$\frac{d^2}{dr^2} \chi(r) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V_o] \chi(r) = 0, \quad \text{si } r > a$$

De las condiciones para la función  $R_E(r)$  se deduce que la función  $\chi(r) \rightarrow 0$ , tanto cuando  $r \rightarrow 0$ , como cuando  $r \rightarrow \infty$ .

Especial interés representa el movimiento de cuerpos con energías ( $E < V_o$ ). En este caso, las ecuaciones para  $\chi(r)$  resultan expresadas como

$$\frac{d^2}{dr^2} \chi(r) + \frac{2mE}{\hbar^2} \chi(r) = 0, \quad \text{cuando } r < a \quad (7.24)$$

$$\frac{d^2}{dr^2} \chi(r) - \frac{2m}{\hbar^2} [V_o - E] \chi(r) = 0, \quad \text{si } r > a$$

---

<sup>1</sup>En realidad se trata de un potencial esférico, con un valor dado dentro de una esfera de radio  $r$  y otro valor, distinto, fuera de ella.

y sus soluciones son las funciones

$$\chi(r) = \begin{cases} A \operatorname{sen} \alpha r, & \text{si } r < a \\ C e^{-\beta r}, & \text{para } r > a \end{cases} \quad (7.25)$$

donde

$$\alpha = \left\{ \frac{2mE}{\hbar^2} \right\}^{1/2} \quad \text{y} \quad \beta = \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} [V_0 - E] \right\}^{1/2} \quad (7.26)$$

De la continuidad de la derivada logarítmica para  $R(r)$  en  $r = a$ , que se expresa como

$$\left\{ \frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} R(r) \right\}_{/r=a-0} = \left\{ \frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} R(r) \right\}_{/r=a+0},$$

para  $\chi(r)$ , en el mismo punto, se obtiene

$$\left\{ \frac{1}{\chi(r)} \frac{d}{dr} \chi(r) \right\}_{/r=a-0} = \left\{ \frac{1}{\chi(r)} \frac{d}{dr} \chi(r) \right\}_{/r=a+0},$$

que se satisface sólo si

$$\alpha \cot \alpha = -\beta \quad (7.27)$$

Esta condición es la misma que en el caso del pozo de potencial unidimensional y se satisface sólo para ciertos valores de la energía.

### 7.3.2. Caso B: $\ell \neq 0$ .

Cuando  $\ell \neq 0$ , la ecuación para la función radial es recomendable resolverla por separado para  $r < a$  y para  $r > a$ .

Si  $r < a$  es aconsejable hacer la sustitución  $r \rightarrow \varrho = \alpha r$ , gracias a lo cual para  $R(\varrho)$  se obtiene la ecuación

$$\frac{d^2}{d\varrho^2} R(\varrho) + \frac{2}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} R(\varrho) + \left\{ 1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\varrho^2} \right\} R(\varrho) = 0$$

cuyas soluciones son las funciones esféricas de Bessel

$$j_\ell(\varrho) = \left( \frac{\pi}{2\varrho} \right)^{1/2} J_{\ell+1/2}(\varrho)$$

$$\eta_\ell(\varrho) = (-1)^{\ell+1} \left( \frac{\pi}{2\varrho} \right)^{1/2} J_{-\ell-1/2}(\varrho)$$

Cuando  $\varrho \rightarrow 0$ , las funciones esféricas de Bessel tienen el siguiente comportamiento asintótico

$$j_\ell(\varrho) \longrightarrow \frac{\varrho^\ell}{(2\ell+1)!!} \quad \text{y} \quad \eta_\ell(\varrho) \longrightarrow -\frac{(2\ell-1)!!}{\varrho^{\ell+1}}$$

debido a lo cual la solución aceptable para la función radial será

$$R(r) = A j_\ell(\alpha r) \quad (7.28)$$

Para  $r > a$ , la sustitución  $r \rightarrow \varrho = i\beta r$  nos lleva a la misma ecuación de Bessel, pero de argumento imaginario. Por lo tanto, las soluciones serán las funciones de Hankel

$$h_\ell^{(1)}(\varrho) = j_\ell(\varrho) + i\eta_\ell(\varrho)$$

$$h_\ell^{(2)}(\varrho) = j_\ell(\varrho) - i\eta_\ell(\varrho)$$

Cuando  $r \rightarrow \infty$ , el comportamiento asintótico de las funciones de Hankel es

$$h_\ell^{(1)}(\varrho) \longrightarrow \frac{1}{\varrho} e^{i[\varrho - \frac{1}{2}(\ell+1)\pi]}$$

$$h_\ell^{(2)}(\varrho) \longrightarrow \frac{1}{\varrho} e^{-i[\varrho - \frac{1}{2}(\ell+1)\pi]},$$

lo que significa que aceptables son sólo las soluciones

$$R(r) = B h_\ell^{(1)}(i\beta r) \quad (7.29)$$

Los niveles de energía se van a obtener de la continuidad de la derivada logarítmica

$$\left\{ \frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} R(r) \right\}_{/r=a-0} = \left\{ \frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} R(r) \right\}_{/r=a+0},$$

la cual debe ser analizada para los diferentes valores de  $\ell$ .

Así, para  $\ell = 0$  el resultado que se obtiene es el mismo que el obtenido en el caso A, es decir,

$$\xi \cot \xi = -\zeta, \quad \text{con} \quad \xi = \alpha a \quad \text{y} \quad \zeta = \beta a \quad (7.30)$$

y si  $\ell = 1$ , los valores de energía se obtienen de la ecuación

$$\frac{\cot \xi}{\xi} - \frac{1}{\xi^2} = \frac{1}{\zeta} + \frac{1}{\zeta^2} \quad (7.31)$$

En ambos casos, adicionalmente se cumple

$$\xi^2 + \zeta^2 = 2mV_0 a^2 / \hbar^2$$

## 7.4. Oscilador armónico esférico.

Oscilador armónico esférico es cualquier sistema cuya energía potencial tiene la forma

$$V(r) = \frac{m\omega^2}{2} r^2$$

En este caso, en la ecuación radial

$$\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left[ r^2 \frac{d}{dr} \right] - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - \frac{m\omega^2}{2} r^2 \right] \right\} R_{E\ell}(r) = 0, \quad (7.32)$$

es aconsejable ejecutar la sustitución

$$r \longrightarrow \varrho = \frac{m\omega}{\hbar} r^2$$

para obtener la ecuación

$$\left\{ \varrho \frac{d^2}{d\varrho^2} + \frac{3}{2} \frac{d}{d\varrho} + \left[ \frac{E}{2\hbar\omega} - \frac{\ell(\ell+1)}{4\varrho} - \frac{\varrho}{4} \right] \right\} R(\varrho) = 0 \quad (7.33)$$

que tiene puntos especiales en  $\varrho = 0$  y  $\varrho = \infty$ .

Cuando  $\varrho \rightarrow 0$ , la solución asintótica se puede expresar como

$$R_0(\varrho) = \varrho^\lambda$$

debido a lo cual, cuando se ejecuta el reemplazo en la ecuación, se obtiene la relación

$$\lambda(\lambda-1) + \frac{3}{2}\lambda - \frac{\ell(\ell+1)}{4} = 0$$

de la cual se obtiene

$$\lambda = \ell/2 \quad \text{y} \quad R_0(\varrho) = \varrho^{\ell/2} \quad (7.34)$$

Si  $\varrho \rightarrow \infty$ , la ecuación se reduce a

$$\varrho \frac{d^2}{d\varrho^2} R_\infty(\varrho) - \frac{\varrho}{4} R_\infty(\varrho) = 0$$

y su solución es la función

$$R_\infty(\varrho) = e^{-\varrho/2} \quad (7.35)$$

Por lo tanto, la función general se expresará como

$$R(\varrho) \propto e^{-\varrho/2} \varrho^{\ell/2} \chi(\varrho)$$

de tal modo que, después de ejecutar el reemplazo en la ecuación, para la función  $\chi(\varrho)$  se obtiene la ecuación

$$\varrho \frac{d^2}{d\varrho^2} \chi(\varrho) + \left\{ \ell + \frac{3}{2} - \varrho \right\} \frac{d}{d\varrho} \chi(\varrho) + \left\{ \frac{E}{2\hbar\omega} - \frac{\ell}{2} - \frac{3}{4} \right\} \chi(\varrho) = 0 \quad (7.36)$$

que es una ecuación del tipo

$$z \frac{d^2}{dz^2} F(\alpha, \gamma, z) + (\gamma - z) \frac{d}{dz} F(\alpha, \gamma, z) - \alpha F(\alpha, \gamma, z) = 0 \quad (7.37)$$



con  $\alpha = -[E/2\hbar\omega - \ell/2 - 3/4]$ ,  $\gamma = \ell + 3/2$  y  $z = \varrho$ .

La solución de la ecuación anterior se expresa en forma de una serie de potencias

$$F(\alpha, \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha z}{\gamma 1!} + \frac{\alpha(\alpha + 1) z^2}{\gamma(\gamma + 1) 2!} + \dots \quad (7.38)$$

la cual se transforma en un polinomio de orden  $|\alpha|$  si este coeficiente es igual a 0 ó a  $-N$  y es una serie divergente cuando  $\varrho \rightarrow \infty$ , en caso contrario.

Si el coeficiente  $\gamma$  no es entero, la función

$$z^{1-\gamma} F(\alpha - \gamma + 1, 2 - \gamma, z) \quad (7.39)$$

también es solución de la ecuación diferencial anterior (divergente en  $z = 0$ ). Por lo tanto la solución general de la ecuación radial tendrá la forma

$$R(\varrho) = C_1 F(-[E/2\hbar\omega - \ell/2 - 3/4], \ell + 3/2, \varrho) + C_2 \varrho^{-2\ell-1} F(-[E/2\hbar\omega + \ell/2 - 1/4], 1/2 - \ell, \varrho) \quad (7.40)$$

Sin embargo, para que la función sea finita cuando  $\varrho \rightarrow 0$  es necesario que el coeficiente  $C_2$  sea igual a cero para todos los valores de  $\varrho$ , gracias a lo cual la solución que de expresada sólo a través de la fórmula

$$R(\varrho) = C_1 F(-[E/2\hbar\omega - \ell/2 - 3/4], \ell + 3/2, \varrho) \quad (7.41)$$

Por otro lado, para que la solución se mantenga finita cuando  $\varrho \rightarrow \infty$  es imprescindible que la serie hipergeométrica se transforme, cuando menos, en un polinomio, es decir que el coeficiente  $\alpha$  sea un entero negativo. Esto significa que

$$-[E/2\hbar\omega - \ell/2 - 3/4] = -n_r$$

de donde, para la energía del oscilador se obtiene

$$E_{n_r} = \hbar\omega[\ell + 2n_r + 3/2] \quad (7.42)$$

o también

$$E_N = \hbar\omega[N + 3/2] \quad (7.43)$$

con  $N = \ell + 2n_r$ .

Para un  $N$  dado los posibles valores de  $\ell$  son  $N, N-2$ , etc. Por lo tanto, cada nivel energético tiene una degeneración

$$g(N) = \sum_{\ell} (2\ell + 1)$$

igual a

$$g(N) = \frac{(N+1)(N+2)}{2} \quad (7.44)$$

## 7.5. El átomo de hidrógeno.

Para analizar la estructura electrónica del hidrógeno o de los iones hidrogenoides es necesario resolver la correspondiente ecuación de Schrödinger. El hidrógeno y los iones hidrogenoides pueden ser entendidos como sistemas de dos cuerpos, cuyo operador de la energía cinética en el sistema de laboratorio debe ser

$$\hat{K} = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{2m_N} \Delta_{\mathbf{x}^N} + \frac{1}{2m_e} \Delta_{\mathbf{x}^e} \right\} \quad (7.45)$$

Los sistemas de dos cuerpos es más conveniente describirlos en el sistema del centro de masa, al cual se puede pasar mediante las transformaciones

$$\mathbf{X} = \frac{m_N \mathbf{x}^N + m_e \mathbf{x}^e}{m_N + m_e} \quad \text{y} \quad \mathbf{x} = \mathbf{x}^N - \mathbf{x}^e \quad (7.46)$$

debido a las cuales

$$\frac{\partial}{\partial x_i^e} = \frac{m_e}{m_e + m_N} \frac{\partial}{\partial X_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \quad (7.47)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i^N} = \frac{m_N}{m_e + m_N} \frac{\partial}{\partial X_i} + \frac{\partial}{\partial x_i}$$

En consecuencia, el mencionado operador tendrá la forma

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2} \left\{ \left( \frac{1}{m_N + m_e} \right) \Delta_{\mathbf{X}} + \left( \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_N} \right) \Delta_{\mathbf{x}} \right\} \quad (7.48)$$

es decir

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2} \left\{ \frac{1}{m_N + m_e} \Delta_{\mathbf{X}} + \frac{1}{\mu} \Delta_{\mathbf{x}} \right\} \quad \text{donde} \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m} + \frac{1}{M} \quad (7.49)$$

es la masa reducida del sistema.

En consecuencia, el movimiento de un sistema de dos cuerpos se puede entender como el movimiento del centro de masa, sin la acción de ninguna fuerza externa, más el movimiento relativo de los cuerpos.

El hamiltoniano del movimiento relativo es la siguiente

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{x}} + V(\mathbf{x}) \quad (7.50)$$

y como el potencial se expresa mediante la siguiente fórmula

$$V(\mathbf{x}) = -Ze^2/r, \quad \text{con} \quad r = |\mathbf{x}|,$$

la ecuación de Schrödinger se expresará como

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(r) \right\} \psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}) \quad (7.51)$$

Como el potencial tiene simetría esférica el problema debe ser resuelto en coordenadas esféricas  $\mathbf{x} = (r, \vartheta, \varphi)$ . En este caso, como se ha visto en el acápite precedente, las soluciones se expresarán como

$$\psi(\mathbf{x}) = R_{E,\ell}(r) Y_\ell^m(\vartheta, \varphi) \quad (7.52)$$

### 7.5.1. Ecuación para la función radial.

Al reemplazar la forma concreta del potencial, la ecuación para la función radial se transforma en

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left[ r^2 \frac{d}{dr} R(r) \right] - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R(r) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] R(r) = 0$$

o también en

$$\frac{d^2}{dr^2} R(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} R(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E + \frac{Ze^2}{r} \right] R(r) = 0 \quad (7.53)$$

Esta ecuación puede ser expresada en variables adimensionales si se emplean las unidades “naturales” de masa ( $m = 9,11 \times 10^{-28} g$ ), carga ( $e = 4,8 \times 10^{-10} u.e.q.$ ), longitud ( $a = \hbar^2/me^2$ ), tiempo ( $t = \hbar^3/me^4$ ) y energía ( $E_0 = me^4/\hbar^2 = 4,36 \times 10^{-11} erg = 27,21 eV$ ). Para eso la dividimos entre la expresión  $m^2 e^4 Z^2 / \hbar^4$ , es decir, entre  $Z^2/a^2$ , después de lo cual se obtendrá

$$\frac{d^2}{d\rho^2} R(\rho) + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} R(\rho) - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} R(\rho) + 2 \left( \varepsilon + \frac{1}{\rho} \right) R(\rho) = 0 \quad (7.54)$$

donde  $\rho = rZ/a$  y  $\varepsilon = E / (me^4 Z^2 / \hbar^2) = E\hbar^2 / me^4 Z^2$ .

Seguidamente es conveniente ejecutar el siguiente cambio de variable  $\rho \rightarrow \varrho = 2\rho/n$  donde  $n = 1/\sqrt{-2\varepsilon} > 0$  luego de lo cual la ecuación adquirirá la forma

$$\frac{d^2}{d\varrho^2} \mathcal{R}(\varrho) + \frac{2}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} \mathcal{R}(\varrho) + \left\{ -\frac{1}{4} + \frac{n}{\varrho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\varrho^2} \right\} \mathcal{R}(\varrho) = 0 \quad (7.55)$$

y si en lugar de  $R(\rho)$  introducimos la función  $\chi(\varrho) = \varrho R(\varrho)$ , para esta función obtenemos la ecuación

$$\frac{d^2}{d\varrho^2} \chi(\varrho) + \left\{ -\frac{1}{4} + \frac{n}{\varrho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\varrho^2} \right\} \chi(\varrho) = 0 \quad (7.56)$$

Cuando  $\varrho \rightarrow \infty$  la ecuación anterior se reduce a

$$\frac{d^2}{d\varrho^2} \chi_\infty(\varrho) - \frac{1}{4} \chi_\infty(\varrho) = 0 \quad (7.57)$$

cuya solución es

$$\chi_\infty(\varrho) \propto e^{-\varrho/2} \quad (7.58)$$

En cambio cuando  $\varrho \rightarrow 0$  son considerables sólo la segunda derivada y el término que corresponde al momento orbital, lo cual se puede verificar si la función  $\chi(\varrho)$  se expresa como

$$\chi_o(\varrho) \propto \varrho^\gamma$$

En efecto, después de calcular la segunda derivada y reemplazarla en la ecuación precedente, ésa quedará expresada como

$$\left\{ \gamma(\gamma - 1) - \ell(\ell + 1) \right\} \varrho^{\gamma-2} + n \varrho^{\gamma-1} - \frac{1}{4} \varrho^\gamma = 0, \quad (7.59)$$

con los dos últimos términos despreciables, gracias a lo cual se tendrá

$$\gamma(\gamma - 1) - \ell(\ell + 1) = 0 \quad (7.60)$$

de donde se deduce que  $\gamma = \ell + 1, -\ell$ .

Por lo tanto, en este caso

$$\chi_o(\varrho) = D_1 \varrho^{\ell+1} + D_2 \varrho^{-\ell} \quad (7.61)$$

y, como el segundo término es divergente en el origen, es imprescindible exigir que  $D_2 = 0$ , debido a lo cual resultará

$$\chi_o(\varrho) \propto \varrho^{\ell+1} \quad (7.62)$$

En consecuencia, la función  $\chi(\varrho)$  se puede expresar como

$$\chi(\varrho) = \chi_\infty(\varrho) \chi_o(\varrho) \mathcal{W}(\varrho) = e^{-\varrho/2} \varrho^{\ell+1} \mathcal{W}(\varrho) \quad (7.63)$$

y si se la reemplaza en la ecuación correspondiente para  $\mathcal{W}(\varrho)$  se obtiene la ecuación

$$\varrho \frac{d^2}{d\varrho^2} \mathcal{W}(\varrho) + (2\ell + 2 - \varrho) \frac{d}{d\varrho} \mathcal{W}(\varrho) + (n - \ell - 1) \mathcal{W}(\varrho) = 0 \quad (7.64)$$

que coincide con la ecuación para las funciones hipergeométricas confluentes

$$z \frac{d^2}{dz^2} F(z) + (\gamma - z) \frac{d}{dz} F(z) - \alpha F(z) = 0 \quad (7.65)$$

con  $\alpha = \ell + 1 - n, \gamma = 2\ell + 2$  y  $z = \varrho$ .

### 7.5.2. Valores posibles de la energía.

La solución de la ecuación anterior se expresa en forma de una serie de potencias

$$F(\alpha, \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma} \frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha + 1)}{\gamma(\gamma + 1)} \frac{z^2}{2!} + \dots, \quad (7.66)$$

divergente cuando  $\varrho \rightarrow \infty$ , pero que se transforma en un polinomio de orden  $|\alpha|$  si este coeficiente es igual a un entero no positivo  $\alpha = 0, -N$  y es una serie en caso contrario.

Si el coeficiente  $\gamma$  no es entero, la función

$$z^{1-\gamma} F(\alpha - \gamma + 1, 2 - \gamma, z) \quad (7.67)$$

también es solución de la ecuación diferencial anterior, divergente en  $z = 0$ .

Pero, en nuestro caso  $\gamma = 2\ell + 2$ . Por lo tanto la solución general de la ecuación radial tendrá la forma

$$\mathcal{W}(\varrho) \propto F(-n + \ell + 1, 2\ell + 2, \varrho) \quad (7.68)$$

y, en consecuencia,

$$R(\varrho) \equiv R_{n\ell}(\varrho) \propto \varrho^\ell e^{-\varrho/2} F(-n + \ell + 1, 2\ell + 2, \varrho) \quad (7.69)$$

Por otro lado, para que la solución se mantenga finita cuando  $\varrho \rightarrow \infty$  es imprescindible que la serie hipergeométrica se transforme, cuando menos, en un polinomio, es decir que el coeficiente  $\alpha$  sea un entero negativo. Esto significa que

$$\ell + 1 - n \leq 0 \quad \text{es decir} \quad n \geq \ell + 1 \quad \text{o también} \quad \ell \leq n - 1 \quad (7.70)$$

De las relaciones anteriores se observa que  $n$  debe ser un número natural, es decir  $n = 1, 2, \dots$ . Por lo tanto, la energía, se expresará como

$$\mathcal{E} = -\frac{1}{2n^2}, \quad \text{en unidades naturales} \quad (7.71)$$

y

$$E = -\frac{1}{2n^2} \frac{mZ^2 e^4}{\hbar^2}, \quad \text{en unidades normales} \quad (7.72)$$

### 7.5.3. Soluciones de la ecuación radial.

Si  $\alpha$  toma valores enteros negativos ( $\alpha = -N$ ) la función hipergeométrica  $F(-N, \gamma, z)$  se reduce al polinomio

$$\begin{aligned} F(-N, \gamma, z) &= 1 - \frac{N}{\gamma} z + \frac{-N(1-N)}{\gamma(\gamma+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots + \frac{-N(1-N)\dots(-1)}{\gamma(\gamma+1)\dots(\gamma+N-1)} \frac{z^N}{N!} \\ &= 1 - \frac{N}{\gamma} z + \dots + (-1)^N \frac{N(N-1)\dots(1)}{\gamma(\gamma+1)\dots(\gamma+N-1)} \frac{z^N}{N!} \\ &= \sum_{s=0}^N (-1)^s \frac{N(N-1)\dots(N-s+1)}{\gamma(\gamma+1)\dots(\gamma+s+1)} \frac{z^s}{s!} \end{aligned}$$

Si se aplica la regla de derivación de Leibnitz se puede verificar que la suma precedente se puede expresar como

$$= \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma + N)} z^{-\gamma} e^z \frac{d^N}{dz^N} (z^{\gamma+N} e^{-z})$$

y, como en nuestro caso  $N = n - \ell - 1$ ,  $\gamma = 2\ell + 2$  y  $z = \varrho$ , entonces se tendrá

$$\begin{aligned} F(- (n - \ell - 1), 2\ell + 2, \varrho) &= \frac{\varrho^{-(2\ell+2)} \Gamma(2\ell + 2)}{\Gamma(2\ell + 2 + n - \ell - 1)} e^\varrho \frac{d^{n-\ell-1}}{d\varrho^{n-\ell-1}} (\varrho^{2\ell+2+n-\ell-1} e^{-\varrho}) \\ &= \frac{\varrho^{-(2\ell+2)} \Gamma(2\ell + 2)}{\Gamma(n + \ell + 1)} e^\varrho \frac{d^{n-\ell-1}}{d\varrho^{n-\ell-1}} (\varrho^{n+\ell+1} e^{-\varrho}) \end{aligned} \quad (7.73)$$

La expresión anterior puede ser expresada a través de los *polinomios asociados de Laguerre*, cuya fórmula es

$$L_N^M(z) = z^{-M} e^z \frac{d^N}{dz^N} (z^{M+N} e^{-z}), \quad (7.74)$$

si  $N = n - \ell - 1$  y  $M = 2\ell + 1$ . En consecuencia,

$$F(- (n - \ell - 1), 2\ell + 2, \varrho) \propto L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\varrho) \quad (7.75)$$

Los polinomios de Laguerre satisfacen las relaciones de recurrencia<sup>2</sup>. Así,

$$kL_s^k(\xi) - \xi kL_s^{k+1}(\xi) = L_{s+1}^k(\xi) - (s+1)L_s^k(\xi) \quad (7.76)$$

$$L_s^{k-1}(\xi) = L_s^k(\xi) - sL_{s-1}^k(\xi)$$

Si en la primera de las anteriores relaciones  $k \rightarrow k - 1$  se obtendrá

$$\xi L_s^k(\xi) = (s+k)L_s^{k-1}(\xi) - L_{s+1}^{k-1}(\xi)$$

y si lo obtenido se combina con las relaciones precedentes se tendrá

$$\xi L_s^k(\xi) = (2s+k+1)L_s^k(\xi) + L_{s+1}^k(\xi) + s(s+k)L_{s-1}^k(\xi) \quad (7.77)$$

Por otro lado, los polinomios asociados de Laguerre satisfacen la siguiente relación de ortonormalización

$$\int_0^\infty e^{-\xi} \xi^k L_s^k(\xi) L_{s'}^k(\xi) d\xi = \frac{(k+s)!}{s!} \delta_{s,s'}, \quad (7.78)$$

<sup>2</sup>Estas relaciones se obtienen al derivar, sobre las variables  $t$  y  $\xi$ , respectivamente, la función generatriz

$$\frac{e^{\xi t/(1-t)}}{(1-t)^{k+1}} = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{t^s}{s!} L_s^k(\xi)$$

así como la relación

$$\int_0^{\infty} e^{-\xi} \xi^{k+b} L_s^k(\xi) L_s^k(\xi) d\xi = \frac{(k+s)!}{s!} (2s+k+1)^b \quad (7.79)$$

En consecuencia, la función  $R_{n\ell}(\varrho)$  se expresará como

$$R_{n\ell}(\varrho) \propto e^{-\varrho/2} \varrho^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\varrho) \quad (7.80)$$

y en unidades dimensionales será igual a

$$R_{n\ell}(r) = N_{n\ell} \left(\frac{2rZ}{na}\right)^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2rZ}{na}\right) e^{-rZ/na} \quad (7.81)$$

La constante  $N_{n\ell}$  se obtiene de la condición de normalización

$$\int R_{n\ell}^2 r^2 dr = N_{n\ell}^2 \left(\frac{na}{2Z}\right)^3 \int e^{-\frac{2rZ}{na}} \left(\frac{2rZ}{na}\right)^{2\ell+2} \left\{L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\varrho)\right\}^2 = 1 \quad (7.82)$$

de donde se obtiene

$$N_{n\ell} = \left(\frac{Z}{na}\right)^{3/2} \left[\frac{4}{n(n+\ell+1)!(n-\ell-1)!}\right]^{1/2} \quad (7.83)$$

Por lo tanto,

$$R_{n\ell}(r) = \left(\frac{Z}{na}\right)^{3/2} \left[\frac{4}{n(n+\ell+1)!(n-\ell-1)!}\right]^{1/2} \left(\frac{2rZ}{na}\right)^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2rZ}{na}\right) e^{-rZ/na} \quad (7.84)$$

## 7.6. Valores esperados de las magnitudes físicas

Para calcular los valores esperados de las diversas magnitudes

$$\langle \psi_{n'\ell'm'} | \mathfrak{F}(r, \vartheta, \varphi) | \psi_{n\ell m} \rangle = \int \psi_{n'\ell'm'}^*(r, \vartheta, \varphi) \mathfrak{F}(r, \vartheta, \varphi) \psi_{n\ell m}(r, \vartheta, \varphi) dV \quad (7.85)$$

hay que tener presente que tales expresiones se separan en dos integrales

$$\langle R_{n'\ell'} | \mathfrak{R}(r) | R_{n\ell} \rangle = \int R_{n'\ell'}^*(r) \mathfrak{R}(r) R_{n\ell}(r) r^2 dr \quad (7.86)$$

$$\langle Y_{\ell'm'} | \mathfrak{T}(\vartheta, \varphi) | Y_{\ell m} \rangle = \int Y_{\ell'm'}^*(\vartheta, \varphi) \mathfrak{T}(\vartheta, \varphi) Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) d\Omega$$

Para el cálculo de la primera integral es necesario emplear las funciones radiales, algunas de las cuales son:

$$\begin{aligned}
 R_{10} &= \frac{2Z^{3/2}}{a^{3/2}} e^{-rZ/a} \\
 R_{20} &= \frac{Z^{3/2}}{\sqrt{2}a^{3/2}} \left[ 1 - \frac{rZ}{2a} \right] e^{-rZ/2a} \\
 R_{21} &= \frac{Z^{3/2}}{2\sqrt{6}a^{3/2}} \left( \frac{r}{a} \right) e^{-rZ/2a} \\
 R_{30} &= \frac{2Z^{3/2}}{3\sqrt{3}a^{3/2}} \left[ 1 - \frac{2}{3} \left( \frac{r}{a} \right) + \frac{2}{27} \left( \frac{r}{a} \right)^2 \right] e^{-rZ/3a} \\
 R_{31} &= \frac{8Z^{3/2}}{27\sqrt{6}a^{3/2}} \left[ 1 - \frac{1}{6} \left( \frac{r}{a} \right) \right] e^{-rZ/3a} \\
 R_{32} &= \frac{4Z^{3/2}}{81\sqrt{30}a^{3/2}} \left( \frac{r}{a} \right)^2 e^{-rZ/3a},
 \end{aligned} \tag{7.87}$$

Empleando las fórmulas anteriores y las relaciones de recurrencia y ortonormalización de los polinomios asociados de Laguerre se puede demostrar que los primeros valores esperados  $\langle r^k \rangle$ , para  $k$  negativos, se expresarán como:

$$\begin{aligned}
 \langle r^{-1} \rangle &= \frac{1}{n^2} \frac{Z}{a} \\
 \langle r^{-2} \rangle &= \frac{1}{n^3(\ell + 1/2)} \frac{Z^2}{a^2} \\
 \langle r^{-3} \rangle &= \frac{1}{n^3(\ell + 1)(\ell + 1/2)\ell} \frac{Z^3}{a^3} \\
 \langle r^{-4} \rangle &= \frac{3n^2 - \ell(\ell + 1)}{2n^5(\ell + 3/2)(\ell + 1)(\ell + 1/2)(\ell - 1/2)} \frac{Z^4}{a^4}
 \end{aligned} \tag{7.88}$$



y, para  $k$  positivos, serán iguales a

$$\begin{aligned}
 \langle r \rangle &= \frac{1}{2} \left[ 3n^2 - \ell(\ell + 1) \right] \frac{a}{Z} \\
 \langle r^2 \rangle &= \frac{n^2}{2} \left[ 5n^2 + 1 - 3\ell(\ell + 1) \right] \frac{a^2}{Z^2} \\
 \langle r^3 \rangle &= \frac{n^2}{8} \left[ 35n^2(n^2 - 1) - (\ell + 2)(\ell - 1)(30n^2 - 3(\ell + 1)) \right] \frac{a^3}{Z^3} \\
 \langle r^4 \rangle &= \frac{n^4}{8} \left[ 63n^4 - 35n^2(2\ell^2 + 2\ell - 3) + 5\ell(\ell + 1)(3\ell^2 + 3\ell - 10) + 12 \right] \frac{a^4}{Z^4}
 \end{aligned} \tag{7.89}$$

Por su parte, el cálculo de las integrales que dependen de las variables angulares se realiza empleando los armónicos esféricos, entre los que se puede indicar:

$$\begin{aligned}
 Y_{0,0} &= \left( \frac{1}{4\pi} \right)^{1/2} \\
 Y_{1,0} &= \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \cos \vartheta = \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \frac{z}{r} \\
 Y_{1,\pm 1} &= \mp \left( \frac{3}{8\pi} \right)^{1/2} \operatorname{sen} \vartheta e^{\pm i\varphi} = \mp \left( \frac{3}{8\pi} \right)^{1/2} \frac{x \pm y}{r} \\
 Y_{2,0} &= \left( \frac{5}{16\pi} \right)^{1/2} (3 \cos^2 \vartheta - 1) = \left( \frac{5}{16\pi} \right)^{1/2} \frac{3z^2 - r^2}{r^2} \\
 Y_{2,\pm 1} &= \mp \left( \frac{15}{8\pi} \right)^{1/2} \operatorname{sen} \vartheta \cos \vartheta e^{\pm i\varphi} = \mp \left( \frac{15}{8\pi} \right)^{1/2} \frac{z(x \pm y)}{r^2} \\
 Y_{2,\pm 2} &= \left( \frac{15}{32\pi} \right)^{1/2} \operatorname{sen}^2 \vartheta e^{\pm i2\varphi} = \left( \frac{15}{32\pi} \right)^{1/2} \frac{(x \pm y)^2}{r^2} \\
 Y_{3,0} &= \left( \frac{7}{16\pi} \right)^{1/2} (5 \cos^3 \vartheta - 3 \cos \vartheta) = \left( \frac{7}{16\pi} \right)^{1/2} \frac{z(5z^2 - 3r^2)}{r^3} \\
 Y_{3,\pm 1} &= \mp \left( \frac{21}{64\pi} \right)^{1/2} \operatorname{sen} \vartheta (5 \cos^2 \vartheta - 1) e^{\pm i\varphi} = \mp \left( \frac{21}{64\pi} \right)^{1/2} \frac{(x \pm y)(5z^2 - r^2)}{r^3} \\
 Y_{3,\pm 2} &= \left( \frac{105}{32\pi} \right)^{1/2} \operatorname{sen}^2 \vartheta \cos \vartheta e^{\pm i2\varphi} = \left( \frac{105}{32\pi} \right)^{1/2} \frac{z(x \pm y)^2}{r^3}
 \end{aligned} \tag{7.90}$$

$$Y_{3,\pm 3} = \mp \left(\frac{35}{64\pi}\right)^{1/2} \sin^3\vartheta e^{\pm i3\varphi} = \mp \left(\frac{35}{64\pi}\right)^{1/2} \frac{(x \pm y)^3}{r^3} \quad (7.91)$$

así como las relaciones de recurrencia entre los armónicos esféricos.

En general, las magnitudes angulares cuyos valores esperados se tiene que calcular pueden ser expresadas como *tensores esféricos*  $T_{kq}$ , es decir como magnitudes que durante una rotación del sistema de coordenadas se comportan de manera similar a los armónicos esféricos. Esto significa que

$$[\hat{J}_{\pm}, T_{kq}] = \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} T_{k,q \pm 1} \quad (7.92)$$

$$[\hat{J}_z, T_{kq}] = q T_{k,q}$$

Un ejemplo sencillo de operadores tensoriales esféricos son las funciones del tipo  $f(r) Y_{kq}(\vartheta, \varphi)$ . Así, los componentes de un vector  $\mathbf{A}$  pueden expresados en coordenadas esféricas

$$A_0 = A_z; \quad A_{+1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (A_x + iA_y) \quad y \quad A_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (A_x - iA_y) \quad (7.93)$$

y, por lo tanto, resultan iguales a

$$A_0 = |A| \cos\vartheta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} |A| Y_{10} \quad (7.94)$$

$$A_{+1} = -|A| \frac{e^{i\varphi} \sin\vartheta}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} |A| Y_{1,+1} \quad (7.95)$$

$$A_{-1} = |A| \frac{e^{-i\varphi} \sin\vartheta}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} |A| Y_{1,-1}$$

De acuerdo con el teorema de Wigner-Eckart, los elementos de matriz  $\langle \mathcal{T}_{kq}(\vartheta, \varphi) \rangle$  de un operador  $\mathcal{T}_{kq}(\vartheta, \varphi)$  se pueden calcular mediante la siguiente fórmula

$$\langle \ell m | \mathcal{T}_{kq} | \ell' m' \rangle = (-1)^{\ell-m} \langle \ell || \mathcal{T}_k || \ell' \rangle \begin{pmatrix} \ell & k & \ell' \\ -m & q & m' \end{pmatrix} \quad (7.96)$$

donde las expresiones  $\langle \ell || \mathcal{T}_k || \ell' \rangle$  se denominan *elementos de matriz reducidos* y son iguales a

$$\langle \ell || \mathcal{T}_k || \ell' \rangle = (-1)^\ell \sqrt{\frac{(2\ell+1)(2k+1)(2\ell'+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} \ell & k & \ell' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.97)$$

Por lo tanto,

$$\langle \ell m | \mathcal{T}_{kq} | \ell' m' \rangle = (-1)^m \sqrt{\frac{(2\ell+1)(2k+1)(2\ell'+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} \ell & k & \ell' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell & k & \ell' \\ -m & q & m' \end{pmatrix} \quad (7.98)$$

Las magnitudes representadas por los paréntesis son los *símbolos 3j de Wigner*. Los valores que toman cuando  $l, k, \ell', m, q$  y  $m'$  asumen diferentes valores, han sido tabulados y se pueden encontrar en diferentes fuentes. Sin embargo, no está demás señalar que tales coeficientes son diferentes de cero sólo si se cumplen simultáneamente las siguientes condiciones:

- Los índices superiores satisfacen la relación del triángulo  $\Delta(\ell, k, \ell')$ , la cual es una manera compacta de indicar que los posibles valores de uno de ellos, por ejemplo de  $\ell'$ , necesariamente tienen que estar entre  $\ell + k$  y  $|\ell - k|$ . Es decir

$$\ell' = \ell + k, \ell + k - 1, \dots, |\ell - k| \quad (7.99)$$

- La suma algebraica de sus índices inferiores es cero, es decir  $m' + q + m = 0$ .

## 7.7. Espectro del hidrógeno

De acuerdo con la fórmula obtenida en la sección anterior, la energía del hidrógeno tiene un espectro discreto cuyos valores

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \frac{me^4 Z^2}{\hbar^2} \quad (7.100)$$

dependen únicamente del valor del parámetro  $n$ , al cual se denomina *número cuántico principal*.

Como se observa, la energía no depende del valor del coeficiente  $\ell$ , el cual se conoce como *número cuántico orbital* y puede tomar los  $\ell = 1, 2, \dots, n - 1$ , ni de  $m$ , conocido como *número cuántico magnético*, cuyos valores posibles son  $-\ell \leq m \leq \ell$ . En consecuencia, como  $\ell$  toma valores desde 0 hasta  $n - 1$  y a cada valor de  $\ell$  le corresponde  $2\ell + 1$  valores de  $m$ , cada nivel de energía tiene una degeneración igual a

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} m = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2 \quad (7.101)$$

La independencia con respecto de  $\ell$  es propia de los iones hidrogenoides, cuyo potencial es de tipo coulombiano, pero desaparece en sistemas con varios electrones, uno de los cuales puede ser electrón de valencia. En este caso, la interacción del electrón de valencia con los otros electrones apantalla la atracción del núcleo y rompe esta sui generis simetría coulombiana, ya que, como se verá posteriormente, este apantallamiento depende de  $\ell$ , como resultado de lo cual los estados con diferente valor de  $\ell$  adquieren diferentes valores de energía. Por su parte la independencia de la energía con relación de  $m$  es una consecuencia de la simetría esférica del problema, la cual desaparece cuando sobre el sistema actúa un campo magnético.

En principio, el electrón de los átomos hidrogenoides puede encontrarse en cualquiera de los estados descritos por la función de onda  $\psi_{n\ell m}$  y tener una energía  $E_n$  cuyo valor se calcula con la fórmula anterior. Así, si el átomo es de hidrógeno el espectro energético, es decir el conjunto

de posibles valores de la energía que puede tener el electrón correspondiente, es el siguiente:

$$\begin{aligned}
 E_1 &= - (me^4/2\hbar^2) = -13,55 \text{ eV} \\
 E_2 &= -\frac{1}{4} (me^4/2\hbar^2) = -3,39 \text{ eV} \\
 E_3 &= -\frac{1}{9} (me^4/2\hbar^2) = -1,55 \text{ eV} \\
 &\dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots
 \end{aligned}
 \tag{7.102}$$

### 7.7.1. Series espectrales del hidrógeno

En condiciones normales el electrón del hidrógeno se encuentra en su *estado fundamental*  $E_1$ , con una energía de  $-13,55 \text{ eV}$ , pero si se le comunica energía suficiente el electrón puede pasar a los siguientes niveles. Así, para que pueda ascender al siguiente estado necesita una energía

$$|E_2 - E_1| = 10,15 \text{ eV} \tag{7.103}$$

y para separarlo definitivamente, es decir para ionizar un átomo de hidrógeno hay que comunicarle la energía

$$|E_\infty - E_1| = 13,53 \text{ eV} \tag{7.104}$$

valor que recibe el nombre de *Rydberg*.

Cuando el electrón se encuentra en niveles superiores  $n'$  puede descender a estados de menor energía  $n$ , liberando el excedente de energía en forma de radiaciones electromagnéticas con frecuencias iguales a

$$\omega_{n,n'} = \frac{E_{n'} - E_n}{\hbar} = \frac{m^2 e^4 Z^2}{2\hbar^3} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right) = R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right) = \frac{R}{n^2} - \frac{R}{n'^2} \tag{7.105}$$

donde  $R = m^2 e^4 Z^2 / \hbar^3 = 3,27 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$  se denomina *constante de Rydberg-Ritz* y cada uno de los términos de la última diferencia se denominan *términos espectrales*.

A veces, en lugar de la frecuencia, se suele indicar el número de ondas  $\lambda^{-1} = \omega/2\pi c$  que resulta igual a

$$\frac{1}{\lambda_{n,n'}} = \frac{m^2 e^4 Z^2}{4\pi c \hbar^3} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right) = \mathcal{R} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right) = \frac{\mathcal{R}}{n^2} - \frac{\mathcal{R}}{n'^2} \tag{7.106}$$

donde  $\mathcal{R} = m^2 e^4 Z^2 / 4\pi c \hbar^3 = 1,09677581 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$  también se denomina *constante de Rydberg-Ritz*.

Las ondas emitidas como resultado de las transiciones cuánticas se agrupan en *series espectrales*, cada una de las cuales viene a estar definida por el estado final de la transición. Así, las transiciones  $np \rightarrow 1s$  que terminan en el estado  $n = 1$  y cuyos números de onda son iguales a

$$\frac{1}{\lambda_{n,1}} = \mathcal{R} \left( 1 - \frac{1}{n^2} \right) \quad (7.107)$$

conforman la *serie de Lyman*. Sus componentes, en orden decreciente de sus longitudes de onda, se denotan por  $L_\alpha, L_\beta, L_\gamma, \dots$ .

Las transiciones

$$\frac{1}{\lambda_{n,2}} = \mathcal{R} \left( \frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (7.108)$$

$np \rightarrow 2s, nd \rightarrow 2p$  y  $ns \rightarrow 2p$  (cuyas frecuencias, término a término, son iguales en primera aproximación) se agrupan en la *serie de Balmer* y se representan por  $H_\alpha, H_\beta, H_\gamma, \dots$ .

Otras series espectrales llevan los nombres de *serie de Paschen* ( $ns \rightarrow 3p, np \rightarrow 3s, np \rightarrow 3d, nd \rightarrow 3p$  y  $nf \rightarrow 3d$ ), cuyo estado final es el  $3\ell$ , *serie de Brackett* ( $n\ell \rightarrow 4\ell'$ ), con su estado final  $4\ell$ , etc.

# Capítulo 8

## Teoría de la dispersión

Uno de los importantes problemas de la Mecánica Cuántica es la interacción de una partícula (o un haz de partículas), que vienen desde posiciones muy alejadas y con un valor definido del momento lineal, con otra partícula (o grupo de partículas) ubicadas en determinado lugar del espacio<sup>1</sup>. Como la energía de los cuerpos incidentes es positiva siempre va a ser mayor que la energía potencial, después de la interacción éstos continúan con su movimiento hasta posiciones muy alejadas, pero pueden sufrir dos transformaciones: un cambio en el sentido de su movimiento y una variación de su energía.<sup>2</sup> Si ésta permanece constante, el módulo del momento lineal tampoco varía y el proceso recibe el nombre de **dispersión elástica**; en cambio, si la partícula cede cierta porción de su energía ( $\mathcal{E}$ ), la dispersión se denomina **inelástica**.

Experimentalmente, se mide el número de partículas por unidad de tiempo  $dN_E$  que, después de la interacción, atraviezan una superficie unitaria  $dS$ , perpendicular a un rayo trazado desde el punto donde se encuentra el cuerpo (o cuerpos) dispersores. Es evidente que  $dN_E$  debe ser directamente proporcional a  $dS$  e inversamente proporcional a la distancia desde el centro dispersor hasta la ubicación de  $dS$ ; pero también tiene que ser proporcional al flujo de las partículas incidentes  $N$ .

Por lo tanto, si  $d\Omega$  es el ángulo sólido que subtiende a la superficie  $dS$ , entonces

$$dN_E = q(E, \vartheta) N \frac{dS}{r^2} = q(E, \vartheta) N d\Omega \quad (8.1)$$

Quiere decir que para conocer  $dN_E$  es suficiente determinar  $q(E, \vartheta)$ , ya que esta magnitud describe la distribución de las partículas dispersadas según la energía de las partículas incidentes y el ángulo en el cual fueron dispersadas.

Como  $[dN_E] = 1/T$ ,  $[N] = 1/TL^2$  y  $[d\Omega]$  no tiene ninguna dimensión,  $q(E, \vartheta)$  tiene dimensiones de superficie. En efecto, de acuerdo con la fórmula anterior

$$q(E, \vartheta) = \frac{1}{d\Omega} \frac{dN_E}{N}, \quad \text{es decir,} \quad [q] = L^2 \quad (8.2)$$

---

<sup>1</sup>También es posible analizar la interacción de partículas que se mueven al encuentro unas con otras.

<sup>2</sup>Cuando la energía de las partículas interactuantes es lo suficientemente alta es posible la transformación de unas partículas en otras.

Por otro lado, debido a que la ecuación (8.1) puede ser expresada como

$$dN_{\mathcal{E}} = N (1\text{cm}^2) \frac{q(\mathcal{E}, \vartheta) d\Omega}{1\text{cm}^2} \quad (8.3)$$

de donde se obtiene

$$\frac{dN_{\mathcal{E}}}{N (1\text{cm}^2)} = \frac{q(\mathcal{E}, \vartheta) d\Omega}{1\text{cm}^2}, \quad (8.4)$$

entonces, la probabilidad que, de  $N$  partículas que conforman el flujo incidente,  $dN_E$  sean dispersadas en un ángulo sólido  $d\Omega$ , es la misma que al bombardear una superficie de  $1\text{cm}^2$  se dé en la superficie  $q(E, \vartheta) d\Omega \text{cm}^2$ .

Por tal razón,  $q(E, \vartheta)$  recibe el nombre de **sección eficaz diferencial** y se la representa por  $d\sigma/d\Omega$ . En consecuencia,

$$dN_E = \frac{d\sigma}{d\Omega} (\mathcal{E}, \vartheta) N d\Omega \quad (8.5)$$

o también

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dN_{\mathcal{E}}}{N d\Omega} \quad (8.6)$$

## 8.1. Ecuación de Schrödinger para la dispersión.

En ausencia de un potencial dispersor, es decir, cuando las partículas incidentes todavía se encuentran infinitamente alejadas del centro dispersor, el hamiltoniano se reduce al operador de la energía cinética

$$\hat{H} = \hat{K} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \quad (8.7)$$

y sus autovectores  $|\phi\rangle$  también son autovectores del operador del impulso  $\hat{\mathbf{p}}$ , lo que significa que en la representación de coordenadas, tendrán la forma

$$\langle \mathbf{x} | \phi \rangle \equiv \phi_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}$$

Si el eje  $z$  se toma en el sentido del vector  $\mathbf{p}$ , la función  $\phi(\mathbf{x})$  será función sólo de  $z$  y se expresará como

$$\phi_i(z) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ikz}, \quad \text{con} \quad k = p/\hbar \quad (8.8)$$

En consecuencia, el número  $N$  de partículas incidentes por unidad de superficie, igual a la densidad de corriente, se expresará como

$$N = j_z = \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \frac{d\phi_i^*(z)}{dz} \phi_i(z) - \phi_i^*(z) \frac{d\phi_i(z)}{dz} \right\} = \frac{\hbar k}{m(2\pi)^3} \quad (8.9)$$

En presencia de un potencial dispersor, el hamiltoniano consta de dos términos y puede ser expresado como

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} \quad (8.10)$$

por lo tanto, se tiene que resolver la ecuación

$$\hat{H}|\psi\rangle = (\hat{K} + \hat{V})|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (8.11)$$

En la representación de coordenadas, la ecuación precedente resulta expresada de la siguiente manera

$$\{\Delta + k^2\}\psi(\mathbf{x}) = \Phi(\vec{x}), \quad \text{con} \quad \Phi(\vec{x}) = \frac{2mV(\mathbf{x})}{\hbar^2} \quad \text{y} \quad k^2 = 2mE/\hbar^2, \quad (8.12)$$

y su solución consta de dos partes: La solución general de la ecuación homogénea y una solución de la ecuación no homogénea.

La primera coincide con la solución de la ecuación en ausencia del potencial dispersor, es decir describe el flujo de las partículas incidentes. La segunda parte puede ser obtenida empleando el mecanismo de las funciones de Green y describirá el flujo de las partículas dispersadas. En consecuencia,

$$\psi(\mathbf{x}) = \phi_i(\mathbf{x}) + \psi_f(\mathbf{x})$$

En el infinito la segunda parte de la función precedente debe ser una onda esférica emergente. Por lo tanto, puede ser expresada mediante la fórmula

$$\psi_f(\mathbf{x}) \longrightarrow \psi_{as}(\mathbf{x}) \propto \frac{\mathcal{A}(\vartheta)}{(2\pi)^{3/2}} \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (8.13)$$

y la densidad de probabilidad resulta igual a

$$j_r = \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \frac{d\psi_{as}^*(\mathbf{x})}{dr} \psi_{as}(\mathbf{x}) - \psi_{as}^*(\mathbf{x}) \frac{d\psi_{as}(\mathbf{x})}{dr} \right\} = \frac{\hbar k |\mathcal{A}(\vartheta)|^2}{m(2\pi)^3 r^2}$$

Gracias a lo anterior, el número  $dN_E$  de partículas dispersadas se expresará mediante la fórmula

$$dN_E = j_r dS = j_r r^2 d\Omega = \frac{\hbar k |\mathcal{A}(\vartheta)|^2 d\Omega}{m(2\pi)^3}$$

y la sección eficaz diferencial será igual a

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |\mathcal{A}(\vartheta)|^2 \quad (8.14)$$

En consecuencia, para encontrar la sección eficaz diferencial de la dispersión es suficiente encontrar la función  $\psi_f(\mathbf{x})$ , que describe las ondas dispersadas y tomar su comportamiento asintótico en el infinito. Todo ello se puede lograr empleando el método de las funciones de Green  $G(\vec{x}|\vec{x}')$ , que consiste en que la solución no homogénea de la ecuación (8.11) resulta expresada como la integral

$$\psi_f(\vec{x}) = \int G(\vec{x}|\vec{x}') \Phi(\vec{x}') d\vec{x}' \quad (8.15)$$



### 8.1.1. Función de Green de la ecuación de Schrödinger.

La **función de Green** de la ecuación de Schrödinger es la solución de la ecuación

$$\{\Delta + k^2\}G(\mathbf{x}|\mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (8.16)$$

Para encontrar la forma explícita de la función de Green, a la ecuación precedente se le multiplica por el operador  $[\Delta + k^2]^{-1}$ , después de lo cual se obtiene

$$G(\mathbf{x}|\mathbf{x}') = \{\Delta + k^2\}^{-1} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

y luego se reemplaza la función  $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$  por

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp [i\mathbf{q}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] d\mathbf{q}$$

Si se tiene en cuenta que

$$\{\Delta + k^2\}^{-1} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{\exp [i\mathbf{q}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] d\mathbf{q}}{k^2 - q^2}$$

la función de Green se expresará como

$$G(\mathbf{x}|\mathbf{x}') \equiv G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{\exp [i\mathbf{q}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] d\mathbf{q}}{k^2 - q^2}$$

La integración es preferible ejecutarla en coordenadas esféricas<sup>3</sup>, en las cuales se tiene

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty q^2 dq \int_0^{2\pi} d\varphi \int_\pi^0 \frac{\exp [iq|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \cos \vartheta]}{k^2 - q^2} d(\cos \vartheta)$$

razón por la cual se obtiene

$$G(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) = -\frac{i}{4\pi^2|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \int_{-\infty}^\infty q \frac{\exp [iq|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|]}{k^2 - q^2} dq \quad (8.17)$$

El integral obtenido se puede calcular mediante la teoría de residuos, para lo cual es necesario indicar cómo rodear los polos  $q = \pm k$ . Para obtener soluciones que describan ondas que salen del centro el contorno debe incluir el polo  $q = k$  y en caso contrario, el polo  $q = -k$ . En consecuencia, la función de Green resulta igual a

$$G_\pm(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) = -\frac{\exp [\pm ik|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|]}{4\pi|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \quad (8.18)$$

Por su parte, la solución de la ecuación de Schrödinger (8.11), correspondiente a ondas que salen del (ingresan al) centro, se expresará como

$$\psi_\pm(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{\exp [\pm ik|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|]}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} V(\mathbf{x}')\psi(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (8.19)$$

---

<sup>3</sup>En el espacio de los momentos  $\mathbf{q}$ .

### 8.1.2. Aproximación de Born

En la mayoría de casos se tiene que ver con potenciales de un radio de acción limitado a una zona de radio  $|\mathbf{x}'| = r' \leq d$ . Por lo tanto, para valores de  $|\mathbf{x}| = r \gg d$ , la distancia

$$\begin{aligned}
 |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| &= \left\{ r^2 - 2rr' \cos \alpha + r'^2 \right\}^{1/2} = r \left\{ 1 - 2\frac{r'}{r} \cos \alpha + \left(\frac{r'}{r}\right)^2 \right\}^{1/2} \\
 &\approx r \left\{ 1 - \frac{r'}{r} \cos \alpha \right\} = r - r' \cos \alpha \\
 &\approx r - \mathbf{x}' \cdot \mathbf{e}_x \quad \text{donde} \quad \mathbf{e}_x = \mathbf{x}/r
 \end{aligned} \tag{8.20}$$

debido a lo cual

$$e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \approx e^{\pm ikr} e^{\mp i\mathbf{x}' \cdot \mathbf{e}_x} = e^{\pm ikr} e^{\mp i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}'} \tag{8.21}$$

y

$$\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} = \frac{1}{r - r' \cos \alpha} \approx \frac{1}{r} \tag{8.22}$$

Por su parte, el vector de estado

$$\begin{aligned}
 \psi^\pm(\mathbf{x}) &= \phi(\mathbf{x}) - \frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int \frac{e^{\pm ikr} e^{\mp i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}'}}{r} V(\mathbf{x}') \psi^\pm(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \\
 &= \phi(\mathbf{x}) + \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{e^{\pm ikr}}{r} \mathcal{A}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')
 \end{aligned} \tag{8.23}$$

donde

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} (2\pi)^3 \int \frac{e^{\mp i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(\mathbf{x}') \psi^\pm(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \\
 &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} (2\pi)^3 \langle \mathbf{k} | V(\mathbf{x}') | \psi^\pm \rangle
 \end{aligned} \tag{8.24}$$

### 8.1.3. Primera aproximación de Born.

La ecuación obtenida es una ecuación integral y puede ser resuelta en un proceso iterativo de aproximaciones sucesivas. Como aproximación cero puede tomarse una onda plana, es decir

$$\Psi^\pm(\mathbf{x}') \longrightarrow \phi(\mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}'} \tag{8.25}$$

por lo tanto

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} (2\pi)^3 \int \frac{e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(\mathbf{x}') \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'}}{(2\pi)^{3/2}} d\mathbf{x}' \\
 &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \\
 &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') d\mathbf{x}'
 \end{aligned} \tag{8.26}$$

donde el vector  $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ .

Si se trata de un potencial con simetría esférica, es decir si  $V(\mathbf{x}') = V(r')$ , entonces

$$\begin{aligned}
 f^{(1)}(\vartheta) &= -\frac{m}{\hbar^2} \int r'^2 V(r') dr' \int e^{iqr' \cos \vartheta} \text{sen} \vartheta d\vartheta \\
 &= \frac{m}{\hbar^2} \int \frac{e^{iqr'} - e^{-iqr'}}{iqr} V(r') r'^2 dr' \\
 &= \frac{2m}{q\hbar^2} \int_0^\infty r' V(r') \text{sen} qr' dr'
 \end{aligned} \tag{8.27}$$

Para determinar los límites de aplicación de la primera aproximación de Born hay que recordar que la ecuación

$$\psi^\pm(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x}) - \frac{2m}{\hbar^2} \int \frac{e^{k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} V(\mathbf{x}') \psi^\pm(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \tag{8.28}$$

fue aproximada mediante la relación

$$\psi^\pm(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x}) - \frac{2m}{\hbar^2} \int \frac{e^{k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} V(\mathbf{x}') e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'} d\mathbf{x}' \tag{8.29}$$

y esto es posible sólo si el segundo término es muy pequeño en comparación con el primero, es decir si

$$\left| \frac{2m}{\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} V(\mathbf{x}') e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'} d\mathbf{x}' \right| \ll 1 \tag{8.30}$$

relación que, calculada en el centro del potencial dispersor, se transforma en

$$\left| \frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ikr'} V(\mathbf{x}') e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'} }{r'} d\mathbf{x}' \right| \ll 1 \tag{8.31}$$

Si la energía de las partículas incidentes es pequeña, es decir si  $kd \ll 1$ , donde  $d$  es el radio de acción del potencial, entonces la exponencial  $e^{i(kr'+\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}')} \approx 1$  debido a lo cual la relación anterior se transforma en

$$\left| \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{V(\mathbf{x}')}{r'} d\mathbf{x}' \right| \ll 1 \quad (8.32)$$

Por otro lado, si el potencial es esférico, es decir depende sólo del módulo de  $\mathbf{x}'$  se tendrá

$$\left| \frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int \frac{V(r')}{r'} e^{kr'} r'^2 dr' \int e^{ik'r' \cos \vartheta} d \cos \vartheta \right| \ll 1 \quad (8.33)$$

$$\left| m \int V(r') \{e^{i2kr'} - 1\} dr' \right| \ll k\hbar^2$$

Finalmente, si la energía de las partículas iniciales es muy grande, es decir si  $kd \gg 1$ , la exponencial de la fórmula anterior  $e^{i2kr'} \rightarrow 0$  y ésta se transforma en

$$\left| m \int V(r') dr' \right| \ll k\hbar^2 \quad (8.34)$$

## 8.2. Solución formal de la ecuación de Schrödinger.

Formalmente, la solución de la ecuación de Schrödinger para la dispersión puede ser expresada como

$$|\psi\rangle = \frac{1}{E - \hat{K}} \hat{V}|\psi\rangle + |\mathbf{k}\rangle \quad (8.35)$$

expresión en la cual está presente el operador singular  $(E - \hat{K})^{-1}$ .

Para superar esta dificultad al denominador del mencionado operador se le agrega una pequeña cantidad imaginaria con lo cual la energía resulta compleja. En consecuencia

$$|\psi^\pm\rangle = \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} \hat{V}|\psi^\pm\rangle + |\mathbf{k}\rangle \quad (8.36)$$

gracias a lo cual, en la representación de coordenadas la solución de la ecuación de Schrödinger tendrá la forma

$$\langle \mathbf{x}|\psi^\pm\rangle = \langle \mathbf{x}|\frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon}|\mathbf{x}'\rangle \hat{V}|\psi^\pm\rangle + \langle \mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle \quad (8.37)$$

la cual puede ser expresada

$$\langle \mathbf{x}|\psi^\pm\rangle = \int \langle \mathbf{x}|\frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon}|\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'|\hat{V}|\psi^\pm\rangle d\mathbf{x} + \langle \mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle \quad (8.38)$$

Para determinar la forma explícita de la solución es conveniente transformar el núcleo del operador integral

$$K^\pm(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \equiv \langle \mathbf{x} | \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} | \mathbf{x}' \rangle \quad (8.39)$$

el cual puede ser expresado como

$$\begin{aligned} K^\pm(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \int \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} | \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p}' | \mathbf{x}' \rangle d\mathbf{p} d\mathbf{p}' \\ &= \int \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle K^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \langle \mathbf{p}' | \mathbf{x}' \rangle d\mathbf{p} d\mathbf{p}' \end{aligned} \quad (8.40)$$

Si se tiene en cuenta que el vector  $\langle \mathbf{p} |$  es vector propio del operador  $\hat{K}$ , se tendrá

$$\begin{aligned} K^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{p}') &= \langle \mathbf{p} | \frac{1}{E - (\mathbf{p}^2/2m) \pm i\varepsilon} | \mathbf{p}' \rangle \\ &= \frac{\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')}{E - (\mathbf{p}^2/2m) \pm i\varepsilon} \end{aligned} \quad (8.41)$$

gracias a lo cual

$$K^\pm(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \int \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \times \frac{\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')}{E - (\mathbf{p}^2/2m) \pm i\varepsilon} \times \frac{e^{-i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}'/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} d\mathbf{p} d\mathbf{p}' \quad (8.42)$$

de donde se obtiene

$$K^\pm(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \int \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar}}{[E - (\mathbf{p}^2/2m) \pm i\varepsilon]} d\mathbf{p} \quad (8.43)$$

La integración se puede ejecutar en coordenadas esféricas. En efecto, si  $E = \hbar^2 k^2/2m$ ,  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{q}$  y  $\varepsilon = \hbar^2\sigma/2m$ , se tendrá

$$K^\pm(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{2m}{(2\pi)^3 \hbar^2} \int_0^\infty q^2 dq \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 \frac{\exp(i|\mathbf{q}|\cdot|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|\cos\vartheta)}{k^2 - q^2 \pm i\sigma} d(\cos\vartheta) \quad (8.44)$$

y después de integrar sobre las variables angulares

$$K^\pm(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{i}{8\pi^2} \frac{2m}{\hbar^2 |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} - e^{-iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{q^2 - k^2 \mp i\sigma} q dq \quad (8.45)$$

Después de aplicar el método de los residuos y hacer que  $\sigma \rightarrow 0$  se obtiene

$$K^\pm(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \frac{e^{\pm k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \quad (8.46)$$

expresión que es proporcional a la función de Green

$$G^\pm(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \quad (8.47)$$

y

$$\langle \mathbf{x} | \psi^\pm \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int \frac{e^{\pm k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \langle \mathbf{x}' | \hat{V} | \psi^\pm \rangle d\mathbf{x}' \quad (8.48)$$

Usualmente el potencial es una función de las coordenadas gracias a lo cual

$$\langle \mathbf{x}' | \hat{V} | \psi^\pm \rangle = \int \langle \mathbf{x}' | V(\mathbf{x}') | \mathbf{x}'' \rangle \langle \mathbf{x}'' | \psi^\pm \rangle d\mathbf{x}'' = V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^\pm \rangle \quad (8.49)$$

y la solución de la ecuación de Schrödinger se expresará como

$$\langle \mathbf{x} | \psi^\pm \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{\pm k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^\pm \rangle d\mathbf{x}' \quad (8.50)$$

### 8.2.1. Aproximaciones de Born de orden superior

La ecuación exacta cuya solución es el vector que describe la evolución de las partículas sometidas a la acción de un potencial dispersor

$$|\psi^\pm\rangle = \frac{1}{E - \hat{K}} \hat{V} |\psi^\pm\rangle + |\mathbf{k}\rangle \quad (8.51)$$

o la ecuación alternativa planteada para evitar el problema de un operador singular

$$|\psi^\pm\rangle = \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} \hat{V} |\psi^\pm\rangle + |\mathbf{k}\rangle \quad (8.52)$$

puede ser resuelta mediante un proceso iterativo de aproximaciones sucesivas. La idea fundamental de dicho proceso es postular que

$$\hat{V} |\psi^\pm\rangle = \hat{T} |\mathbf{k}\rangle \quad (8.53)$$

es decir que la acción del potencial dispersor sobre el vector de estado puede ser expresada como resultado de la acción de un operador  $\hat{T}$  sobre el vector que describe el estado inicial. Entonces la amplitud de la dispersión (8.24) se expresará como

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \langle \mathbf{k}' | \hat{T} | \mathbf{k} \rangle = \mathcal{A}(\mathbf{k}' | \hat{T} | \mathbf{k}) \quad (8.54)$$

donde  $\mathcal{A} = -4\pi^2 m / \hbar^2$ .

Por otro lado, si la ecuación exacta es multiplicada por  $\hat{V}$  desde la izquierda

$$\hat{V} |\psi^\pm\rangle = \hat{V} |\mathbf{k}\rangle + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} \hat{V} |\psi^\pm\rangle \quad (8.55)$$

este resultado puede ser expresado como

$$\hat{T}|\mathbf{k}\rangle = \hat{V}|\mathbf{k}\rangle + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} \hat{T}|\mathbf{k}\rangle \quad (8.56)$$

En consecuencia, la ecuación para los vectores de estado puede ser reemplazada por una relación para el operador  $\hat{T}$

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} \hat{T} \quad (8.57)$$

La forma del operador  $\hat{T}$  puede ser aproximada sucesivamente. Si como primera aproximación se tomara el operador de la energía potencial  $\hat{T}^{(0)} = \hat{V}$  se tendría

$$\hat{T}^{(1)} = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} \hat{V} \quad (8.58)$$

y si esta aproximación se reemplazara en la ecuación exacta para el operador  $\hat{T}$  se obtendrá

$$\hat{T}^{(2)} = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} \hat{V} \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} \hat{V} \quad (8.59)$$

En el límite se tendrá

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} \hat{V} \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} \hat{V} + \dots \quad (8.60)$$

y

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \mathcal{A} \langle \mathbf{k}' | \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} \hat{V} \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} \hat{V} + \dots | \mathbf{k} \rangle \quad (8.61)$$

es decir

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{n=0}^{\infty} f^{(n)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (8.62)$$

donde

$$f^{(n)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \hat{V} \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} \hat{V} \dots \hat{V} \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} \hat{V} \quad (8.63)$$

Así,

$$f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \mathcal{A} \langle \mathbf{k}' | \hat{V} | \mathbf{k} \rangle, \quad (8.64)$$

coincidente con lo obtenido en la sección anterior, y

$$f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \mathcal{A} \langle \mathbf{k}' | \hat{V} \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} \hat{V} | \mathbf{k} \rangle \quad (8.65)$$

Expresado a través de funciones de las coordenadas, la segunda aproximación tendrá la forma

$$f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \mathcal{A} \int \langle \mathbf{k}' | \mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x}' | \hat{V} | \mathbf{x}'' \rangle \langle \mathbf{x}'' | \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} | \mathbf{x}''' \rangle \langle \mathbf{x}''' | \hat{V} | \mathbf{x}'''' \rangle \langle \mathbf{x}'''' | \mathbf{k} \rangle d\mathbf{x}' d\mathbf{x}'' d\mathbf{x}''' d\mathbf{x}''''$$

de tal modo que cuando el operador  $\hat{V}$  actúa sobre el vector  $|\mathbf{x}''\rangle$  se obtiene

$$f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \mathcal{A} \int \langle \mathbf{k}' | \mathbf{x}' \rangle V(\mathbf{x}'') \langle \mathbf{x}' | \mathbf{x}'' \rangle \langle \mathbf{x}'' | \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} | \mathbf{x}''' \rangle V(\mathbf{x}''') \langle \mathbf{x}''' | \mathbf{x}'''' \rangle \langle \mathbf{x}'''' | \mathbf{k} \rangle d\mathbf{x}' d\mathbf{x}'' d\mathbf{x}''' d\mathbf{x}''''$$

Si se tiene en cuenta las condiciones de ortonormalidad de los vectores  $|\mathbf{x}\rangle$  la expresión precedente se expresará como

$$f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \mathcal{A} \int \langle \mathbf{k}' | \mathbf{x}' \rangle V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} | \mathbf{x}''' \rangle V(\mathbf{x}''') \langle \mathbf{x}''' | \mathbf{k} \rangle d\mathbf{x}' d\mathbf{x}'''$$

o también

$$f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') K^\pm(\mathbf{x}', \mathbf{x}''') V(\mathbf{x}''') e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}'''} d\mathbf{x}' d\mathbf{x}''' \quad (8.66)$$

donde

$$K^\pm(\mathbf{x}', \mathbf{x}''') = \langle \mathbf{x}' | \frac{1}{E - \hat{K} \pm i\varepsilon} | \mathbf{x}''' \rangle$$

### 8.3. Método de ondas parciales

Cuando el potencial dispersor posee simetría esférica, el momento angular y su proyección en una determinada dirección son magnitudes físicas que se conservan conjuntamente con la energía. Por tal razón, en potenciales de este tipo, la dispersión de haces de partículas con valor definido del momento lineal  $\mathbf{p}$ , que no es otra cosa que el movimiento de partículas con todos los posibles valores del momento angular, es tal que cada partícula conserva su momento angular. En consecuencia, es lícito asumir que partículas con momento angular definido se dispersarán de manera particular y la dispersión del haz completo puede ser expresada como la suma de las dispersiones de grupos de partículas con valor definido del momento orbital.

#### 8.3.1. Ecuación de Schrödinger en coordenadas esféricas.

Cuando el potencial es de carácter central las soluciones de la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}) + V(r) \psi(\mathbf{x}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi(\mathbf{x})$$

se expresan como

$$\Psi(\mathbf{x}) = R_{k,\ell}(r) Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) = \frac{u_{k,\ell}(r)}{r} Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) \quad (8.67)$$

donde  $Y_{\ell m}$  son los armónicos esféricos

$$Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m)!}} P_\ell^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (8.68)$$



Como el flujo incidente tiene simetría axial, la dependencia con respecto al ángulo azimutal  $\varphi$  desaparece lo que significa que en las soluciones sólo pueden estar presentes los armónicos esféricos con  $m = 0$ , cuya fórmula es

$$Y_{\ell 0}(\vartheta) = \sqrt{\frac{(2\ell + 1)}{4\pi}} P_{\ell}(\cos \vartheta) \quad (8.69)$$

Para valores grandes de  $r$ , tales que el potencial dispersor resulta despreciable, la ecuación radial

$$\left\{ -\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V(r) - k^2 \right\} R_{k,\ell}(r) \quad (8.70)$$

se reduce a la ecuación para las funciones esféricas de Bessel. En este caso, la función radial  $R_{k,\ell}$  se expresará como

$$R_{k,\ell}(r) = \frac{u_{k,\ell}(r)}{r} = A_{\ell} j_{\ell}(kr) + B_{\ell} n_{\ell}(kr) \quad (8.71)$$

y, si usamos las aproximaciones asintóticas de las funciones esféricas de Bessel y Neumann, tendremos que

$$R_{\ell}^{as}(r) = \frac{u_{k,\ell}(r)}{r} \cong A_{\ell} \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right) - B_{\ell} \cos\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right) \quad (8.72)$$

Si el potencial dispersor fuera nulo en todas partes, la condición de frontera en el origen  $u_{k,\ell}(r)$  excluiría la solución irregular  $n_{\ell}$ , lo que significaría que  $B_{\ell}$  debe ser cero en todas partes. Pero el potencial puede ser considerable para distancias  $r$  no tan grandes, debido a lo cual  $B_{\ell}$  no será nulo y su relación con  $A_{\ell}$ , en particular la razón  $B_{\ell}/A_{\ell}$ , resultará una medida de la intensidad de la interacción.

Este valor debe ser determinado resolviendo la ecuación de Schrödinger dentro de la región de dispersión, con la condición de contorno en el origen, e igualando las soluciones interiores con las exteriores para  $r = a$ . Pero, en general puede ser usado como un parámetro de la dispersión, del que depende, en particular, la sección eficaz.

Para todo potencial real, la función radial debe ser real y con ella, los coeficientes  $B_{\ell}$  y  $A_{\ell}$ . Por eso podemos definir el parámetro  $\delta_{\ell}$

$$B_{\ell}/A_{\ell} = -\tan \delta_{\ell} \quad (8.73)$$

de tal modo que

$$R_{\ell}^{as}(r) = \frac{u_{k,\ell}(r)}{r} \cong C_{\ell} \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_{\ell}\right) \quad (8.74)$$

que, en forma exponencial, adopta la forma

$$R_{\ell}^{as}(r) \cong C_{\ell} \left\{ \frac{e^{i(kr - \ell\pi/2 + \delta_{\ell})} - e^{-i(kr - \ell\pi/2 + \delta_{\ell})}}{2i} \right\} = C_{\ell} \left\{ \frac{(-i)^{\ell} e^{i\delta_{\ell}} e^{ikr}}{2i} - e^{-i\delta_{\ell}} \frac{e^{-i(kr - \ell\pi/2)}}{2i} \right\} \quad (8.75)$$

En consecuencia, la función de onda en el infinito tendrá la forma

$$\Psi_{as}(r, \vartheta) = \sum_{\ell} \mathcal{A}_{\ell} Y_{\ell 0}(\vartheta) \left\{ \frac{(-i)^{\ell} e^{i\delta_{\ell}} e^{ikr}}{2ikr} - e^{-i\delta_{\ell}} \frac{e^{-i(kr-\ell\pi/2)}}{2ikr} \right\} \quad (8.76)$$

o también

$$\Psi_{as}(r, \vartheta) = \left\{ \sum_{\ell} \frac{(-i)^{\ell} \mathcal{A}_{\ell} Y_{\ell 0}(\vartheta) e^{i\delta_{\ell}}}{2ik} \right\} \frac{e^{ikr}}{r} - \sum_{\ell} \left\{ \mathcal{A}_{\ell} Y_{\ell 0}(\vartheta) e^{-i\delta_{\ell}} \right\} \frac{e^{-i(kr-\ell\pi/2)}}{2ikr} \quad (8.77)$$

Como se ha mencionado anteriormente, la función final (la que describe el sistema después de la dispersión) debe contener una parte relacionada con las partículas incidentes y otra que representa el movimiento de las partículas dispersadas, es decir

$$\Psi(r, \vartheta) = e^{ikz} + f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (8.78)$$

y debe ser equivalente a la función  $\Psi_{as}$  obtenida al analizar el comportamiento de la ecuación de Schrödinger en el infinito.

Para poder comparar ambas expresiones es necesario recordar que

$$e^{ikz} = \sum_{\ell} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} i^{\ell} j_{\ell}(kr) Y_{\ell 0}(\vartheta) \quad (8.79)$$

y que en el infinito

$$j_{\ell}(kr) \longrightarrow \frac{\text{sen}(kr - \ell\pi/2)}{kr} = \frac{e^{i(kr-\ell\pi/2)}}{2ikr} - \frac{e^{-i(kr-\ell\pi/2)}}{2ikr} \quad (8.80)$$

debido a lo cual

$$\begin{aligned} e^{ikz} &= \sum_{\ell} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} i^{\ell} \left\{ \frac{e^{i(kr-\ell\pi/2)}}{2ikr} - \frac{e^{-i(kr-\ell\pi/2)}}{2ikr} \right\} Y_{\ell 0}(\vartheta) \\ &= \sum_{\ell} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} \left\{ \frac{e^{ikr}}{2ikr} - i^{\ell} \frac{e^{-i(kr-\ell\pi/2)}}{2ikr} \right\} Y_{\ell 0}(\vartheta) \end{aligned} \quad (8.81)$$

Por lo tanto,

$$\Psi(r, \vartheta) = \sum_{\ell} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} \left\{ \frac{e^{ikr}}{2ikr} - i^{\ell} \frac{e^{-i(kr-\ell\pi/2)}}{2ikr} \right\} Y_{\ell 0} + f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (8.82)$$

es decir

$$\Psi(r, \vartheta) = \left\{ \sum_{\ell} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} \frac{Y_{\ell 0}(\vartheta)}{2ik} + f(\vartheta) \right\} \frac{e^{ikr}}{r} - \sum_{\ell} \left\{ i^{\ell} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} Y_{\ell 0}(\vartheta) \right\} \frac{e^{-i(kr-\ell\pi/2)}}{2ikr} \quad (8.83)$$

Como las dos expresiones que representan la función de onda deben ser equivalentes y las exponenciales positivas y negativas son independientes, de la comparación de los coeficientes que acompañan a estas últimas se puede deducir que

$$\mathcal{A}_\ell = i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell + 1)} e^{i\delta_\ell} \quad (8.84)$$

de tal modo que al comparar los coeficientes de las exponenciales positivas se tendrá

$$\sum_\ell \sqrt{4\pi(2\ell + 1)} \frac{Y_{\ell 0}}{2ik} + f(\vartheta) = \sum_\ell \left\{ \frac{(-i)^\ell Y_{\ell 0}(\vartheta) e^{i\delta_\ell}}{2ik} \right\} \quad (8.85)$$

de donde se obtiene

$$f(\vartheta) = \frac{\sqrt{4\pi}}{2ik} \sum_\ell \sqrt{2\ell + 1} (e^{2i\delta_\ell} - 1) Y_{\ell 0}(\vartheta) \quad (8.86)$$

es decir

$$f(\vartheta) = \frac{\sqrt{4\pi}}{k} \sum_\ell \sqrt{2\ell + 1} e^{i\delta_\ell} \text{sen} \delta_\ell Y_{\ell 0}(\vartheta) \quad (8.87)$$

En consecuencia, la sección eficaz diferencial será igual a

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\pi}{k^2} \left| \sum_\ell \sqrt{2\ell + 1} e^{i\delta_\ell} \text{sen} \delta_\ell Y_{\ell 0}(\vartheta) \right|^2 \quad (8.88)$$

y la sección eficaz total se expresará como

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell, \ell'} \sqrt{(2\ell + 1)(2\ell' + 1)} e^{i(\delta_\ell - \delta_{\ell'})} \text{sen} \delta_\ell \text{sen} \delta_{\ell'} \int Y_{\ell 0}(\vartheta) Y_{\ell' 0}(\vartheta) d\Omega \quad (8.89)$$

Como los armónicos esféricos son ortonormalizados, la integral sobre el ángulo sólido es igual a  $\delta_{\ell\ell'}$ , debido a lo cual una de las sumatorias desaparece y la sección eficaz total resulta igual a

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_\ell (2\ell + 1) \text{sen}^2 \delta_\ell \quad (8.90)$$

Veamos ahora cómo se determinan los coeficientes  $\delta_\ell$ .

## 8.4. Desarrollo de una onda plana en armónicos esféricos

El hamiltoniano que describe el movimiento antes de la interacción, es decir, el de una partícula libre, conmuta con el operador del momento lineal  $\hat{\mathbf{p}}$ . Debido a ello, los vectores propios del operador de la energía son los vectores propios del momento lineal; así que, en la representación de coordenadas, los haces de partículas libres pueden ser descritas en la base de los vectores del momento lineal  $|\mathbf{k}\rangle$ , cuya normalización es

$$\langle \mathbf{k}' | \mathbf{k} \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (8.91)$$

Por otro lado, si el potencial tiene simetría esférica, el hamiltoniano del sistema conmuta con los operadores del momento orbital  $\hat{\mathbf{l}}^2$  y de su componente  $\hat{l}_z$ . En consecuencia, los estados antes y después de la interacción pueden ser descritos en la base de los vectores propios del hamiltoniano, el operador del momento orbital y el de su componente  $|E, \ell, m\rangle$ , los cuales usualmente son normalizados como

$$\langle E', \ell', m' | E, \ell, m \rangle = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \delta(E - E') \quad (8.92)$$

Por eso, es conveniente deducir la forma de la función  $\langle \mathbf{k} | E, \ell, m \rangle$  que conecta ambas bases

$$|\mathbf{k}\rangle = \sum_{\ell, m} \int |E, \ell, m\rangle \langle E, \ell, m | \mathbf{k} \rangle dE, \quad (8.93)$$

la cual, como se verá luego, debe tener una forma análoga a la función  $\langle \mathbf{x} | E, \ell, m \rangle$

$$\langle \mathbf{x} | E, \ell, m \rangle = \frac{i^\ell}{\hbar} \sqrt{\frac{2mk}{\pi}} j_\ell(kr) Y_{\ell m}(\mathbf{x}/r) \quad (8.94)$$

que permite pasar de la representación de coordenadas a la del momento orbital

$$|\mathbf{x}\rangle = \sum_{\ell, m} \int |E, \ell, m\rangle \langle E, \ell, m | \mathbf{x} \rangle dE \quad (8.95)$$

Por lo tanto,

$$\langle \mathbf{k} | E, \ell, m \rangle \propto Y_{\ell m}(\mathbf{k}/k) \quad \text{es decir} \quad \langle \mathbf{k} | E, \ell, m \rangle = G_{\ell E} Y_{\ell m}(\mathbf{k}/k) \quad (8.96)$$

con un coeficiente  $G_{\ell E}$  que debe ser definido.

Si como eje  $z$  se toma el sentido del haz de partículas incidentes,  $\mathbf{k}$  puede ser expresado como  $k\mathbf{e}_z$  y

$$|\mathbf{k}\rangle = |k\mathbf{e}_z\rangle = \sum_{\ell', m'} \int dE' |E', \ell', m'\rangle \langle E', \ell', m' | k\mathbf{e}_z \rangle \quad (8.97)$$

donde, la suma sobre  $m'$  tiene que limitarse a  $m' = 0$ , ya que éste es el único valor propio de  $\hat{l}_z$  en el estado  $|k\mathbf{e}_z\rangle$ . En efecto,

$$\hat{l}_z |k\mathbf{e}_z\rangle = (x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) |k_x = k_y = 0, k_z = k\rangle = 0 \quad (8.98)$$

lo que significa que

$$\langle E', \ell', m'_z | \hat{l}_z | k\mathbf{e}_z \rangle = m \langle E', \ell', m'_z | k\mathbf{e}_z \rangle = 0 \quad (8.99)$$

es decir que

$$\langle E', \ell', m'_z | k\mathbf{e}_z \rangle = 0 \quad \text{si} \quad m \neq 0 \quad (8.100)$$

por lo tanto,

$$|k\mathbf{e}_z\rangle = \sum_{\ell'} \int dE' |E', \ell', m' = 0\rangle \langle E', \ell', m' = 0 | k\mathbf{e}_z \rangle \quad (8.101)$$

Por otro lado, un vector  $\mathbf{k}$  orientado arbitrariamente se puede obtener como resultado de una rotación de  $\mathbf{k} = k\mathbf{e}_z$  debida a la acción del operador  $\mathcal{D}(\alpha = \varphi, \beta = \vartheta, \gamma = 0)$ . Por tal razón,

$$\begin{aligned} \langle E, \ell, m | \mathbf{k} \rangle &= \sum_{\ell'} \int dE' \langle E, \ell, m | \mathcal{D}(\varphi, \vartheta, 0) | E', \ell', m' = 0 \rangle \langle E', \ell', m' = 0 | k\mathbf{e}_z \rangle \\ &= \sum_{\ell'} \int dE' \mathcal{D}(\varphi, \vartheta, 0) \delta_{\ell, \ell'} \delta(E - E') \langle E', \ell', m' = 0 | k\mathbf{e}_z \rangle \\ &= \mathcal{D}(\varphi, \vartheta, 0) \langle E, \ell, m = 0 | k\mathbf{e}_z \rangle \end{aligned} \quad (8.102)$$

La acción del operador de rotación  $\mathcal{D}(\varphi, \vartheta, 0)$  se puede expresar a través de los armónicos esféricos. En efecto, cualquier vector unitario orientado en sentido arbitrario puede ser obtenido mediante la rotación de un vector unitario orientado en el sentido del eje  $z$ , es decir

$$|\mathbf{e}\rangle = \mathcal{D}(\varphi, \vartheta, 0) |\mathbf{e}_z\rangle \quad \longrightarrow \quad |\mathbf{e}\rangle = \sum_{\ell, m} \mathcal{D}(\varphi, \vartheta, 0) |\ell, m\rangle \langle \ell, m | \mathbf{e}_z \rangle \quad (8.103)$$

por lo tanto

$$\langle \ell', m' | \mathbf{e} \rangle = \sum_{\ell, m} \langle \ell', m' | \mathcal{D}(\varphi, \vartheta, 0) | \ell, m \rangle \langle \ell, m | \mathbf{e}_z \rangle = \sum_{\ell, m} \mathcal{D}_{m', m}^{(\ell')}(\varphi, \vartheta, 0) \delta_{\ell, \ell'} \langle \ell, m | \mathbf{e}_z \rangle \quad (8.104)$$

es decir

$$\langle \ell', m' | \mathbf{e} \rangle = \sum_m \mathcal{D}_{m', m}^{(\ell')}(\varphi, \vartheta, 0) \langle \ell, m | \mathbf{e}_z \rangle \quad (8.105)$$

Como las funciones

$$\langle \ell, m | \mathbf{e}_z \rangle = Y_{\ell, m}(\vartheta, \varphi) \Big|_{\substack{m=0 \\ \vartheta=0}} \quad \text{y} \quad \langle \ell', m' | \mathbf{e} \rangle = Y_{\ell', m'}(\vartheta, \varphi) \quad (8.106)$$

entonces

$$Y_{\ell', m'}^*(\vartheta, \varphi) = \sum_m \mathcal{D}_{m', m}^{(\ell')}(\varphi, \vartheta, 0) \left[ Y_{\ell, m}^*(\vartheta, \varphi) \Big|_{\substack{m=0 \\ \vartheta=0}} \right] = \mathcal{D}_{m', m}^{(\ell')}(\varphi, \vartheta, 0) \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_{\ell}(\cos \vartheta) \Big|_{\vartheta=0} \quad (8.107)$$

de donde

$$Y_{\ell', m'}^*(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \mathcal{D}_{m', o}^{(\ell')}(\varphi, \vartheta, 0) \quad (8.108)$$

es decir

$$\mathcal{D}_{m', o}^{(\ell')}(\varphi, \vartheta, 0) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_{\ell m}^*(\varphi, \vartheta) \quad (8.109)$$

Finalmente,  $\langle E, \ell, m = 0 | k\mathbf{e}_z \rangle$  no depende de los ángulos  $\vartheta$  y  $\varphi$ , gracias a lo cual puede ser expresado a través de una función del módulo de  $\mathbf{k}$ , es decir

$$\langle E, \ell, m = 0 | k\mathbf{e}_z \rangle = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} G_{\ell E}^*(k) \quad (8.110)$$

por lo tanto,

$$\langle E, \ell, m | \mathbf{k} \rangle = G_{\ell E}(k)^* Y_{\ell m}^*(\mathbf{k}/k) \quad (8.111)$$

La función  $G_{\ell E}(k)$  puede ser determinada si se tiene en cuenta que los vectores  $|E, \ell, m\rangle$  son vectores propios del operador de la energía, es decir satisfacen la relación

$$(\hat{K} - E)|E, \ell, m\rangle = 0 \quad (8.112)$$

que al ser multiplicada por  $\langle \mathbf{k} |$  desde la izquierda se transforma en

$$\langle \mathbf{k} | (\hat{K} - E) | E, \ell, m \rangle = 0 \quad (8.113)$$

Después de la acción de los operadores  $\hat{K} - E$  sobre el vector  $\langle \mathbf{k} |$  la ecuación anterior resulta igual a

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) \langle \mathbf{k} | E, \ell, m \rangle = 0 \quad (8.114)$$

de donde se deduce que

$$\langle \mathbf{k} | E, \ell, m \rangle \propto \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) \quad (8.115)$$

y, por lo tanto,

$$G_{\ell E}(k) = N \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) \quad (8.116)$$

El coeficiente  $N$  se puede calcular si se emplea la condición de normalización los vectores  $|E', \ell', m'\rangle$ . En efecto, la relación

$$\langle E', \ell', m' | E'', \ell'', m'' \rangle = \int d\mathbf{k} \langle E', \ell', m' | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | E'', \ell'', m'' \rangle = \delta(E' - E'') \delta_{m' m''} \delta_{\ell' \ell''} \quad (8.117)$$

resulta igual a

$$\begin{aligned} \langle E', \ell', m' | E'', \ell'', m'' \rangle &= N^2 \int d\mathbf{k} \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E'\right) Y_{\ell' m'}^*(\mathbf{k}/k) \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E''\right) Y_{\ell'' m''}(\mathbf{k}/k) \\ &= N^2 \int k^2 dk \int \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E'\right) Y_{\ell' m'}^*(\mathbf{k}/k) \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E''\right) Y_{\ell'' m''}(\mathbf{k}/k) d\Omega_k \\ &= N^2 \int \frac{k^2 dE}{dE/dk} \int \delta(E - E') Y_{\ell' m'}^*(\mathbf{k}/k) \delta(E - E'') Y_{\ell'' m''}(\mathbf{k}/k) d\Omega_k \\ &= N^2 \int Y_{\ell' m'}^*(\mathbf{k}/k) Y_{\ell'' m''}(\mathbf{k}/k) d\Omega_k \int \frac{mk}{\hbar^2} \delta(E - E') \delta(E - E'') dE \\ &= N^2 \frac{mk'}{\hbar^2} \delta(E' - E'') \delta_{\ell' \ell''} \delta_{m' m''} \end{aligned} \quad (8.118)$$

de donde se ve que  $N = \hbar/\sqrt{mk}$ .

Por lo tanto,

$$G_{\ell E}(k) = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) \quad (8.119)$$

y

$$\langle \mathbf{k} | E, \ell, m \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) Y_{\ell m}(\mathbf{k}/k) \quad (8.120)$$

relación que, efectivamente, es similar a

$$\langle \mathbf{x} | E, \ell, m \rangle = \frac{i^\ell}{\hbar} \sqrt{\frac{2mk}{\pi}} j_\ell(kr) Y_{\ell m}(\mathbf{k}/k) \quad (8.121)$$

En consecuencia, el vector  $|\mathbf{k}\rangle$  desarrollado sobre los vectores propios del momento orbital

$$|\mathbf{k}\rangle = \sum_{\ell, m} \int |E, \ell, m\rangle \langle E, \ell, m | \mathbf{k} \rangle dE \quad (8.122)$$

resulta igual a

$$\begin{aligned} |\mathbf{k}\rangle &= \sum_{\ell, m} \int |E, \ell, m\rangle \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) Y_{\ell m}^*(\mathbf{k}/k) dE \\ &= \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \sum_{\ell, m} Y_{\ell m}^*(\mathbf{k}/k) |E, \ell, m\rangle \Big|_{E=\hbar^2 k^2/2m} \end{aligned} \quad (8.123)$$

### 8.4.1. Amplitud de la dispersión en función de los valores del momento orbital

Si se emplea el desarrollo de  $|\mathbf{k}\rangle$  sobre los vectores propios del momento orbital, la amplitud de la dispersión

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \mathcal{A} \langle \mathbf{k}' | \hat{T} | \phi \rangle = \mathcal{A} \langle \mathbf{k}' | \hat{T} | \mathbf{k} \rangle \quad \text{donde} \quad \mathcal{A} = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \quad (8.124)$$

puede ser expresada como

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \mathcal{A} \sum_{\substack{\ell, m \\ \ell', m'}} \int dE dE' \langle \mathbf{k}' | E', \ell', m' \rangle \langle E', \ell', m' | \hat{T} | E \ell m \rangle \langle E \ell m | \mathbf{k} \rangle \quad (8.125)$$

La expresión anterior puede ser simplificada en caso de que el potencial dispersor tenga simetría esférica (que es el caso de la mayoría de los potenciales que describen interacciones reales). En efecto, de acuerdo con el teorema de Wigner-Eckart, los elementos de matriz de cualquier operador tensorial  $\langle \ell m | \mathcal{T}_{kq} | \ell' m' \rangle$  se calculan mediante la siguiente fórmula

$$\langle \ell m | \mathcal{T}_{kq} | \ell' m' \rangle = (-1)^{\ell-m} \langle \ell || \mathcal{T}_k || \ell' \rangle \begin{pmatrix} \ell & k & \ell' \\ -m & q & m' \end{pmatrix} \quad (8.126)$$

donde las matrices  $\langle \ell \parallel T_k \parallel \ell' \rangle$ , las cuales se denominan *elementos de la matriz reducida*, son iguales a

$$\langle \ell \parallel \mathcal{T}_k \parallel \ell' \rangle = (-1)^\ell \sqrt{\frac{(2\ell+1)(2k+1)(2\ell'+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} \ell & k & \ell' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (8.127)$$

debido a lo cual

$$\langle \ell m \parallel \mathcal{T}_{kq} \parallel \ell' m' \rangle = (-1)^m \sqrt{\frac{(2\ell+1)(2k+1)(2\ell'+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} \ell & k & \ell' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell & k & \ell' \\ -m & q & m' \end{pmatrix} \quad (8.128)$$

Las magnitudes representadas por los paréntesis son los *símbolos 3j de Wigner*. Los valores que toman cuando  $l, k, \ell', m, b$  y  $m'$  asumen diferentes valores, han sido tabulados y se pueden encontrar en diferentes fuentes. Sin embargo, no está demás señalar que tales coeficientes son diferentes de cero sólo si se cumplen simultáneamente las siguientes condiciones:

- Los índices superiores satisfacen la relación del triángulo  $\Delta(\ell, k, \ell')$ , la cual es una manera compacta de indicar que los posibles valores de uno de ellos, por ejemplo de  $\ell'$ , necesariamente tienen que estar entre  $\ell + k$  y  $|\ell - k|$ . Es decir

$$\ell' = \ell + k, \ell + k - 1, \dots, |\ell - k| \quad (8.129)$$

- La suma algebraica de sus índices inferiores es cero, es decir  $m' + q + m = 0$ .

En el caso particular del  $\hat{T}$ , éste es un operador escalar que depende de  $E$ . En consecuencia,  $\ell = m = 0$  y

$$\langle E', \ell' m' \parallel \hat{T} \parallel E \ell'' m'' \rangle = \langle E', \ell' \parallel \hat{T} \parallel E \ell \rangle \delta_{m', m''} = T_\ell(E) \delta_{\ell \ell'} \delta_{m m'} \quad (8.130)$$

Gracias a lo anterior, la amplitud de la dispersión resulta expresada como

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \mathcal{A} \sum_{\substack{\ell m \\ \ell' m'}} \int \frac{\hbar}{\sqrt{m k'}} \delta(E' - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}) Y_{\ell' m'}(\mathbf{k}'/k') T_\ell(E) \delta_{\ell \ell'} \delta_{m m'} \times \\ \times \frac{\hbar}{\sqrt{m k'}} \delta(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}) Y_{\ell m}^*(\mathbf{k}/k) dE dE' \quad (8.131)$$

expresión que resulta igual a

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{4\pi^2}{k} \sum_{\ell m} Y_{\ell m}^*(\mathbf{k}/k) Y_{\ell m}(\mathbf{k}'/k') T_\ell(E) \Big|_{E=\hbar^2 k^2/2m} \quad (8.132)$$

Si el sentido del vector  $\mathbf{k}$  se tomara como eje  $z$ , es decir si  $\mathbf{k} = k \mathbf{e}_z$ , entonces

$$Y_{\ell m}^*(\mathbf{k}/k) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \delta_{m0} \quad (8.133)$$



y

$$\begin{aligned}
 f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= -\frac{4\pi^2}{k} \sum_{\ell m} T_\ell(E) \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \delta_{m0} Y_{\ell m}(\mathbf{k}'/k') \\
 &= -\frac{4\pi^2}{k} \sum_{\ell} T_\ell(E) \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} Y_{\ell 0}(\mathbf{k}'/k')
 \end{aligned} \tag{8.134}$$

Por otro lado,

$$Y_{\ell 0}(\mathbf{k}'/k') = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell(\cos \vartheta) \tag{8.135}$$

debido a lo cual, la dependencia con respecto de  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{k}'$  resulta siendo una dependencia con respecto del ángulo entre dichos vectores ( $\vartheta$ ). Por lo tanto  $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = f(\vartheta)$  y

$$f(\vartheta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) f_\ell(k) P_\ell(\cos \vartheta) \quad \text{donde} \quad f_\ell(k) = \frac{\pi T_\ell(E)}{k} \tag{8.136}$$

El sentido físico de los coeficientes  $f_\ell(k)$  queda más claro si se analiza el comportamiento de las dos partes de la función de onda  $\langle \mathbf{x} | \psi^+ \rangle$  para valores muy grandes de  $r$ . En este caso, las funciones esféricas de Bessel pueden ser aproximadas mediante la relación

$$j_\ell(kr) \longrightarrow \frac{e^{i(kr-\ell\pi/2)} - e^{i(kr-\ell\pi/2)}}{2ikr}, \tag{8.137}$$

y la función

$$\langle \mathbf{x} | \psi^+ \rangle \longrightarrow \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[ e^{ikz} + f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} \right] \tag{8.138}$$

es decir

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{x} | \psi^+ \rangle &\longrightarrow \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[ \sum_{\ell} (2\ell+1) P_\ell(\cos \vartheta) \frac{e^{ikr} - e^{i(kr-\ell\pi/2)}}{2ikr} + \sum_{\ell} (2\ell+1) f_\ell(k) P_\ell(\cos \vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} \right] \\
 &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell} (2\ell+1) \frac{P_\ell(\cos \vartheta)}{2ik} \left[ \left( 1 + 2ik f_\ell(k) \right) \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-\ell\pi)}}{r} \right]
 \end{aligned} \tag{8.139}$$

en cambio

$$\frac{e^{ikz}}{(2\pi)^{3/2}} \longrightarrow \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell} (2\ell+1) \frac{P_\ell(\cos \vartheta)}{2ik} \left[ \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-\ell\pi)}}{r} \right] \tag{8.140}$$

Al comparar las dos últimas formulas se puede ver que, a diferencia de lo que sucede con el comportamiento de la función, que describe el estado en ausencia del potencial y consta de una onda esférica entrante  $e^{-i(kr-\ell\pi)}/r$  y una onda saliente  $e^{ikr}/r$ , ambas con el mismo coeficiente,

en la función del estado que aparece después de la acción de un potencial dispersor, la onda saliente está multiplicada por un factor  $1 + 2ikf_\ell(k)$ . En consecuencia, el potencial dispersor cambia el coeficiente de la onda saliente de

$$1 \longrightarrow 1 + 2ikf_\ell(k) \quad (8.141)$$

La forma de las funciones  $f_\ell(k)$  puede ser delimitada si se considera la ley de conservación de la probabilidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \mathbf{j} = 0, \quad \longrightarrow \quad \nabla \mathbf{j} = -\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial |\psi(\mathbf{x})|^2}{\partial t} \quad (8.142)$$

relación que al ser integrada sobre todo el volumen dará

$$\int \nabla \mathbf{j} d\mathbf{x} = \int \frac{\partial |\psi(\mathbf{x})|^2}{\partial t} d\mathbf{x} = \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \int |\psi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} \right\} = 0 \quad (8.143)$$

de donde se obtiene

$$\oint_{\Sigma} \mathbf{j} d\mathbf{S} = 0 \quad (8.144)$$

La fórmula anterior indica que el flujo que sale por la superficie es igual al que ingresa, igualdad que también es válida para las diferentes *ondas parciales*, es decir para las ondas componentes que se caracterizan por tener un valor definido  $\ell^4$ . Esto significa que los coeficientes de ambas ondas deben tener la misma magnitud (o módulo, si resultaran complejos), o sea que si se define la magnitud

$$S_\ell(k) \equiv 1 + 2ikf_\ell(k) \quad (8.145)$$

entonces

$$|S_\ell(k)| = 1, \quad \text{es decir,} \quad S_\ell(k) = e^{2i\delta_\ell(k)} \quad (8.146)$$

En este caso, las funciones  $f_\ell(k)$  se expresarán como

$$f_\ell(k) = \frac{S_\ell(k) - 1}{2ik} = \frac{e^{2i\delta_\ell} - 1}{2ik} = \frac{e^{i\delta_\ell} \text{sen} \delta_\ell}{k} \quad (8.147)$$

y la amplitud de la dispersión será igual a

$$\begin{aligned} f(\vartheta) &= \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \frac{e^{2i\delta_\ell(k)} - 1}{2ik} P_\ell(\cos \vartheta) \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \frac{e^{i\delta_\ell} \text{sen} \delta_\ell}{k} P_\ell(\cos \vartheta) \end{aligned} \quad (8.148)$$

La sección eficaz diferencial tendrá la forma

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_{\ell, \ell'} (2\ell + 1) \frac{e^{-i\delta_\ell} \text{sen} \delta_\ell}{k} (2\ell' + 1) \frac{e^{i\delta_{\ell'}} \text{sen} \delta_{\ell'}}{k} P_\ell(\cos \vartheta) P_{\ell'}(\cos \vartheta) \quad (8.149)$$

---

<sup>4</sup>Debido a la ley de conservación del momento orbital.

y la sección eficaz total

$$\begin{aligned} \sigma &= \int \left\{ \sum_{\ell, \ell'} (2\ell + 1) \frac{e^{-i\delta_\ell} \text{sen} \delta_\ell}{k} (2\ell' + 1) \frac{e^{i\delta_{\ell'}} \text{sen} \delta_{\ell'}}{k} P_\ell(\cos \vartheta) P_{\ell'}(\cos \vartheta) \right\} d\Omega \\ &= \sum_{\ell, \ell'} (2\ell + 1) \frac{e^{-i\delta_\ell} \text{sen} \delta_\ell}{k} (2\ell' + 1) \frac{e^{i\delta_{\ell'}} \text{sen} \delta_{\ell'}}{k} \int P_\ell(\cos \vartheta) P_{\ell'}(\cos \vartheta) d\Omega \end{aligned} \quad (8.150)$$

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell, \ell'} (2\ell + 1) e^{-i\delta_\ell} \text{sen} \delta_\ell (2\ell' + 1) e^{i\delta_{\ell'}} \text{sen} \delta_{\ell'} \delta_{\ell, \ell'} \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \text{sen}^2 \delta_\ell \end{aligned} \quad (8.151)$$

# Capítulo 9

## Métodos aproximados en la Mecánica Cuántica

En la Mecánica Cuántica son muy pocos los sistemas cuyos vectores y valores propios pueden ser determinados analíticamente; en la gran mayoría de los casos resolver las ecuaciones diferenciales correspondientes resulta o imposible o sumamente complicado. En tales casos las soluciones se buscan empleando métodos que permiten expresarlas con cierto grado de aproximación.

Entre los métodos aproximados más empleados se puede señalar la teoría de perturbaciones, tanto estacionarias como dependientes de  $t$ , y el método variacional. Todos estos métodos serán analizados seguidamente.

### 9.1. Teoría de perturbaciones estacionarias

Hay casos en los cuales el hamiltoniano de un sistema puede ser expresado como la suma de dos términos

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' \quad (9.1)$$

donde  $\hat{H}_0$  coincide con el hamiltoniano de un sistema cuyos vectores propios  $|n_0\rangle$  y valores propios  $\mathcal{E}_n$  se conocen con exactitud y  $\hat{H}'$  es un término considerablemente más pequeño que el anterior<sup>1</sup>.

En tal caso, las soluciones de la ecuación para los valores propios del operador completo  $\hat{H}$

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (9.2)$$

pueden ser expresadas a través de los resultados obtenidos para el sistema cuyo operador es  $\hat{H}_0$ . Las soluciones así obtenidas tendrán un carácter aproximado y podrán ser tomadas con diferente grado de precisión.

---

<sup>1</sup>En términos de sus valores esperados sobre los estados  $|n_0\rangle$ .

Aunque los dos términos de  $\hat{H}$  son permanentes, formalmente se puede considerar que el sistema con este hamiltoniano aparece como resultado de la acción de la perturbación  $\hat{H}'$  sobre el sistema con hamiltoniano  $\hat{H}_0$ . Por eso, formalmente se dice que  $\hat{H}_0$  es el hamiltoniano del sistema inicial (sin perturbar) y  $\hat{H}'$  representa una perturbación que va a modificar sus valores propios de  $\hat{H}_0$ .

Para poder desarrollar el mecanismo de solución aproximada del problema planteado, analicemos el siguiente hamiltoniano auxiliar

$$\hat{H}(\lambda) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}', \quad (9.3)$$

que se diferencia del original en que se introduce un parámetro real  $\lambda$  ( $0 \leq \lambda \leq 1$ ) en el término  $\hat{H}'$  y representa el hamiltoniano del sistema sin perturbar, cuando  $\lambda \rightarrow 0$  y constituye el hamiltoniano del sistema perturbado, cuando  $\lambda \rightarrow 1$ .

Como  $\hat{H}(\lambda)$  cambia de manera continua cuando el parámetro  $\lambda$  cambia de 1 a 0, se puede inferir que los valores propios y vectores propios de  $\hat{H}$  van a ir transformándose de manera igualmente continua en los valores propios y vectores propios de  $\hat{H}_0$ . Esto significa que

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} E_n = \mathcal{E}_n \quad \text{y} \quad \lim_{\lambda \rightarrow 0} |n\rangle = |n_0\rangle \quad (9.4)$$

Los valores propios y vectores propios del hamiltoniano auxiliar pueden ser expresados como series de potencias del parámetro  $\lambda$ .

$$E_n(\lambda) = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i E_n^{(i)} \quad \text{y} \quad |n(\lambda)\rangle = \sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |n^{(q)}\rangle$$

lo que significa que para el hamiltoniano real se tendrá

$$E_n = \sum_{i=0}^{\infty} E_n^{(i)} \quad \text{y} \quad |n\rangle = \sum_{q=0}^{\infty} |n^{(q)}\rangle \quad (9.5)$$

Los vectores  $|n^{(q)}\rangle$  pueden ser expresados como combinaciones de los vectores propios de  $\hat{H}_0$ <sup>2</sup>, es decir,

$$|n^{(q)}\rangle = \sum_m C_{mn}^{(q)} |m_0\rangle \quad (9.6)$$

donde  $C_{mn}^{(q)} = \langle m_0 | n^{(q)} \rangle$ . Algo parecido se puede decir de los términos  $E_n^{(i)}$ , los cuales se van a calcular empleando los elementos de matriz de  $\hat{H}_0$ , en la base de sus vectores propios, y sus diferentes productos.

Si se reemplaza  $\hat{H}(\lambda)$ ,  $|n(\lambda)\rangle$  y  $E_n(\lambda)$  en la ecuación para los valores propios del hamiltoniano auxiliar se obtiene

$$\left[ \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}' \right] \sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |n^{(q)}\rangle - \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i E_n^{(i)} \sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |n^{(q)}\rangle = 0 \quad (9.7)$$

---

<sup>2</sup>Los vectores propios de  $\hat{H}_0$  constituyen una base del espacio de vectores de estado.

que no es otra cosa que una serie de potencias de  $\lambda$ ,

$$\begin{aligned} & \left[ \hat{H}_0 - E_n^{(0)} \right] |n^{(0)}\rangle + \left\{ \left[ \hat{H}_0 - \mathcal{E}_n \right] |n^{(1)}\rangle + \left[ \hat{H}' - E_n^{(1)} \right] |n_0\rangle \right\} \lambda \\ & + \sum_{q=2}^{\infty} \left\{ \left[ \hat{H}_0 - E_n^{(0)} \right] |n^{(q)}\rangle + \hat{H}' |n^{(q-1)}\rangle - \sum_{i=1}^q E_n^{(i)} |n^{(q-i)}\rangle \right\} \lambda^q = 0 \end{aligned} \quad (9.8)$$

Para que la ecuación precedente se satisfaga es indispensable que los coeficientes de cada potencia sean iguales a cero. Así para la potencia  $q = 0$  se tiene

$$\left[ \hat{H}_0 - E_n^{(0)} \right] |n^{(0)}\rangle = 0 \quad (9.9)$$

y para las demás potencias ( $q > 0$ )

$$\left[ \hat{H}_0 - E_n^{(0)} \right] |n^{(q)}\rangle + \hat{H}' |n^{(q-1)}\rangle - \sum_{i=1}^q E_n^{(i)} |n^{(q-i)}\rangle = 0 \quad (9.10)$$

La ecuación (9.9) resulta coincidente con la ecuación para los valores propios del hamiltoniano sin perturbación lo que implica que

$$|n^{(0)}\rangle \propto |n_0\rangle \quad \text{y} \quad E_n^{(0)} = \mathcal{E}_n. \quad (9.11)$$

Pero la situación es distinta cuando los valores propios de  $\hat{H}_0$  resultan degenerados, que cuando dichos valores propios no tienen degeneración. Por eso, ambos casos deben ser analizados por separado.

### 9.1.1. Perturbaciones de niveles sin degeneración

Si el espectro del hamiltoniano del sistema sin perturbar no tiene degeneración, significa que la ecuación

$$\hat{H}_0 |n_0\rangle = \mathcal{E}_n |n_0\rangle \quad (9.12)$$

tiene una solución única para cada valor propio de la energía, la cual va a depender de un sólo parámetro  $n$ . Por lo tanto,

$$|n^{(0)}\rangle = |n_0\rangle \quad (9.13)$$

Cuando  $q = 1$ , y se considera el resultado precedente, la ecuación (9.10) se transformará en

$$\left[ \hat{H}_0 - \mathcal{E}_n \right] |n^{(1)}\rangle + \left[ \hat{H}' - E_n^{(1)} \right] |n_0\rangle = 0 \quad (9.14)$$

que resulta ser una ecuación no homogénea para el vector  $|n^{(1)}\rangle$ , es decir, una ecuación del tipo

$$\left[ \hat{H}_0 - \mathcal{E}_n \right] |n^{(1)}\rangle = |A\rangle$$

Como el vector  $|A\rangle$  también se puede expresar en forma de una combinación sobre los vectores de la base,

$$|A\rangle = \sum_m A_m |m_0\rangle,$$

al reemplazar  $|n^{(1)}\rangle$  y  $|A\rangle$  en la correspondiente ecuación obtendremos

$$\sum_m \left\{ C_{mn}^{(1)} (\mathcal{E}_m - \mathcal{E}_n) - A_m \right\} |m_0\rangle = 0$$

Cuando  $m \neq n$  se puede obtener

$$C_{mn}^{(1)} = \frac{A_m}{\mathcal{E}_m - \mathcal{E}_n},$$

en cambio, para  $m = n$ , el coeficiente  $A_n$  debe ser igual a cero y, con él, el coeficiente  $C_{nn}^{(1)}$ . Por lo tanto, en la combinación que representa al vector  $|n^{(1)}\rangle$  debe ser ausente el vector  $|n_0\rangle$ , es decir,

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} C_{mn}^{(1)} |m_0\rangle = \sum_{m \neq n} \langle m_0 | n^{(1)} \rangle |m_0\rangle \quad (9.15)$$

Si la ecuación (9.14) es multiplicada por el vector  $\langle m_0 |$  y si se tiene en cuenta que

$$\langle m_0 | \hat{H}'_0 = \left( \hat{H}'_0 |m_0\rangle \right)^+ = (\mathcal{E}_m |m_0\rangle)^+ = \langle m_0 | \mathcal{E}_m,$$

se obtendrá

$$(\mathcal{E}_m - \mathcal{E}_n) \langle m_0 | n^{(1)} \rangle + \langle m_0 | \hat{H}' | n_0 \rangle - E_n^{(1)} \langle m_0 | n_0 \rangle = 0 \quad (9.16)$$

Cuando  $m = n$ , de la ecuación anterior se obtiene

$$\langle n_0 | \hat{H}' | n_0 \rangle - E_n^{(1)} \langle n_0 | n_0 \rangle = 0,$$

es decir,

$$E_n^{(1)} = \langle n_0 | \hat{H}' | n_0 \rangle \quad (9.17)$$

mientras que para  $m \neq n$  se tendrá

$$(\mathcal{E}_m - \mathcal{E}_n) \langle m_0 | n^{(1)} \rangle + \langle m_0 | \hat{H}' | n_0 \rangle = 0,$$

de donde

$$\langle m_0 | n^{(1)} \rangle = \frac{\langle m_0 | \hat{H}' | n_0 \rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m},$$

lo que significa que

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m_0 | \hat{H}' | n_0 \rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m} |m_0\rangle \quad (9.18)$$

Se ha obtenido una fórmula para calcular el valor de de la **primera corrección de la energía**  $E_n^{(1)}$ , así como la **primera corrección del vector propio**, ésta como una combinación

de los vectores propios  $|m_0\rangle$ .

Resultados análogos se van a obtener para todas las potencias  $\lambda^q (q \geq 1)$ . En efecto, para un  $q$  arbitrario se tiene la siguiente ecuación

$$\left[ \hat{H}'_0 - E_n^{(0)} \right] |n^{(q)}\rangle + \hat{H}' |n^{(q-1)}\rangle - \sum_{i=1}^q E_n^{(i)} |n^{(q-i)}\rangle = 0 \quad (9.19)$$

que es una ecuación que va a permitir expresar las **correcciones  $q$ -ésimas**  $|n^{(q)}\rangle$  y  $E_n^{(q)}$  a través de las de menor rango  $|n^{(q-i)}\rangle$   $E_n^{(q-i)}$ .

Actuando de manera análoga a lo ejecutado para  $q = 1$ , se puede deducir la fórmula para expresar en forma explícita  $E_n^{(q)}$  y  $C_m^{(q)} = \langle m_0 | n^{(q)} \rangle$ . En efecto, después de multiplicar la ecuación (9.19) por el vector  $\langle m_0 |$  se obtiene

$$\langle m_0 | \left[ \hat{H}'_0 - E_n^{(0)} \right] |n^{(q)}\rangle + \langle m_0 | \hat{H}' |n^{(q-1)}\rangle - \sum_{i=1}^q E_n^{(i)} \langle m_0 | n^{(q-i)}\rangle = 0 \quad (9.20)$$

expresión que toma la forma

$$(\mathcal{E}_m - \mathcal{E}_n) \langle m_0 | n^{(q)}\rangle + \langle m_0 | \hat{H}' |n^{(q-1)}\rangle - \sum_{i=1}^q E_n^{(i)} \langle m_0 | n^{(q-i)}\rangle = 0 \quad (9.21)$$

Cuando  $m = n$  de la expresión anterior se obtiene

$$E_n^{(q)} = \langle n_0 | \hat{H}' |n^{(q-1)}\rangle - \sum_{i=1}^{q-1} E_n^{(i)} \langle n_0 | n^{(q-i)}\rangle \quad (9.22)$$

que es la fórmula de la **corrección  $q$ -ésima para el nivel  $n$ -ésimo** de la energía del sistema perturbado.

Cuando  $m \neq n$  se tiene

$$\langle m_0 | n^{(q)}\rangle = \frac{1}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m} \left\{ \langle m_0 | \hat{H}' |n^{(q-1)}\rangle - \sum_{i=1}^q E_n^{(i)} \langle m_0 | n^{(q-i)}\rangle \right\} \quad (9.23)$$

con lo cual la **corrección  $q$ -ésima del vector correspondiente al estado  $n$ -ésimo** resulta expresada de la siguiente manera

$$|n^{(q)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{1}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m} \left\{ \langle m_0 | \hat{H}' |n^{(q-1)}\rangle - \sum_{i=1}^{q-1} E_n^{(i)} \langle m_0 | n^{(q-i)}\rangle \right\} |m_0\rangle \quad (9.24)$$

En la mayoría de los problemas prácticos se logra un buen nivel de exactitud empleando sólo las primeras correcciones; por eso es necesario establecer su forma explícita partiendo de las ecuaciones generales (9.22) y (9.24).



Para la primera corrección se van a obtener resultados coincidentes con lo obtenido anteriormente. En efecto, para la primera corrección de la energía se tiene

$$E_n^{(1)} = \langle n_0 | \hat{H}' | n_0 \rangle \quad (9.25)$$

y para el vector correspondiente lo siguiente

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{1}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m} \left\{ \langle m_0 | \hat{H}' | n_0 \rangle - E_n^{(1)} \langle m_0 | n_0 \rangle \right\} |m_0\rangle \quad (9.26)$$

lo cual, considerando que el segundo término se hace cero, resulta igual a

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m_0 | \hat{H}' | n_0 \rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m} |m_0\rangle \quad (9.27)$$

La segunda corrección de la energía resulta igual a

$$E_n^{(2)} = \langle n_0 | \hat{H}' | n^{(1)} \rangle = \langle n_0 | \hat{H}' \sum_{m \neq n} \frac{\langle m_0 | \hat{H}' | n_0 \rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m} |m_0\rangle \quad (9.28)$$

y se puede expresar como

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n_0 | \hat{H}' | m_0 \rangle|^2}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m}. \quad (9.29)$$

Para la segunda corrección del vector propio se obtiene

$$|n^{(2)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{1}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m} \left\{ \langle m_0 | \hat{H}' | n^{(1)} \rangle - E_n^{(1)} \langle m_0 | n^{(1)} \rangle \right\} |m_0\rangle \quad (9.30)$$

y después de emplear las fórmulas de  $E_n^{(1)}$  y  $|n^{(1)}\rangle$  se transforma en

$$|n^{(2)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{1}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m} \left\{ \langle m_0 | \hat{H}' \sum_{c \neq n} \frac{\langle c_0 | \hat{H}' | n_0 \rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_c} |c_0\rangle - \langle n_0 | \hat{H}' | n_0 \rangle \sum_{m \neq n} \frac{\langle m_0 | \hat{H}' | n_0 \rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m} \right\} |m_0\rangle \quad (9.31)$$

La expresión anterior se puede expresar como

$$|n^{(2)}\rangle = \sum_{m, c \neq n} \frac{\langle m_0 | \hat{H}' | c_0 \rangle \langle c_0 | \hat{H}' | n_0 \rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m \mathcal{E}_n - \mathcal{E}_c} |m_0\rangle - \sum_{m \neq n} \frac{\langle n_0 | \hat{H}' | n_0 \rangle \langle m_0 | \hat{H}' | n_0 \rangle}{(\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m)^2} |m_0\rangle \quad (9.32)$$

Una de las condiciones para poder aplicar de esta teoría es que la perturbación sea pequeña comparada con el hamiltoniano del sistema sin perturbar. Después de haber ejecutado los cálculos la mencionada condición puede ser satisfecha si se exige que

$$H'_{mn} \ll |\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m| \quad (9.33)$$

ya que de lo contrario el valor de las correcciones de la energía mayores que la segunda podrían resultar muy grandes en comparación con los valores de los niveles del problema no perturbado y la serie de potencias va a resultar divergente. También es importante verificar que la perturbación no cambie las peculiaridades del sistema; en particular, el carácter de su espectro.

### 9.1.2. Perturbación de niveles con degeneración.

En caso de que el hamiltoniano sin perturbación tenga niveles con degeneración, es decir,

$$\hat{H}_0|(n\alpha)_0\rangle = \mathcal{E}_n|(n\alpha)_0\rangle, \quad \text{con} \quad \alpha = 1, 2, \dots, \alpha_n \quad (9.34)$$

nos encontramos ante un caso en el cual a cada valor  $\mathcal{E}_n$  de la energía le corresponde los estados  $|n1\rangle, |n2\rangle, \dots, |n\alpha_n\rangle$ .

En este caso no está claro cuál de los mencionados vectores se debe tomar como aproximación “cero” ya que como tal podría intervenir cualquiera de los vectores o cualesquiera de sus combinaciones lineales. A veces sucede que los vectores  $|n\alpha\rangle$  no son ortonormalizados, por eso es recomendable constituir  $\alpha_n$  combinaciones ortogonales de todos ellos, cada una de las cuales constituirán la aproximación “cero” de los vectores de los diferentes estados.

En consecuencia, si tomamos<sup>3</sup>

$$|(n\alpha)^{(0)}\rangle = \sum_{\alpha} C_{n\alpha}^{(0)}|(n\alpha)_0\rangle \quad \text{y} \quad |(n\alpha)^{(1)}\rangle = \sum_{n' \neq n} C_{n'}^{(1)}|(n')_0\rangle \quad (9.35)$$

la ecuación (9.10), para  $q = 1$ , se expresará como

$$\sum_{n', \alpha'} C_{n'\alpha'}^{(1)} [\hat{H}_0 - \mathcal{E}_n] |(n')_0\rangle + \sum_{\alpha=1}^{\alpha_n} C_{n\alpha}^{(0)} [\hat{H}' - E_n^{(1)}] |(n\alpha)_0\rangle = 0 \quad (9.36)$$

Si se le multiplica por  $\langle(n'')_0|$  de la ecuación anterior se obtiene

$$\sum_{n', \alpha'} C_{n'\alpha'}^{(1)} [\mathcal{E}_{n''} - \mathcal{E}_n] \langle(n'')_0|(n')_0\rangle + \sum_{\alpha} C_{n\alpha}^{(0)} \langle(n''\alpha'')_0| [\hat{H}' - E_n^{(1)}] |(n\alpha)_0\rangle = 0 \quad (9.37)$$

Si  $n'' = n$ , de la ecuación precedente se obtiene

$$\sum_{\alpha=1}^{\alpha_n} [H'_{\alpha''\alpha} - E_n^{(1)} S_{\alpha''\alpha}] C_{n\alpha}^{(0)} = 0 \quad (9.38)$$

donde

$$H'_{\alpha''\alpha} \equiv \langle(n\alpha'')_0|\hat{H}'|(n\alpha)_0\rangle \quad \text{y} \quad S_{\alpha''\alpha} \equiv \langle(n\alpha'')_0|(n\alpha)_0\rangle, \quad (9.39)$$

Se ha obtenido un sistema de ecuaciones homogéneas para los coeficientes  $C_{n\alpha}^{(0)}$ , el cual tiene soluciones no triviales sólo si el determinante conformado por los coeficientes que acompañan a las incógnitas es igual a cero.

<sup>3</sup>Se presume una sumatoria sobre todos los subestados del nivel “n”, es decir, que

$$|(n\alpha)^{(1)}\rangle = \sum_{n' \neq n, \alpha'} C_{n'\alpha'}^{(1)} |(n'\alpha')_0\rangle$$

En consecuencia, se debe cumplir que

$$\det \left| H'_{\alpha''\alpha} - E_n^{(1)} S_{\alpha''\alpha} \right| = 0 \quad (9.40)$$

lo cual es equivalente a

$$A_0(E_n^{(1)})^{\alpha_n} + A_1(E_n^{(1)})^{\alpha_n-1} + \dots + A_{\alpha_n} = 0, \quad (9.41)$$

es decir, a una ecuación de grado  $\alpha_n$  para  $E_n^{(1)}$ .

Sus raíces van a constituir  $\alpha_n$  diferentes primeras correcciones de la energía, es decir, en lugar de un nivel aparecen varios<sup>4</sup>. En consecuencia se puede aseverar que la perturbación ha eliminado la degeneración de los niveles energéticos.

La ecuación (9.38) permite obtener los valores concretos de los coeficientes  $\{C_{n\alpha}^{(0)}\}_i$  para cada valor de  $\{E_n^{(1)}\}_i$  para todos los valores de  $i$  ( $i = 1, \dots, \alpha_n$ ). En efecto, al reemplazar cada uno de estos valores se tendrá una sistema homogéneo de ecuaciones, el cual hará posible expresar todos los coeficientes a través de uno de ellos que queda indeterminado.

Gracias a lo anterior se puede obtener  $\alpha_n$  diferentes vectores  $|n^{(0)}\rangle$ , cada uno de los cuales va a estar relacionado con un valor de energía ya desdoblada por la acción de la perturbación. Estos son los vectores de la aproximación cero para dichos niveles.

### Desdoblamiento de un nivel con doble degeneración

Como un ejemplo del mecanismo analizado veamos el caso de un nivel  $E_n$  al cual le corresponden dos funciones propias  $|(n1)_0\rangle$  y  $|(n2)_0\rangle$ . En este caso la ecuación secular

$$\sum_{l=1}^2 \left\{ \langle (nl')_0 | \hat{H}' | (nl)_0 \rangle - E_n^{(1)} \delta_{\nu l} \right\} N_{nl}^{(0)} = 0 \quad (9.42)$$

es un sistema de dos ecuaciones

$$\{H'_{11} - E_n^{(1)}\} N_{n1}^{(0)} + H'_{12} N_{n2}^{(0)} = 0 \quad (9.43)$$

$$H'_{21} N_{n1}^{(0)} + \{H'_{22} - E_n^{(1)}\} N_{n2}^{(0)} = 0$$

El determinante obtenido tiene la forma

$$\begin{vmatrix} H'_{11} - E_n^{(1)} & H'_{12} \\ H'_{21} & H'_{22} - E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \quad (9.44)$$

---

<sup>4</sup>Algunos de ellos van a tener el mismo valor, en cuyo caso va a ser necesario analizar la ecuación para  $q = 2$

lo cual equivale a la ecuación

$$(H'_{11} - E_n^{(1)}) (H'_{22} - E_n^{(1)}) - H'_{12}H'_{21} = 0 \quad (9.45)$$

$$H'_{11}H'_{22} - (H'_{11} + H'_{22}) E_n^{(1)} + (E_n^{(1)})^2 = 0$$

Sus raíces son

$$E_n^{(1)} = \frac{H'_{11} + H'_{22}}{2} \pm \sqrt{\frac{(H'_{11} - H'_{22})^2}{4} + |H'_{12}|^2} \quad (9.46)$$

que se simplifican si asumimos que  $H'_{11} = H'_{22}$  y  $H'_{12} = H'_{21}$ , en cuyo caso se tendrá

$$E_n^{(1)i} = H'_{11} \pm H'_{12} \quad (9.47)$$

Para el primer valor de  $E_n^{(1)1}$  la ecuación para los coeficientes  $N_{nl}^{(0)1}$  tendrá la forma

$$-H'_{12}N_{n1}^{(0)1} + H'_{12}N_{n2}^{(0)1} = 0 \quad \text{es decir} \quad N_{n1}^{(0)1} = N_{n2}^{(0)1} \quad (9.48)$$

y para el segundo valor  $E_n^{(1)2}$

$$H'_{12}N_{n1}^{(0)2} + H'_{12}N_{n2}^{(0)2} = 0 \quad \text{de donde} \quad N_{n1}^{(0)2} = -N_{n2}^{(0)2} \quad (9.49)$$

En consecuencia, los estados ya desdoblados serán:

$$E_{n1} = \mathcal{E}_n + H'_{11} + H'_{22} \quad \text{con} \quad |n1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |(n1)_0\rangle + |(n2)_0\rangle \right\} \quad (9.50)$$

$$E_{n2} = \mathcal{E}_n + H'_{11} - H'_{22} \quad \text{con} \quad |n2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |(n1)_0\rangle - |(n2)_0\rangle \right\}$$

### 9.1.3. Ruptura incompleta de la degeneración.

En algunos casos puede suceder que algunos o todos los valores obtenidos para  $E_n^{(1)}$  son cero, la degeneración se mantendrá y con ella, la indeterminación de los adecuados vectores de la aproximación cero". Para romper completamente la degeneración es necesario resolver la ecuación (9.10) cuando  $q = 2$ , que en este caso tiene la forma

$$\left[ \hat{H}_0 - E_n^{(0)} \right] |n^{(2)}\rangle + \hat{H}' |n^{(1)}\rangle - E_n^{(1)} |n^{(1)}\rangle - E_n^{(2)} |n^{(0)}\rangle = 0 \quad (9.51)$$

De acuerdo con lo obtenido anteriormente, la segunda aproximación del vector de estado puede ser expresada como<sup>5</sup>

$$|n^{(2)}\rangle = \sum_{n' \neq n} C_{n'}^{(2)} |(n')_0\rangle \quad (9.52)$$

<sup>5</sup>También acá se presume sumatoria sobre todos los estados degenerados de cada nivel "n"

$$|n^{(2)}\rangle = \sum_{n' \neq n, \alpha'} C_{n'\alpha'}^{(2)} |(n' \alpha')_0\rangle$$

gracias a lo cual se tendrá

$$\left[ \hat{H}_0 - \varepsilon_n \right] \sum_{n' \neq n} C_{n'}^{(2)} |(n')_0\rangle + \hat{H}' \sum_{n' \neq n} C_{n'}^{(1)} |(n')_0\rangle - E_n^{(1)} \sum_{n' \neq n} C_{n'}^{(1)} |(n')_0\rangle - E_n^{(2)} \sum_{\alpha} C_{n\alpha}^{(0)} |(n\alpha)_0\rangle = 0 \quad (9.53)$$

Si se le multiplica por  $\langle (n'')_0 |$  se obtiene

$$\sum_{n' \neq n} C_{n'}^{(2)} \langle (n'')_0 | (n')_0 \rangle (\varepsilon_{n''} - \varepsilon_n) + \sum_{n' \neq n} C_{n'}^{(1)} \langle (n'')_0 | \hat{H}' | (n')_0 \rangle - E_n^{(1)} \sum_{n' \neq n} C_{n'}^{(1)} \langle (n'')_0 | (n')_0 \rangle - E_n^{(2)} \sum_{\alpha} C_{n\alpha}^{(0)} \langle (n''\alpha)_0 | (n\alpha)_0 \rangle = 0 \quad (9.54)$$

$$E_n^{(1)} \sum_{n' \neq n} C_{n'}^{(1)} \langle (n'')_0 | (n')_0 \rangle - E_n^{(2)} \sum_{\alpha} C_{n\alpha}^{(0)} \langle (n''\alpha)_0 | (n\alpha)_0 \rangle = 0$$

Cuando  $n'' = n$  la ecuación precedente se reduce a

$$\sum_{n' \neq n} C_{n'}^{(1)} \langle (n)_0 | \hat{H}' | (n')_0 \rangle - E_n^{(2)} \sum_{\alpha} C_{n\alpha}^{(0)} \langle (n\alpha)_0 | (n\alpha)_0 \rangle = 0 \quad (9.55)$$

Por otro lado, de la ecuación para la primera aproximación del vector de estado (9.37) para  $n'' \neq n$  se obtiene

$$\sum_{n', \alpha'} C_{n'}^{(1)} (\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n) \langle (n'')_0 | (n')_0 \rangle + \sum_{\alpha} C_{n\alpha}^{(0)} \langle (n'')_0 | \hat{H}' | (n\alpha)_0 \rangle = 0 \quad (9.56)$$

de donde resulta

$$C_{n''}^{(1)} = \sum_{\alpha} C_{n\alpha}^{(0)} \frac{\langle (n'')_0 | \hat{H}' | (n\alpha)_0 \rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n''}} \quad (9.57)$$

Al reemplazar  $C_{n'}^{(1)}$  en la ecuación (9.55)

$$\sum_{n' \neq n} \sum_{\alpha} C_{n\alpha}^{(0)} \frac{\langle (n')_0 | \hat{H}' | (n\alpha)_0 \rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}} \langle (n\alpha'')_0 | \hat{H}' | (n')_0 \rangle - E_n^{(2)} \sum_{\alpha} C_{n\alpha}^{(0)} \langle (n\alpha'')_0 | (n\alpha)_0 \rangle = 0 \quad (9.58)$$

se obtiene

$$\sum_{\alpha} C_{n\alpha}^{(0)} \left\{ \sum_{n' \neq n} \frac{\langle (n\alpha'')_0 | \hat{H}' | (n')_0 \rangle \langle (n')_0 | \hat{H}' | (n\alpha)_0 \rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}} - E_n^{(2)} S_{\alpha''\alpha} \right\} = 0 \quad (9.59)$$

La ecuación anterior debe ser compatible con (9.38) por lo que al sumarlas miembro a miembro se obtiene

$$\sum_{\alpha} \left\{ H_{\alpha''\alpha} + \sum_{n' \neq n} \frac{\langle (n\alpha'')_0 | \hat{H}' | (n')_0 \rangle \langle (n')_0 | \hat{H}' | (n\alpha)_0 \rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}} - (E_n^{(1)} + E_n^{(2)}) S_{\alpha''\alpha} \right\} C_{n\alpha}^{(0)} = 0 \quad (9.60)$$

## 9.2. Perturbaciones dependientes del tiempo

Uno de los problemas más importantes de la Mecánica Cuántica es calcular la probabilidad de la transición de un estado a otro. Supongamos que se tiene un sistema con un valor definido de alguna magnitud  $M$ , es decir se encuentra en el estado  $(|n\rangle)$  correspondiente al valor  $M_n$ . Con el tiempo y la acción de campos externos el estado de estos sistemas sufrirá una variación, pero se puede expresar como una combinación lineal de los estados propios del operador en el instante inicial  $(|m\rangle) = |m(0)\rangle$

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_m c_m(t) |m(0)\rangle \quad (9.61)$$

Los coeficientes  $c_m(t)$  representan la probabilidad de que en el estado  $|\Psi\rangle$  la magnitud física  $M$  tenga el valor  $M_m$ . Ésto significa que  $c_m(t)$  representa la probabilidad de que el sistema que en un principio se encontraba en el estado  $n$ -ésimo ahora se encuentre en el estado  $m$ -ésimo. Por tal motivo, el coeficiente  $c_m(t)$  representa también la probabilidad de que el sistema haya realizado una transición cuántica. Tal probabilidad va a ir cambiando con el tiempo desde su valor inicial  $c_m(0) = \delta_{mn}$ , ya que al principio el sistema se encontraba en el estado  $n$ -ésimo.

Las de mayor aplicación son las transiciones entre dos niveles de energía bajo la acción de campos dependientes del tiempo. Pero en este caso la noción de energía potencial no tiene sentido y, en consecuencia, no se puede hablar de energía total. Sin embargo, si el campo actúa sólo en un lapso dado ( $0 \leq t \leq T$ ), la noción de energía total es aplicable inmediatamente antes y después de su acción y puede ser medida.

Resolver la ecuación de Schrödinger para todo tipo de campos es sumamente difícil, salvo los casos en los cuales tales campos pueden ser considerados como una pequeña perturbación. En este caso, la ecuación tendrá la forma

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \{ \hat{H}_0 + \hat{H}'(t) \} |\Psi(t)\rangle \quad (9.62)$$

En ausencia de la perturbación la relación anterior se transforma en

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}_0 |\Psi(t)\rangle \quad (9.63)$$

y su solución general es igual a

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k c_k |k\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} \quad (9.64)$$

Si el sistema se encuentra en el estado  $n$  (con una energía igual a  $E_n$ ), entonces todos los coeficientes serán iguales a cero, menos el  $n$  cuyo valor será uno, es decir  $c_k = \delta_{kn}$ . En consecuencia, en ausencia de la perturbación

$$|\Psi(t)\rangle = |n(t)\rangle = |n\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (9.65)$$

Cuando la perturbación se conecte, los coeficientes comenzarán a depender del tiempo. Ésto significa que la solución general para el sistema bajo la acción de la perturbación tendrá la forma

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k c_k(t) |k\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} \quad (9.66)$$

Después de reemplazar la solución general en la ecuación para el sistema con perturbación, multiplicarla desde la izquierda por  $\langle m | e^{\frac{i}{\hbar} E_m t}$  se obtiene la ecuación

$$i\hbar \frac{\partial c_m(t)}{\partial t} = \sum_k c_k(t) e^{i \frac{E_m - E_k}{\hbar} t} \langle m | \hat{H}'(t) | k \rangle \quad (9.67)$$

la cual puede ser expresada de la siguiente manera

$$i\hbar \frac{\partial c_m(t)}{\partial t} = \sum_k c_k(t) \langle m | \hat{H}'(t) | k \rangle e^{i\omega_{mk}t} \quad (9.68)$$

donde  $\omega_{mk} = (E_m - E_k)/\hbar$ .

El sistema obtenido es exacto, es decir, es equivalente a la ecuación de Schrödinger para el vector  $|\Psi(t)\rangle$ . Es un sistema de ecuaciones diferenciales para las incógnitas  $c_m(t)$  cuyo número puede ser infinito, lo cual significa que encontrar su solución resulta muy difícil y muchas veces imposible.

Sin embargo, cuando la perturbación es pequeña se puede postular

$$c_m(t) = \sum_i c_m^{(i)}(t) \quad (9.69)$$

y los coeficientes  $c_m^{(i)}(t)$  van a ir siendo definidos mediante aproximaciones sucesivas.

Como aproximación cero de las funciones  $c_m^{(0)}(t)$  se puede tomar sus valores iniciales  $\delta_{mn}$ , en cuyo caso la primera aproximación adoptará la forma

$$i\hbar \frac{\partial c_m^{(1)}(t)}{\partial t} = \sum_k \delta_{kn} \langle m | \hat{H}'(t) | k \rangle e^{i\omega_{mk}t} \quad (9.70)$$

y su solución se expresará como

$$c_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \langle m | \hat{H}'(t') | n \rangle e^{i\omega_{mn}t'} dt' \quad (9.71)$$

Si se continua el proceso de iteración, la ecuación diferencial para la segunda aproximación será igual a

$$i\hbar \frac{\partial c_m^{(2)}(t)}{\partial t} = \sum_k c_k^{(1)}(t) \langle m | \hat{H}'(t) | k \rangle e^{i\omega_{mk}t} \quad (9.72)$$

la cual se transforma en

$$i\hbar \frac{\partial c_m^{(2)}(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \sum_{k \neq n} \langle m | \hat{H}'(t) | k \rangle e^{i\omega_{mk}t} \int_0^t \langle k | \hat{H}'(t') | n \rangle e^{i\omega_{kn}t'} dt'$$

y su solución se expresará como

$$c_m^{(2)}(t) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \sum_{k \neq n} \int_0^t \langle m | \hat{H}'(t') | k \rangle e^{i\omega_{mk}t'} dt' \int_0^{t'} \langle k | \hat{H}'(t'') | n \rangle e^{i\omega_{kn}t''} dt'' + \quad (9.73)$$

Al término del proceso, la solución exacta se expresará mediante la fórmula

$$\begin{aligned} c_m(t) = & \delta_{mn} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \langle m | \hat{H}'(t') | n \rangle e^{i\omega_{mn}t'} dt' + \\ & + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \sum_{k \neq n} \int_0^t \langle m | \hat{H}'(t') | k \rangle e^{i\omega_{mk}t'} dt' \int_0^{t'} \langle k | \hat{H}'(t'') | n \rangle e^{i\omega_{kn}t''} dt'' + \\ & + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^3 \sum_{k, k' \neq n} \int_0^t \langle m | \hat{H}'(t') | k \rangle e^{i\omega_{mk}t'} dt' \int_0^{t'} \langle k | \hat{H}'(t'') | k' \rangle e^{i\omega_{kk'}t''} dt'' \int_0^{t''} \langle k' | \hat{H}'(t''') | n \rangle e^{i\omega_{k'n}t'''} dt''' + \dots, \end{aligned}$$

la cual puede se expresada como

$$\begin{aligned} c_m(t) = & \langle m | \delta_{mn} | n \rangle + \frac{1}{i\hbar} \left\langle m \left| \int_0^t \hat{H}'(t') e^{i\omega_{mn}t'} dt' \right| n \right\rangle + \quad (9.74) \\ & + \sum_{k \neq n} \left\langle m \left| \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \hat{H}'(t') e^{i\omega_{mk}t'} dt' \right| k \right\rangle \left\langle k \left| \frac{1}{i\hbar} \int_0^{t'} \hat{H}'(t'') e^{i\omega_{kn}t''} dt'' \right| n \right\rangle + \dots \end{aligned}$$

El resultado anterior puede ser expresado de manera compacta como

$$c_m(t) = \left\langle m \left| \exp\left(\frac{1}{i\hbar} \int_0^t \tilde{H}'(t') dt'\right) \right| n \right\rangle \quad (9.75)$$

donde

$$\tilde{H}'(t') = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t'} \hat{h} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t'}$$

En muchos casos reales es suficiente calcular la primera aproximación. En particular, la probabilidad de una transición cuántica (del estado  $E_n$  al estado  $E_m$ ) bajo la acción de una perturbación que actúa en un lapso  $T$  ( $0 \leq t \leq T$ ) se expresa como

$$c_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^T \langle m | \hat{H}'(t') | n \rangle e^{i\omega_{mn}t'} dt' = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \langle m | \hat{H}'(t') | n \rangle e^{i\omega_{mn}t'} dt' \quad (9.76)$$



Para evaluar el integral se puede considerar que si se emplea las transformaciones de Fourier los elementos de la matriz de la perturbación

$$\langle m|\hat{H}'(t)|n\rangle = \langle m|\int_{-\infty}^{\infty} \hat{h}(\omega)e^{-i\omega t}d\omega|k\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle m|\hat{H}'(\omega)|n\rangle e^{-i\omega t}d\omega \quad (9.77)$$

de donde

$$\int_{-\infty}^{\infty} \langle m|\hat{H}'(t)|n\rangle e^{i\omega t}dt = 2\pi \langle m|\hat{H}'(\omega)|n\rangle \quad (9.78)$$

En consecuencia

$$c_m^{(1)}(t) = \frac{2\pi}{i\hbar} \langle m|\hat{H}'(\omega_{mn})|n\rangle \quad y \quad P_{mn} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} \left| \langle m|\hat{H}'(\omega_{mn})|n\rangle \right|^2 \quad (9.79)$$

De la fórmula anterior se deduce que la probabilidad de transición entre los niveles  $E_n$  y  $E_m$  es diferente de cero si en el espectro de la perturbación está presente una frecuencia igual a  $\omega_{mn}$ . Ésto se puede entender como si el sistema estuviera conformado por un conjunto de osciladores con frecuencias iguales a  $\omega_{mn}$ , los cuales se excitan sólo si en el espectro de la perturbación hubiera las mencionadas frecuencias.

Especialmente sencilla es la fórmula de la probabilidad de transición en caso de que la perturbación sea constante y actúe durante un lapso  $T$ . En este caso la integral se reduce a

$$\int_0^T \langle m|\hat{H}'(t')|n\rangle e^{i\omega_{mn}t'} dt' = \frac{e^{i\omega_{mn}T} - 1}{i\omega_{mn}} \langle m|\hat{H}'|n\rangle \quad (9.80)$$

y como

$$\frac{e^{i\omega_{mn}T} - 1}{i\omega_{mn}} = 2 \frac{e^{i\omega_{mn}T/2}}{\omega_{mn}} \text{sen}(\omega_{mn}T/2)$$

entonces, la probabilidad de la transición resulta igual

$$P_{mn} = \frac{2}{\hbar^2} \left| \langle m|\hat{H}'|n\rangle \right|^2 F(E_m - E_n) \quad (9.81)$$

donde

$$F(E_m - E_n) = \frac{1 - \cos\{(E_m - E_n)T/\hbar\}}{(E_m - E_n)^2/\hbar^2} \quad (9.82)$$

Cuando  $T \ll \hbar/E_n \equiv \tau$  magnitud que puede ser entendida como un período característico, la probabilidad de transición es directamente proporcional a  $T^2$ . En efecto,

$$P_{mn} \propto \frac{\text{sen}^2(\omega_{mn}T/2)}{(E_m - E_n)^2/\hbar^2} \approx \frac{\omega_{mn}^2 T^2}{\omega_{mn}^2} = T^2$$

En cambio, cuando  $T \gg \tau$  la función

$$F(E_m - E_n) = \pi\hbar T \delta(E_m - E_n)$$

y, por lo tanto,

$$P_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle m | \hat{h} | n \rangle \right|^2 T \delta(E_m - E_n) \quad (9.83)$$

La probabilidad de transición resulta entonces directamente proporcional al lapso que dura la acción de la perturbación. Por eso, se introduce la probabilidad de la transición en la unidad de tiempo, la cual resulta igual a

$$\mathcal{P}_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle m | \hat{H}' | n \rangle \right|^2 \delta(E_m - E_n) \quad (9.84)$$

### 9.2.1. Casos particulares.

Especialmente sencilla es la fórmula para la probabilidad  $P_{mn}$  o  $\mathcal{P}_{mn}$  cuando las perturbaciones poseen alguna propiedad particular. En esta sección se verán algunos de esos casos.

#### Perturbaciones periódicas.

Si la perturbación depende del tiempo de manera periódica, es decir, si

$$H'(t) \equiv H'(\mathbf{x}, t) = B(\mathbf{x}) e^{\pm i\omega t}$$

entonces

$$\int_0^\tau \langle m | H'(t) | n \rangle e^{i\omega_{mn}t} dt = \int_0^\tau \langle m | B(\mathbf{x}) | n \rangle e^{i(\omega_{mn} \pm \omega)t} dt$$

Por lo tanto,

$$P_{mn}^\pm = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle m | B(\mathbf{x}) | n \rangle \right|^2 \tau \delta(E_m - E_n \pm \hbar\omega) \quad (9.85)$$

lo que significa que la transición se va a producir si

$$E_m = E_n \pm \hbar\omega$$

En el primer caso se producirá una transición a un estado de mayor energía, para lo cual el sistema tiene que absorber una energía igual a  $\hbar\omega$ . En el segundo caso se tratará de una transición a un nivel inferior con emisión de energía.

#### Perturbaciones adiabáticas e instantáneas.

Por la rapidez con que se conectan, las perturbaciones pueden satisfacer dos condiciones extremas: adiabaticidad o instantaneidad.

Para ver cuándo se trata de una u otra perturbación es necesario analizar la expresión

$$\left| \omega_{mn}^{-1} \frac{d}{dt} \langle m | H'(t) | n \rangle \right|$$

y compararla con  $\hbar\omega_{mn}$ . Si

$$\left| \omega_{mn}^{-1} \frac{d}{dt} \langle m | H'(t) | n \rangle \right| \ll \hbar\omega_{mn}$$

la perturbación se considera adiabática, en cambio, cuando

$$\left| \omega_{mn}^{-1} \frac{d}{dt} \langle m | H'(t) | n \rangle \right| \gg \hbar\omega_{mn}$$

se dice que se tiene una perturbación instantánea.

Físicamente, se puede decir que una perturbación se considera adiabática si la variación de los elementos de matriz  $H'_{mn}(t)$  durante un período (expresado por  $\omega_{mn}^{-1}$ ) es muy pequeña en comparación con el valor de  $\hbar\omega_{mn}$ .

Para ver cuál es la diferencia en la fórmula para la probabilidad de transición hay que analizar el integral

$$\int_0^\tau \frac{d}{dt} \langle m | H'(t) | n \rangle e^{i\omega_{mn}t} dt = \langle m | H'(t) | n \rangle e^{i\omega_{mn}t} \Big|_0^\tau - i\omega_{mn} \int_0^\tau \langle m | H'(t) | n \rangle e^{i\omega_{mn}t} dt$$

Como la perturbación actúa sólo en el intervalo  $0 < t < \tau$ , el primer término desaparece, razón por la cual

$$\int_0^\tau \frac{d}{dt} \langle m | H'(t) | n \rangle e^{i\omega_{mn}t} dt = -i\omega_{mn} \int_0^\tau \langle m | H'(t) | n \rangle e^{i\omega_{mn}t} dt$$

Por tal motivo,

$$C_m(\tau) = \frac{1}{\hbar\omega_{mn}} \int_0^\tau \frac{d}{dt} \langle m | H'(t) | n \rangle e^{i\omega_{mn}t} dt$$

y la probabilidad de la transición resulta expresada como

$$P_{mn}(\tau) = \frac{1}{\hbar^2\omega_{mn}^2} \left| \int_0^\tau \frac{d}{dt} \langle m | H'(t) | n \rangle e^{i\omega_{mn}t} dt \right|^2$$

Si la transición es adiabática, la derivada del elemento de matriz cambia muy poco durante un período. Por tal motivo puede ser extraída del integral

$$P_{mn}(\tau) = \frac{1}{\hbar^2\omega_{mn}^2} \left| \frac{d}{dt} \langle m | H'(t) | n \rangle \right|^2 \left| \int_0^\tau e^{i\omega_{mn}t} dt \right|^2$$

y

$$P_{mn}(\tau) = \frac{4}{\hbar^2\omega_{mn}^4} \left| \frac{d}{dt} \langle m | H'(t) | n \rangle \right|^2 \text{sen}^2 \left( \frac{\omega_{mn}\tau}{2} \right) \ll 1$$

En consecuencia, si la conexión de la perturbación es muy lenta, la probabilidad de una transición cuántica es muy pequeña, es decir, tiende a cero.

Si la conexión es instantánea y luego la perturbación cambia adiabáticamente, incluyendo su desconexión, en el integral hay que tener en cuenta sólo el lapso inicial.

En este caso la exponencial casi no cambia y puede ser extraída del integral. Por lo tanto,

$$P_{mn}(\tau) = \frac{1}{\hbar^2 \omega_{mn}^2} \left| e^{i\omega_{mn}\tau} \int_0^\tau \frac{d}{dt} \langle m | H'(t) | n \rangle dt \right|^2 \approx \frac{|\langle m | H'(t) | n \rangle|^2}{\hbar^2 \omega_{mn}^2}$$

### 9.3. Método variacional.

En una serie de casos el cálculo de los primeros niveles de un espectro discreto puede ser realizado empleando un método variacional, cuya ventaja sobre la teoría de perturbaciones radica en que no es necesario conocer las funciones que describen sistemas más sencillos. El primer paso consiste en determinar el valor de la energía del estado fundamental, el cual debe satisfacer la relación

$$E_0 \leq \langle H \rangle = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \quad (9.86)$$

donde  $\hat{H}$  es el hamiltoniano del sistema y  $|\psi\rangle$ , el vector que describe el estado del sistema, con una norma

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (9.87)$$

La relación anterior se puede demostrar si el vector del estado se expande sobre los vectores propios del hamiltoniano  $\hat{H}$ <sup>6</sup>

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n |n\rangle \quad \text{con} \quad \sum_{n=0}^{\infty} |C_n|^2 = 1 \quad (9.88)$$

y se reemplaza en la fórmula para el valor esperado, el cual resulta expresado como

$$\langle H \rangle_0 = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^* \langle n | \hat{H} | \sum_{m=0}^{\infty} C_m |m\rangle = \sum_{m,n=0}^{\infty} C_n^* C_m \langle n | \hat{H} | m \rangle = \sum_{m,n=0}^{\infty} C_n^* C_m \delta_{mn} E_m \quad (9.89)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} |C_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_{n=0}^{\infty} |C_n|^2 = E_0$$

De la relación anterior se concluye que efectivamente la energía del estado fundamental ( $E_0$ ) es menor que el valor esperado del hamiltoniano ( $\hat{H}$ ). En consecuencia,

$$E_0 = \text{mín} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \quad \text{con la condición} \quad \langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (9.90)$$

<sup>6</sup>Tales vectores no se conocen. Sin embargo, en principio la expansión es posible

El valor esperado de  $\hat{H}$  se calcula empleando un **vector de prueba**<sup>7</sup> que depende de algunos parámetros desconocidos  $\alpha_0, \beta_0, \dots$  y se elige teniendo en cuenta las peculiaridades del sistema, en particular la simetría del problema.

Al calcular el producto escalar

$$\langle \psi(\alpha_0, \beta_0, \dots) | \hat{H} | \psi(\alpha_0, \beta_0, \dots) \rangle = J(\alpha_0, \beta_0, \dots) \quad (9.91)$$

se obtiene una expresión que depende de los parámetros introducidos, los cuales son definidos al calcular el mínimo, es decir después de resolver las ecuaciones

$$\frac{\partial J(\alpha_0, \beta_0, \dots)}{\partial \alpha_0} = \frac{\partial J(\alpha_0, \beta_0, \dots)}{\partial \beta_0} = \dots = 0 \quad (9.92)$$

Si el vector de prueba ha sido elegido convenientemente el valor

$$E = J(\alpha_0, \beta_0, \dots) \quad (9.93)$$

resulta muy cercano al verdadero, incluso si se emplea un número pequeño de parámetros y el vector que realmente describe el estado fundamental coincidirá aproximadamente con  $|\psi(\alpha_0, \beta_0, \dots)\rangle$ , es decir

$$|\psi_0\rangle = |\psi(\alpha_0, \beta_0, \dots)\rangle \quad (9.94)$$

Para calcular el valor del siguiente nivel energético ( $E_1$ ) hay que elegir un segundo vector de prueba  $|\psi_1\rangle$ , el cual debe satisfacer las condiciones

$$\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = 1 \quad \text{y} \quad \langle \psi_1 | \psi_0 \rangle = 0 \quad (9.95)$$

En este caso el vector  $|\psi_1\rangle$  se expresará como

$$|\psi_1\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} C_n^{(1)} |n\rangle \quad \text{con} \quad \sum_{n=1}^{\infty} |C_n^{(1)}|^2 = 1 \quad (9.96)$$

y el producto escalar

$$\langle \hat{H} \rangle_1 = \langle \psi_1 | \hat{H} | \psi_1 \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |C_n^{(1)}|^2 E_n \geq E_1 \sum_{n=1}^{\infty} |C_n^{(1)}|^2 = E_1 \quad (9.97)$$

En consecuencia

$$E_1 = \text{mín} \langle \psi_1(\alpha_1, \beta_1, \dots) | \hat{H} | \psi_1(\alpha_1, \beta_1, \dots) \rangle \quad (9.98)$$

La energía del siguiente nivel excitado ( $E_2$ ) se calculará de manera análoga, es decir será igual a

$$E_2 = \text{mín} \langle \psi_2 | \hat{H} | \psi_2 \rangle \quad (9.99)$$

donde

$$\langle \psi_2 | \psi_2 \rangle = 1 \quad \text{y} \quad \langle \psi_2 | \psi_i \rangle = 0 \quad (i = 0, 1) \quad (9.100)$$

---

<sup>7</sup>Si se trabaja en una representación continua se empleará una **función de prueba**.

El proceso puede continuar hasta determinar todos los vectores propios y los correspondientes valores de la energía. Así la energía del nivel  $E_3$  será igual a

$$E_3 = \text{mín} \langle \psi_3 | \hat{H} | \psi_3 \rangle \quad (9.101)$$

donde

$$\langle \psi_3 | \psi_3 \rangle = 1 \quad \text{y} \quad \langle \psi_3 | \psi_i \rangle = 0 \quad (i = 0, 1, 2) \quad (9.102)$$

### Energía del estado fundamental del oscilador armónico

Como un ejemplo de aplicación del método se puede calcular la energía del estado fundamental del oscilador armónico unidimensional, cuyo hamiltoniano es igual a

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\mu\omega^2}{2} x^2 \quad (9.103)$$

Al elegir la función de prueba se debe tener en cuenta dos factores: Primero, que debe tender a  $\infty$  cuando  $x \rightarrow \pm\infty$  y, segundo, que no debe tener nodos por ser función del estado fundamental. Tales condiciones cumple, por ejemplo, la expresión

$$\psi(x, \alpha) = A \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha x^2\right) \quad (9.104)$$

La condición de normalización se expresa como

$$\int A^2 \exp(-\alpha x^2) dx = \frac{A^2}{\sqrt{\alpha}} \int \exp(-\xi^2) d\xi = \frac{A^2}{\sqrt{\alpha}} \sqrt{\pi} = 1 \quad (9.105)$$

de donde se obtiene que  $A = (\alpha/\pi)^{1/4}$ .

El integral  $J(\alpha)$  será igual a

$$\begin{aligned} J(\alpha) &= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha x^2\right) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\mu\omega^2}{2} x^2 \right\} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha x^2\right) \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \left\{ \frac{\hbar^2 \alpha}{2\mu} \int e^{-\alpha x^2} dx - \left( \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu} - \frac{\mu\omega^2}{2} \right) \int x^2 e^{-\alpha x^2} dx \right\} \end{aligned} \quad (9.106)$$

Después de ejecutar la integración se obtiene

$$J(\alpha) = \frac{1}{4} \left( \frac{\hbar^2 \alpha}{\mu} + \frac{\mu\omega^2}{\alpha} \right) \quad (9.107)$$

de donde, al calcular la derivada sobre  $\alpha$  e igualarla a cero se obtiene que  $\alpha_0 = \mu\omega/\hbar$ .

En consecuencia, la función de onda y el valor de la energía resultan expresados como

$$\psi_0(x) = \psi(x, \alpha_0) = \left( \frac{\mu\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{\mu\omega x^2}{2\hbar}\right) \quad \text{y} \quad E_0 = J(\alpha_0) = \frac{\hbar\omega}{2} \quad (9.108)$$

es decir coinciden con las soluciones exactas de la correspondiente ecuación de Schrödinger.

# Capítulo 10

## Sistemas de partículas idénticas.

Se dice que dos partículas son **idénticas** si su masa ( $m$ ), carga ( $e$ ), spin ( $s$ ) y otras características permanentes tienen los mismos valores. Por lo tanto, se comportan de idéntica manera cuando están sometidas a condiciones iguales.

Desde el punto de vista de la Física Clásica las partículas idénticas no pierden su individualidad. En efecto, si se les denotara de tal manera que en el instante inicial sus coordenadas y sus velocidades, por ejemplo, tuvieran valores definidos diferentes, al cabo de un tiempo sería posible, por lo menos teóricamente, decir dónde se va a encontrar cada una, puesto que su trayectoria se determina unívocamente por las condiciones iniciales.

Otra es la situación en la Mecánica Cuántica. Por ejemplo, si en el instante inicial cada partícula ocupara un lugar determinado, sus funciones de estado serían paquetes de ondas (con todos los valores posibles del momento lineal) que se dispersarían en el tiempo y se mezclarían en el espacio de tal modo que sería imposible indicar cuál de las partículas está en tal lugar y cuál en otro.

Si como condiciones iniciales se hubieran dado sus momentos lineales la situación sería análoga. Cualquier partícula con momento definido es descrita por una onda plana y su densidad de probabilidad es uniforme en todo el espacio. Podrían, por lo tanto, interactuar e intercambiar sus momentos, de tal modo que si en un momento dado se mide el momento de una partícula, no es posible saber de cuál de las partículas se trata.

En consecuencia, en la Mecánica Cuántica las partículas idénticas son **indistinguibles**.

### 10.1. Propiedades del hamiltoniano y sus funciones propias.

Si las partículas son indistinguibles, el hamiltoniano que describe tales sistemas tiene que ser simétrico, es decir invariante, con respecto de la transposición (intercambio) de dos componentes cualesquiera del sistema, es decir

$$\hat{H}(1, \dots, k, \dots, j, \dots, N) = \hat{H}(1, \dots, j, \dots, k, \dots, N) \quad (10.1)$$

Por ejemplo, esta propiedad la posee el hamiltoniano de un sistema de partículas en un campo potencial exterior

$$H(1, \dots, N) = \sum_i^N K(i) + \sum_i^N U(i) + \sum_{j \neq k}^N W(j, k), \quad (10.2)$$

donde  $K(i)$  es la energía cinética de la partícula  $i$ -ésima,  $U(i)$ , su energía potencial en un campo externo y  $W(j, k)$  la energía de interacción entre dos partículas  $j$  y  $k$ , cualesquiera.

Las funciones propias de ambos hamiltonianos, correspondientes a un mismo valor de la energía, describen un mismo estado, razón por la cual deben ser, en el peor de los casos, proporcionales entre sí, o sea

$$\Psi(1, \dots, k, \dots, j, \dots, N) \propto \Psi(1, \dots, j, \dots, k, \dots, N) \quad (10.3)$$

### 10.1.1. Operadores de intercambio.

El cambio de las variables correspondientes a dos partículas cualesquiera en una función dada se puede entender como el resultado de la acción de un operador, denominado **operador de intercambio**, el cual se representa por  $\hat{P}_{jk}$ . En otras palabras, la acción del operador de intercambio sobre una función consiste en el cambio recíproco de las variables de las partículas  $j$  y  $k$

$$\hat{P}_{jk}\psi(1, \dots, j, \dots, k, \dots, N) = \psi(1, \dots, k, \dots, j, \dots, N) \quad (10.4)$$

El operador de intercambio es simétrico, porque el cambio mutuo de las variables de dos partículas  $j$  y  $k$  cualesquiera también puede ser expresado como resultado de la acción del operador  $\hat{P}_{kj}$ . En efecto,

$$\hat{P}_{kj}\psi(1, \dots, j, \dots, k, \dots, N) = \psi(1, \dots, k, \dots, j, \dots, N)$$

En consecuencia

$$\hat{P}_{jk} = \hat{P}_{kj} \quad (10.5)$$

El operador de intercambio conmuta con el hamiltoniano. En efecto,

$$\begin{aligned} \hat{P}_{jk}\hat{H}(1, \dots, j, \dots, k, \dots, N)\Psi(1, \dots, j, \dots, k, \dots, N) = \\ \hat{H}(1, \dots, k, \dots, j, \dots, N)\Psi(1, \dots, k, \dots, j, \dots, N) \end{aligned}$$

Pero, como el hamiltoniano es simétrico y

$$\Psi(1, \dots, k, \dots, j, \dots, N) = \hat{P}_{jk}\Psi(1, \dots, j, \dots, k, \dots, N)$$

entonces,

$$\begin{aligned} \hat{P}_{jk}\hat{H}(1, \dots, j, \dots, k, \dots, N)\Psi(1, \dots, j, \dots, k, \dots, N) = \\ \hat{H}(1, \dots, j, \dots, k, \dots, N)\hat{P}_{jk}\Psi(1, \dots, j, \dots, k, \dots, N). \end{aligned}$$



En consecuencia,

$$\left\{ \hat{P}_{jk} \hat{H}(1, \dots, N) - \hat{H}(1, \dots, N) \hat{P}_{kj} \right\} \Psi(1, \dots, N) = 0,$$

es decir,

$$[ \hat{P}_{jk}, \hat{H} ] = 0 \quad (10.6)$$

La función obtenida como resultado de la acción de  $\hat{P}_{jk}$  sobre una función de estado también describe el mismo estado. Esto significa que,

$$\Psi(1, \dots, k, \dots, j, \dots, N) = \lambda \Psi(1, \dots, j, \dots, k, \dots, N) \quad (10.7)$$

Por lo tanto,

$$\hat{P}_{jk}^2 \Psi(1, \dots, j, \dots, k, \dots, N) = \lambda \Psi(1, \dots, j, \dots, k, \dots, N) \quad (10.8)$$

Los valores propios del operador de intercambio son  $\pm 1$ . Estos valores se determinan de la relación siguiente

$$\hat{P}_{jk}^2 \Psi(1, \dots, N) = \hat{P}_{jk} \lambda \Psi(1, \dots, N) = \lambda^2 \Psi(1, \dots, N)$$

Como aplicar el operador  $\hat{P}_{jk}$  dos veces consecutivas significa volver a la función original se tiene

$$\lambda^2 = 1 \quad \text{es decir} \quad \lambda = \pm 1 \quad (10.9)$$

La condición de simetría o antisimetría con respecto del intercambio de dos partículas tiene que ver con todos los cuerpos que conforman el sistema, es decir no puede ser que una función sea simétrica con respecto del intercambio de algunas partículas y antisimétricas cuando se produce un intercambio de otras.

Por ejemplo, si una función para un sistema de tres cuerpos fuera simétrica con respecto de 1 y 2 y de 1 y 3 y antisimétrica con respecto de 2 y 3 significaría que

$$\Psi(1, 2, 3) = -\Psi(1, 3, 2) = -\Psi(3, 1, 2) = -\Psi(3, 2, 1) = -\Psi(1, 2, 3) \quad (10.10)$$

es decir, sería igual a cero.

La condición de simetría o antisimetría se mantiene en el tiempo, es decir si una función de estado es simétrica en un instante dado lo será en los instantes siguientes y si es antisimétrica, también. En efecto de la ecuación de Schrödinger se tiene que

$$d_t \Psi(1, \dots, N, t) = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}(1, \dots, N) \Psi(1, \dots, N, t) dt. \quad (10.11)$$

En consecuencia, si la función es (anti)simétrica, entonces, como el hamiltoniano es simétrico, la diferencial  $d_t$  con respecto del tiempo será (anti)simétrica y la función

$$\Psi(1, \dots, N, t + dt) = \Psi(1, \dots, N, t) + d_t \Psi(1, \dots, N, t) \quad (10.12)$$

igualmente.

Una vez conocida la función de estado es necesario (anti)simetrizarla. Si el sistema es simétrico, entonces la función simétrica puede ser representada por la expresión

$$\Psi_s(1, \dots, N) = \sum_{\nu} \Psi_{\nu}(1, \dots, N) \quad (10.13)$$

y si es antisimétrica por la siguiente

$$\Psi_a(1, \dots, N) = \sum_{\nu} (-1)^{\nu} \Psi_{\nu}(1, \dots, N) \quad (10.14)$$

donde  $\Psi_{\nu}(1, \dots, N)$  es la  $\nu$ -ésima permutación, es decir la función que se obtiene de la inicial mediante un número  $\nu$  de transposiciones de pares de partículas.

La fórmula explícita de ambas funciones es sumamente compleja, por eso generalmente se les representa de manera aproximada.

## 10.2. Sistemas de partículas no interactuantes.

Hay sistemas de partículas idénticas cuyos hamiltonianos pueden ser expresados como la suma de hamiltonianos correspondientes a estados individuales y, además, contiene términos relativamente pequeños que no dependen sólo de las variables de una partícula, es decir tienen, por ejemplo, la forma

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}(i) + \sum_{j \neq k} \hat{W}(j, k) \quad (10.15)$$

donde  $\hat{H}(i) = p_i^2/2m + U(i)$

Por eso, si en un principio se desprecia los términos pequeños las partículas pueden ser consideradas independientes. En este caso las funciones de estado, que podrían ser entendidas como la **aproximación cero**, pueden ser expresadas como combinaciones de los productos de las funciones  $\psi_{n_i}(i)$  que describen estados individuales.

Por lo tanto, las funciones con simetría definida se expresarán como sigue: La simétrica será igual a

$$\Psi_s(1, \dots, N) = \sum_{\nu} \hat{P}_{\nu} \psi_{n_1}(1) \cdots \psi_{n_N}(N) \quad (10.16)$$

y la antisimétrica se escribirá como

$$\Psi_a(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\nu} (-1)^{\nu} \hat{P}_{\nu} \psi_{n_1}(1) \cdots \psi_{n_N}(N) \quad (10.17)$$

### 10.3. Método de Hartree-Fock

Cuando los sistemas de partículas idénticas tienen más de dos componentes es conveniente aplicar otros métodos aproximados. En particular, para calcular los niveles energéticos de los átomos de varios electrones es muy empleado el método propuesto por Hartree en 1928 y mejorado por Fock en 1930.

Si se desprecia la interacción spin-órbita el hamiltoniano de un sistema de muchos electrones se expresa de la siguiente manera

$$\hat{H} = \sum_i \hat{H}(i) + \sum_{i \neq k} \hat{W}(i, k) \quad i, k = 1, 2, \dots, Z \quad (10.18)$$

y la energía de su estado fundamental se define a partir de la igualdad

$$J = \int \Psi^* \hat{H} \Psi d\tau = \text{mín} \quad \text{con la condición} \quad \int \Psi^* \Psi d\tau = 1 \quad (10.19)$$

El método de Hartree-Fock se basa en la hipótesis de que cada electrón se mueve, en el campo creado por el núcleo y los demás electrones, en forma independiente de los demás. Por eso, como función de prueba se toma una combinación de las funciones que describen los estados individuales

$$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_Z) = \varphi_1(\vec{r}_1) \cdots \varphi_Z(\vec{r}_Z) \quad (10.20)$$

En este caso la integral  $J$  resulta igual a

$$J = \sum_i \int \varphi_i^* \hat{H}(i) \varphi_i d\tau_i + \sum_{\substack{k, i \\ (i \neq k)}} \int \varphi_i^* \varphi_k^* \hat{W}(i, k) \varphi_i \varphi_k d\tau_i d\tau_k \quad (10.21)$$

y su variación se expresa de la siguiente manera

$$\delta J = \sum_i \int \delta \varphi_i^* \left\{ \hat{H}(i) + \sum_{k \neq i} \int \varphi_k^* \hat{W}(i, k) \varphi_k d\tau_k \right\} \varphi_i d\tau_i = 0 \quad (10.22)$$

Las variaciones  $\delta \varphi_i$  que aparecen en la fórmula anterior no son independientes, pues satisfacen las condiciones

$$\sum \int \delta \varphi_i^* \varphi_i d\tau_i = 0 \quad (10.23)$$

Para lograr que lo sean se las multiplica por factores indeterminados de Lagrange y se las agrega a la variación de  $J$ , obteniéndose la relación

$$\delta J = \sum_i \int \delta \varphi_i^* \left\{ \hat{H}_i + \sum_{k \neq i} \int \varphi_k^* \hat{W}(i, k) \varphi_k d\tau_k - \varepsilon_i \right\} \varphi_i d\tau_i = 0 \quad (10.24)$$

con las variaciones  $\delta \varphi_i$  ya independientes.

Como las variaciones son diferentes de cero la relación anterior se cumplirá si los coeficientes que acompañan a las variaciones son iguales a cero, es decir si

$$[H_i + W_i - \varepsilon_i] \varphi_i = 0 \quad (10.25)$$

donde

$$W_i = \sum_{k \neq i} \int \varphi_k^* \hat{W}(i, k) \varphi_k d\tau_k \quad \text{y} \quad H_i = \hat{H}(i) \quad (10.26)$$

Las relaciones obtenidas constituyen un sistema no lineal de ecuaciones para las funciones  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_Z$ . Hartree las obtuvo basándose en la idea de un campo promedio creado por los demás electrones y las resolvió mediante aproximaciones sucesivas. Por su parte Fock las dedujo partiendo del principio variacional.

Como funciones de la aproximación cero se toman las que describen los estados de un átomo hidrogenoide  $\varphi_i^o$ . En este caso

$$W_i^o = \sum_{k \neq i} \int \varphi_k^{*o} \hat{W}(i, k) \varphi_k^o d\tau_k \quad (10.27)$$

y las funciones de la primera aproximación se obtienen resolviendo el sistema

$$[H_i + W_i^o - \varepsilon_i] \varphi_i^1 = 0 \quad (10.28)$$

Con ayuda de éstas se calcula los nuevos valores de  $W_i$  y se encuentra las funciones en la siguiente aproximación. Este proceso se continúa hasta que las funciones obtenidas sean casi las mismas que se emplearon para calcular los últimos valores de  $W_i^1$ .

Los valores de  $\varepsilon_i$  son los valores de la energía de los electrones en el átomo y son iguales a

$$\varepsilon_i = \int \varphi_i^* H_i \varphi_i d\tau_i + \sum_{k \neq i} \int \varphi_i^* \varphi_k^* W_{ik} \varphi_k \varphi_i d\tau_i d\tau_k \quad (10.29)$$

El estado fundamental del átomo se obtiene ubicando  $Z$  electrones en los niveles con menor energía y los excitados cuando uno de ellos salta a uno de los siguientes niveles. Sin embargo, su energía no resulta igual a la suma de las de los electrones que los conforman, ya que en éstas la energía de interacción se considera dos veces. En consecuencia

$$E = \sum_i \int \varphi_i^* H_i \varphi_i d\tau_i + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,k \\ (k \neq i)}} \int \varphi_i^* \varphi_k^* W_{ik} \varphi_k \varphi_i d\tau_i d\tau_k \quad (10.30)$$

Los resultados obtenidos no consideran los efectos producidos por la indistinguibilidad de los electrones. Para ello es necesario tomar una función de prueba, dependiente tanto de las coordenadas espaciales como del spin, que sea totalmente antisimétrica. Así, para describir el estado fundamental se toma sólo una función antisimétrica del tipo

$$\Psi(\xi_1, \dots, \xi_Z) = \det \{\psi_1(\xi_1), \dots, \psi_Z(\xi_Z)\} \quad (10.31)$$

---

<sup>1</sup> Este valor se denomina Campo autoadjunto de Hartree

donde  $\det\{\dots\}$  es la expresión abreviada del determinante conformado por las funciones individuales. Para los estados excitados de los átomos la función de prueba se toma en forma de combinaciones lineales de funciones antisimétricas correspondientes a los diversos valores de los momentos orbital, spin y total.

El tipo de simetría de la función de las coordenadas depende del spin total, así que para estados con diversos valores del spin total el campo autoadjunto resulta diferente.

# Capítulo 11

## La ecuación de Dirac

La ecuación de Dirac surge como una generalización relativista de la de Schrödinger para describir partículas con espín semientero. La ecuación relativista debe ser tal que refleje correctamente los siguientes aspectos:

- En la teoría relativista  $t$  y  $\mathbf{x}$  son coordenadas que intervienen en las mismas condiciones. Por lo tanto, la ecuación relativista debe ser simétrica con respecto de dichas coordenadas, es decir, una ecuación diferencial de igual orden para ambas variables.
- La función que describe un estado con  $E$  y  $\mathbf{p}$  definidos debe ser tal que estas últimas magnitudes satisfagan la relación relativista entre ellas

$$E^2 - \mathbf{p}^2 = m^2 \quad \text{de donde} \quad E = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$$

Por otro lado, la ecuación debe ser diferente a la de Klein-Gordon, que si cumple con ambas condiciones pues es una ecuación diferencial de segundo orden con respecto de  $t$  y  $\mathbf{x}$  y satisface la relación correcta entre la energía y el momento lineal. Sin embargo, las partículas que describe tienen espín entero.

### 11.1. Hamiltoniano de la ecuación de Dirac

Para que se cumpla con la segunda condición, el hamiltoniano del sistema, de acuerdo con el principio de correspondencia, debe tener la forma

$$\hat{H} = \sqrt{\hat{\mathbf{p}}^2 + m^2}$$

y la ecuación para una partícula relativista debería tener la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) = \sqrt{\hat{\mathbf{p}}^2 + m^2} \Psi(\mathbf{x}, t) = E \Psi(\mathbf{x}, t)$$

Si el operador del lado derecho se tuviera que entender como una serie infinita sobre el operador  $\hat{\mathbf{p}}$ , la ecuación no podría satisfacer la primera de las condiciones exigidas. Por tal

razón, Dirac postuló que el hamiltoniano puede ser expresado como una combinación lineal del impulso y la masa, es decir postuló que

$$\hat{H} = \boldsymbol{\alpha}\hat{\boldsymbol{p}} + \beta m$$

y

$$\hat{H}\Psi(\boldsymbol{x}, t) = (\boldsymbol{\alpha}\hat{\boldsymbol{p}} + \beta m)\Psi(\boldsymbol{x}, t) = E\Psi(\boldsymbol{x}, t)$$

donde  $\boldsymbol{\alpha}$  y  $\beta$  son coeficientes independientes, cuya naturaleza y forma explícita deben ser determinadas.

De acuerdo con el principio de correspondencia, el operador que representa al cuadrado de la energía debe ser expresado como

$$(\hat{H})^2 = \left\{ (\alpha_i \hat{p}_i + \beta m) (\alpha_i \hat{p}_i + \beta m) \right\}_{sim},$$

es decir,

$$(\hat{H})^2 = \frac{1}{2} (\alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i) \hat{p}_i \hat{p}_k + m (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) \hat{p}_i + \beta^2 m^2$$

y la solución de la ecuación relativista debe satisfacer también la relación

$$(\hat{H})^2 \Psi(\boldsymbol{x}, t) = E^2 \Psi(\boldsymbol{x}, t)$$

Por lo tanto, los valores propios de  $\hat{\boldsymbol{p}}$  y  $m$  deben satisfacer la relación

$$\frac{1}{2} (\alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i) p_i p_k + m (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) p_i + \beta^2 m^2 = E^2$$

la cual es equivalente a la relación correcta entre masa, energía e impulso, siempre que

$$\alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i = 2\delta_{ik}, \quad \alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 \quad y \quad \beta^2 = 1, \quad (11.1)$$

lo que significa que  $\alpha$  y  $\beta$  son cuatro coeficientes independientes cuyo producto no es conmutativo.

Eso quiere decir que, como mínimo, tienen que ser matrices cuya dimensión se puede determinar a partir de las relaciones de conmutación obtenidas. En efecto, de la segunda de las mencionadas identidades se deduce que

$$\det \beta = \det (-\alpha_i) \det \beta \det \alpha_i = \det (-\alpha_i) \det \alpha_i \det \beta = \det (-\alpha_i^2) \det \beta$$

y, si se tiene en cuenta la primera relación ( con  $i = k$ ), se obtiene

$$\det \beta = (-1)^n \det \beta \quad (11.2)$$

Como  $n$  representa el rango de las matrices  $\alpha_i$  y  $\beta$ , la relación anterior establece que éstas deben tener un número par (dos, cuatro, etc.) de filas (columnas). Sin embargo, no pueden ser matrices  $2 \times 2$ , ya que en el álgebra de éstas sólo hay tres elementos independientes. Por eso,

tales matrices deben ser, por lo menos,  $4 \times 4$ .

Otra propiedad que se obtiene de las relaciones de conmutación es que la traza de las matrices  $\alpha_i$  y  $\beta$  es igual a cero. En efecto,

$$\text{Tr } \beta = -\text{Tr}(\alpha_i \beta \alpha_i) = -\sum (\alpha_i)_{rs} (\beta)_{st} (\alpha_i)_{tr} = -\sum (\beta)_{st} (\alpha_i)_{tr} (\alpha_i)_{rs} = -\text{Tr}(\beta \alpha_i \alpha_i)$$

de donde se obtiene que

$$\text{Tr } \beta = -\text{Tr } \beta \quad (11.3)$$

Finalmente, las matrices  $\alpha$  y  $\beta$  deben ser tales que permitan formular una ecuación de continuidad, análoga a la del caso no relativista. La densidad de probabilidad  $\rho(\mathbf{x}, t)$  debe seguir siendo expresada como el producto  $\Psi^\dagger \Psi$ , donde ahora  $\Psi$  es una matriz  $4 \times 4$  y  $\Psi^\dagger$  la matriz adjunta de  $\Psi$ . En efecto, si a la ecuación de Dirac

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -i \alpha_i \frac{\partial}{\partial x_i} \Psi + \beta m \Psi$$

se la multiplica por  $\Psi^\dagger$  desde la izquierda y a la ecuación adjunta

$$-i \frac{\partial}{\partial t} \Psi^\dagger = i \frac{\partial}{\partial x_i} \Psi^\dagger \alpha_i^\dagger + \Psi^\dagger \beta^\dagger m,$$

por  $\Psi$  desde la derecha, entonces, después de restarlas miembro a miembro se obtendrá

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Psi^\dagger \Psi) + \left( \Psi^\dagger \alpha_i \frac{\partial}{\partial x_i} \Psi + \frac{\partial}{\partial x_i} \Psi^\dagger \alpha_i^\dagger \Psi \right) + im \Psi^\dagger (\beta^\dagger - \beta) \Psi = 0$$

Para que la relación anterior sea equivalente a la ecuación de continuidad, es necesario que el segundo término tenga sentido de divergencia del vector de corriente y que el tercero sea igual a cero. Ésto es posible si

$$\beta^\dagger = \beta \quad \text{y} \quad \alpha_i^\dagger = \alpha_i, \quad (11.4)$$

lo que significa que  $\beta$  y  $\alpha$  deben ser matrices hermíticas.

En este caso, el tercer sumando se anula, el segundo será igual a

$$\Psi^\dagger \alpha_i \frac{\partial}{\partial x_i} \Psi + \frac{\partial}{\partial x_i} \Psi^\dagger \alpha_i \Psi = \frac{\partial}{\partial x_i} (\Psi^\dagger \alpha_i \Psi) = \nabla \cdot (\Psi^\dagger \alpha \Psi)$$

y la ecuación de continuidad se escribirá como

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

donde  $\rho = \Psi^\dagger \Psi$  y  $\mathbf{j} = \Psi^\dagger \alpha \Psi$ .



Sin embargo, la forma explícita de las matrices  $\beta$  y  $\alpha$  queda sin determinar y pueden, por lo tanto, ser elegidas de diferentes maneras. La más empleada es la representación en la cual la matriz  $\beta$  es diagonal<sup>1</sup>

$$\beta = \begin{pmatrix} b_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b_4 \end{pmatrix}.$$

Para que  $\det \beta = 1$  y  $\text{Tr} \beta = 0$  es imprescindible que, para todos los valores de  $i$ ,  $b_i^2 = 1$ , es decir que  $b_i = \pm 1$ . Por lo tanto, la matriz  $\beta$  puede ser expresada como

$$\beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$$

donde  $I$  y  $0$  representan la matrices identidad y nula, respectivamente

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad 0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Por su parte, las matrices  $\alpha_i$  deben tener la forma

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} a_i & b_i \\ b_i^+ & c_i \end{pmatrix}$$

donde  $a_i = a_i^+$ ,  $b_i$  y  $c_i = c_i^+$  son matrices  $2 \times 2$ , cuya forma explícita se puede obtener de las relaciones de conmutación. Así, de

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = \begin{pmatrix} 2a_i & 0 \\ 0 & -2c_i \end{pmatrix} = 0$$

se obtiene que  $a_i = c_i = 0$ . Por otro lado, de

$$\alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i = \begin{pmatrix} b_i b_k^+ + b_k b_i^+ & 0 \\ 0 & b_i^+ b_k + b_k^+ b_i \end{pmatrix} = 2\delta_{ik}$$

se deduce que  $b_i = b_i^+$ . Por lo tanto, como  $b_i$  pueden ser empleadas las matrices de Pauli.

En resumen

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$$

donde

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

Otra representación útil<sup>2</sup> es la que se emplea al analizar procesos electrodébiles en los que intervienen neutrinos (levógiros) o antineutrinos (dextrógiros). En este caso las matrices de Dirac se eligen de tal modo que resultan expresadas mediante las siguientes fórmulas

$$\beta = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & -\sigma \end{pmatrix},$$

<sup>1</sup>Conocida con el nombre de *representación de Dirac-Pauli*

<sup>2</sup>Denominada *representación de Weyl*.

Esta representación está relacionada con la de Pauli-Dirac mediante la transformación

$$\gamma_W = \hat{O}^{-1} \gamma_D \hat{O} \quad \text{donde} \quad \hat{O} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} I & I \\ -I & I \end{pmatrix}$$

En consecuencia, la ecuación de Dirac puede ser escrita de la siguiente manera<sup>3</sup>

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) = (\boldsymbol{\alpha} \hat{\mathbf{p}} + \beta m) \Psi(\mathbf{x}, t)$$

o también como

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) = -i \alpha_i \frac{\partial}{\partial x_i} \Psi(\mathbf{x}, t) + \beta m \Psi(\mathbf{x}, t)$$

donde

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

Por su parte, para la matriz adjunta  $\Psi^\dagger$  la ecuación quedará expresada como

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi^\dagger(\mathbf{x}, t) = -i \frac{\partial}{\partial x_i} \Psi^\dagger(\mathbf{x}, t) \alpha_i - \Psi^\dagger(\mathbf{x}, t) \beta m,$$

o también como

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi^\dagger(\mathbf{x}, t) = \Psi^\dagger(\mathbf{x}, t) (\boldsymbol{\alpha} \hat{\mathbf{p}} - \beta m)$$

donde

$$\Psi^\dagger = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*).$$

## 11.2. La ecuación de Dirac en forma covariante

La ecuación de Dirac se emplea para describir electrones relativistas. Por lo tanto, es conveniente expresarla en un formalismo congruente con la teoría de la relatividad. Éso significa que, así como las coordenadas  $\mathbf{x}$  y el tiempo  $t$  constituyen un cuadrivector  $x^\alpha = t, \mathbf{x}$ , las demás magnitudes físicas deben ser agrupadas en cuadrutensores de diferente rango. En efecto, las derivadas temporal y espaciales (y los operadores que representan)

$$\hat{p}_0 = i \frac{\partial}{\partial t}, \quad \text{y} \quad \hat{\mathbf{p}} = -i \boldsymbol{\nabla} = -i \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}$$

se agrupan en el vector

$$\hat{p}^\alpha = i \frac{\partial}{\partial x_\alpha} = \left( i \frac{\partial}{\partial t}, -i \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right) = (\hat{p}_0, \hat{\mathbf{p}})$$

---

<sup>3</sup>Lo expresado no es una deducción de la ecuación de Dirac. Ésta, lo mismo que la ecuación de Schrödinger, no se deduce sino se postula en base a ciertos criterios, como los expuestos, que le sirven de sustento.

En cambio, las matrices  $\alpha$  y  $\beta$  no se agrupan de manera directa e inmediata sino después de una transformación tal que nos permita expresar la ecuación de Dirac en forma covariante. Como componente cero del vector se toma  $\beta$  y las componentes espaciales se expresan como un producto de  $\beta$  por  $\alpha$ . En otras palabras se postula el 4-vector de matrices

$$\gamma^\mu = (\beta, \beta\alpha) = (\gamma^0, \gamma^i)$$

donde

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix}$$

En efecto, para escribir la ecuación de Dirac en forma covariante es necesario multiplicarla por  $\beta$  desde la izquierda

$$\beta \times / \left( i \frac{\partial}{\partial t} - \alpha \hat{\mathbf{p}} - \beta m \right) \Psi = 0,$$

después de lo cual se obtiene

$$\left( \beta \hat{p}_0 - \beta \alpha \hat{\mathbf{p}} - \beta^2 m \right) \Psi = 0,$$

es decir

$$\left( \gamma^0 \hat{p}_0 - \boldsymbol{\gamma} \hat{\mathbf{p}} - m \right) \Psi = 0$$

La ecuación resulta siendo invariante sólo si la expresión encerrada entre paréntesis es un escalar. Por lo tanto, como  $\hat{p}_0$  y  $\hat{\mathbf{p}}$  conforman un 4-vector, entonces  $\gamma^0$  y  $\boldsymbol{\gamma}$  también deben conformar un 4-vector, con lo cual la ecuación de Dirac se escribe de la siguiente manera

$$\left( \gamma^\mu \hat{p}_\mu - m \right) \Psi = 0 \quad (11.5)$$

Si se tiene en cuenta las propiedades de las matrices  $\beta$  y  $\alpha_i$  se puede ver que  $\gamma^0$  es hermítica y las matrices  $\gamma^i$ , antihermíticas. La antihermiticidad de  $\gamma^i$  se determina al calcular su adjunta

$$(\gamma^i)^\dagger = (\beta \alpha_i)^\dagger = \alpha_i^\dagger \beta^\dagger = \alpha_i \beta = -\beta \alpha_i = -\gamma^i$$

También se puede demostrar que las matrices  $\gamma^\mu$  satisfacen las siguientes relaciones de conmutación

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} I.$$

En efecto, si  $\mu = \nu = 0$  se tendrá

$$\gamma^0 \gamma^0 + \gamma^0 \gamma^0 = 2(\gamma^0)^2 = 2\beta^2 = 2I$$

y si  $\mu = \nu = i$  la relación se expresa como

$$\beta \alpha_i \beta \alpha_i + \beta \alpha_i \beta \alpha_i = 2\beta \alpha_i \beta \alpha_i = -2\beta \beta \alpha_i \alpha_i = -2I$$

Si la relación se escribe para  $\mu = 0$  y  $\nu = i$  se tendrá

$$\beta \beta \alpha_i + \beta \alpha_i \beta = \beta \beta \alpha_i - \beta \beta \alpha_i = 0$$

y si  $\mu = i$  y  $\nu = j$  con  $i \neq j$  se obtendrá

$$\beta\alpha_i\beta\alpha_j + \beta\alpha_j\beta\alpha_i = -\beta\beta\alpha_i\alpha_j - \beta\beta\alpha_j\alpha_i = -\alpha_i\alpha_j - \alpha_j\alpha_i = 0$$

La ecuación para la adjunta se obtiene de manera estándar. Se toma la conjugación compleja de todas las magnitudes involucradas

$$\left(i\gamma^\nu \frac{\partial}{\partial x^\nu} - m\right)^* \Psi^* = 0$$

$$-i\gamma^{0*} \frac{\partial}{\partial x^0} \Psi^* + i\gamma^{k*} \frac{\partial}{\partial x^k} \Psi^* - m\Psi^* = 0,$$

y luego la transpuesta de toda la expresión

$$-i \frac{\partial}{\partial x^0} \Psi^\dagger \gamma^{0\dagger} + i \frac{\partial}{\partial x^k} \Psi^\dagger \gamma^{k\dagger} - m\Psi^\dagger = 0$$

y la sustitución de  $\gamma^\dagger$  por las matrices  $\gamma$

$$-i \frac{\partial}{\partial x^0} \Psi^\dagger \gamma^0 - i \frac{\partial}{\partial x^k} \Psi^\dagger \gamma^k - m\Psi^\dagger = 0$$

A continuación la relación obtenida se multiplica por  $\gamma^0$  desde la derecha

$$i \frac{\partial}{\partial x^0} \Psi^\dagger \gamma^0 \gamma^0 + i \frac{\partial}{\partial x^k} \Psi^\dagger \gamma^k \gamma^0 + m\Psi^\dagger \gamma^0 = 0$$

y luego se aplica las propiedades de anticonmutación de las matrices  $\gamma$

$$i \frac{\partial}{\partial x^0} \Psi^\dagger \gamma^0 \gamma^0 - i \frac{\partial}{\partial x^k} \Psi^\dagger \gamma^0 \gamma^k + m\Psi^\dagger \gamma^0 = 0$$

Finalmente, después de introducir la función  $\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \gamma^0$ , se obtiene

$$i \frac{\partial}{\partial x^0} \bar{\Psi} \gamma^0 - i \frac{\partial}{\partial x^k} \bar{\Psi} \gamma^k + m\bar{\Psi} = 0$$

es decir

$$i \frac{\partial}{\partial x^\mu} \bar{\Psi} \gamma^\mu + m\bar{\Psi} = 0$$

o también

$$\bar{\Psi} \left( \hat{p}_\mu \gamma^\mu + m \right) = 0$$

donde el operador diferencial  $\hat{p}_\mu$  actúa hacia la izquierda y la función  $\bar{\Psi}$  tiene la forma siguiente

$$\bar{\Psi} = (\psi_1^*, \psi_2^*, -\psi_3^*, -\psi_4^*)$$

### 11.3. Álgebra de las matrices de Dirac

Antes de analizar las propiedades de la ecuación de Dirac, así como de la función  $\Psi$  es necesario conocer las propiedades fundamentales de las matrices de Dirac, una de las cuales es que generan un álgebra. Se dice que **un conjunto de elementos conforman un álgebra** cuando *cualquier combinación lineal con coeficientes complejos, así como cualquier producto de los mismos, conforman un ente cerrado con respecto de la suma, la multiplicación entre ellos y la multiplicación por un número complejo.*

Los elementos del álgebra *generan un espacio, en el cual debe existir un grupo de elementos independientes a través de los cuales, en forma de combinaciones lineales, se expresan todos los demás elementos.* El número de elementos independientes ( $n$ ) está relacionado con el rango ( $r$ ) de las matrices de la representación mediante la siguiente fórmula

$$n = r^2$$

Por lo tanto, en el álgebra de Dirac existen sólo dieciseis (16) elementos independientes. En efecto, además de las cuatro matrices  $\gamma^\mu$ , son independientes sólo los productos de dos, tres, y cuatro matrices, ya que cualquier producto de un número mayor de matrices se puede reducir a alguno de los casos anteriores. Así, el producto de cinco matrices forzosamente contiene dos matrices iguales, cuyo producto es la matriz identidad, por eso se reduce a un producto de tres matrices. Por idénticas razones los productos de más matrices se reducen a productos cuatro, tres o dos matrices, o a una sólo matriz.

En conclusión, las matrices independientes que surgen en el álgebra son:

- La matriz identidad ( $I$ ) que es un cuadrascalor y puede ser expresada como el producto de dos matrices  $\gamma$  iguales. En efecto,

$$I = \gamma^0 \gamma^0 = \gamma^i \gamma^i$$

- Las cuatro matrices de Dirac ( $\gamma^\lambda$ ) que conforman un cuadvector.
- Seis matrices ( $\sigma^{\lambda\mu}$ ) que se definen a partir del producto de dos matrices  $\gamma$  diferentes como

$$\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2} (\gamma^\mu \gamma^\nu - \gamma^\nu \gamma^\mu) = i\gamma^\lambda \gamma^\mu, \quad \mu \neq \nu$$

y, por lo tanto, resultan siendo elementos de un tensor antisimétrico de segundo rango.

- Una matriz ( $\gamma^5$ ), de naturaleza pseudoescalar<sup>4</sup>, la cual se expresa como el producto de cuatro matrices diferentes, es decir,

$$\gamma^5 = i\gamma^0 \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3 = -i\gamma_0 \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3$$

---

<sup>4</sup>Seudoescalar es una magnitud que no cambia durante las rotaciones, pero si cambia de signo durante la inversión de las coordenadas.

- Cuatro matrices ( $\gamma^\mu \gamma^5$ ) que expresan los productos de tres matrices diferentes y conforman un cuadruseudovector<sup>5</sup>.

Para demostrar que el máximo número de matrices independientes es dieciséis se tiene que verificar que cualquier combinación lineal de las matrices anteriores

$$M = a I + b_\mu \gamma^\mu + c_{\lambda\mu} \sigma^{\lambda\mu} + d_5 \gamma^5 + e_\mu \gamma^\mu \gamma^5$$

es cero si sus coeficientes son todos ceros y es diferente de cero en caso contrario. Esto es posible si se emplea las propiedades de las trazas.

Por ejemplo, si se toma la traza de  $M$

$$\text{Tr}(M) = a \text{Tr}(I) + b_\mu \text{Tr}(\gamma^\mu) + c_{\lambda\mu} \text{Tr}(\sigma^{\lambda\mu}) + d_5 \text{Tr}(\gamma^5) + e_\mu \text{Tr}(\gamma^\mu \gamma^5)$$

y se tiene en cuenta que todas las trazas de la derecha menos la primera son iguales a cero se puede determinar que

$$\text{Tr}(M) = a \text{Tr}(I) \quad \text{por lo tanto} \quad a = 1/4 \text{Tr}(M)$$

Luego, se puede calcular la traza del producto  $\gamma^\mu M$

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\gamma^\mu M) &= a \text{Tr}(\gamma^\mu I) + b_\mu \text{Tr}(\gamma^\mu \gamma^\mu) + c_{\lambda\mu} \text{Tr}(\gamma^\mu \sigma^{\lambda\mu}) + \\ & d_5 \text{Tr}(\gamma^\mu \gamma^5) + e_\mu \text{Tr}(\gamma^\mu \gamma^\mu \gamma^5) \end{aligned}$$

que es igual a

$$\text{Tr}(\gamma^\mu M) = a \text{Tr}(\gamma^\mu) + b_\mu \text{Tr}(I) + c_{\lambda\mu} \text{Tr}(\gamma^\mu \sigma^{\lambda\mu}) + d_5 \text{Tr}(\gamma^\mu \gamma^5) + e_\mu \text{Tr}(\gamma^5)$$

y, en consecuencia,

$$\text{Tr}(\gamma^\mu M) = b_\mu \text{Tr}(I) \quad \text{es decir} \quad b_\mu = \frac{1}{4} \text{Tr}(\gamma^\mu M)$$

Multiplicando la matriz  $M$  por  $\sigma^{\lambda\mu}$ ,  $\gamma^5$  y  $\gamma^\mu \gamma^5$  se puede demostrar que

$$\begin{aligned} M &= \frac{1}{4} \text{Tr}(M) I + \frac{1}{4} \text{Tr}(M \gamma^\mu) \gamma^\mu + \frac{1}{2} \text{Tr}(M \sigma^{\lambda\mu}) \sigma^{\lambda\mu} \\ &+ \frac{1}{4} \text{Tr}(M \gamma^5) \gamma^5 + \frac{1}{4} \text{Tr}(M \gamma^\mu \gamma^5) \gamma^\mu \gamma^5 \end{aligned}$$

En conclusión, cualquier matriz  $4 \times 4$  puede ser expresada a través de las matrices de Dirac. En particular, las matrices  $\alpha$  y  $\beta$ , a través de las cuales se definieron las matrices  $\gamma$ , resultan iguales a

$$\alpha_i = \gamma_0 \gamma^i \quad \text{y} \quad \beta = \gamma^0.$$

---

<sup>5</sup>Un pseudovector es aquel que se transforma como un vector durante las rotaciones, pero sus componentes espaciales mantienen su signo durante una inversión del espacio, no así la temporal que sí cambia de signo.

Pero también se pueden introducir otras matrices importantes. Así, las matrices  $\Sigma_i$ , que se relacionan con el espín, se definen como

$$\Sigma_i = \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\sigma^{jk} = \gamma^5\gamma^i\gamma^0$$

de tal modo que resultan iguales a

$$\Sigma_1 = \sigma^{23}, \quad \Sigma_2 = \sigma^{31} \quad \text{y} \quad \Sigma_3 = \sigma^{12},$$

es decir, se expresan a través de las matrices de Pauli mediante la relación

$$\Sigma_i = \begin{pmatrix} -\sigma_i & 0 \\ 0 & -\sigma_i \end{pmatrix}$$

## 11.4. Ecuación de Dirac para el electrón libre

En general la función de onda de Dirac para un estado arbitrario se puede expresar como un desarrollo sobre las funciones propias del operador del momento lineal, es decir,

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \Psi(\mathbf{p}, t) \exp\left(\mp \frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}\right) d\mathbf{p},$$

donde  $\Psi(\mathbf{p}, t)$  es un espinor de cuatro componentes que depende del momento lineal  $\mathbf{p}$  y el tiempo  $t$ .

Si la partícula estuviera en un estado con momento lineal definido, el espinor  $\Psi(\mathbf{p}, t)$  debe tener una dependencia exponencial con respecto al tiempo

$$\Psi(\mathbf{p}, t) \propto \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{E} t\right)$$

y la función de onda será simplemente

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \Psi(\mathcal{E}, \mathbf{p}) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} (\mathcal{E} t \mp \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})\right\}$$

de tal modo que reemplazarla en la ecuación de Dirac se tendrá

$$\left\{-\gamma^0 \mathcal{E} \pm \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p} - m\right\} \Psi(\mathcal{E}, \mathbf{p}) = 0$$

Si las matrices de Dirac son expresadas a través de las de Pauli, entonces el espinor

$$\Psi(\mathcal{E}, \mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \varphi_a \\ \varphi_b \end{pmatrix},$$

y la ecuación precedente resulta equivalente al sistema

$$-(\mathcal{E} + m)\varphi_a \pm (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\varphi_b = 0$$

$$\mp (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\varphi_a + (\mathcal{E} - m)\varphi_b = 0.$$

Se ha obtenido un sistema homogéneo de ecuaciones para los espinores  $\varphi_a$  y  $\varphi_b$ , el cual puede tener soluciones no triviales sólo si el determinante conformado por sus coeficientes

$$\begin{vmatrix} -(\mathcal{E} + m) & \pm \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ \mp \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & (\mathcal{E} - m) \end{vmatrix} = 0,$$

es decir que

$$-\mathcal{E}^2 + m^2 + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})^2 = 0$$

Para resolver la igualdad anterior es necesario tener presente que

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})^2 &= \sum_{ij} \sigma_i p_i \sigma_j p_j = \sum_i \sigma_i^2 p_i^2 + \sum_{i \leq j} \sigma_i \sigma_j p_i p_j + \sum_{i \geq j} \sigma_i \sigma_j p_i p_j \\ &= \sum_i \sigma_i^2 p_i^2 + \sum_{i \leq j} \sigma_i \sigma_j (p_i p_j - p_j p_i) \\ &= \sum_i p_i^2 + i \sum_k \sigma_k (\mathbf{p} \times \mathbf{p})_k \end{aligned}$$

debido a lo cual

$$-\mathcal{E}^2 + m^2 + \mathbf{p}^2 = 0 \quad \text{de donde} \quad \mathcal{E} = \pm \sqrt{m^2 + \mathbf{p}^2} = \pm p^0 \equiv E$$

Cuando  $\mathcal{E} = p^0$ , vale decir cuando la energía es positiva, la función debe ser tomada de la siguiente manera

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \Psi(+p^0, \mathbf{p}) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (p^0 t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) \right\}$$

debido a lo cual el sistema de ecuaciones resultará como

$$-(p^0 + m)\varphi_a + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\varphi_b = 0$$

$$-(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\varphi_a + (p^0 - m)\varphi_b = 0.$$

y, si se emplea la primera de las dos ecuaciones, se obtiene

$$\varphi_a = \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{p^0 + m} \varphi_b \quad \text{y} \quad \Psi(+p^0, \mathbf{p}) = N_+ \left( \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{p^0 + m} \varphi \right),$$

En cambio, para  $\mathcal{E} = -p^0$ , la función debe tener la forma

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \Psi(-p^0, \mathbf{p}) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (p^0 t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) \right\}$$

y el sistema de ecuaciones

$$-(-p^0 + m)\varphi_a - (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\varphi_b = 0$$

$$+(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\varphi_a + (-p^0 - m)\varphi_b = 0.$$



de tal modo que, al emplear la segunda de las ecuaciones, se deduce

$$\varphi_b = -\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{p^0 + m} \varphi_a \quad \text{y} \quad \Psi(-p^0, \mathbf{p}) = N_- \begin{pmatrix} \varphi \\ -\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{p^0 + m} \varphi \end{pmatrix}$$

En consecuencia, el espinor de cuatro componentes resulta expresado a través de un espinor de dos componentes, lo que significa que para cada valor de la energía (positivo o negativo) sólo existen dos estados independientes y

$$\Psi^\pm(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \Psi(\pm p^0, \mathbf{p}) \exp \left\{ \pm \frac{i}{\hbar} (p^0 t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) \right\}$$

## 11.5. Ecuación de Dirac en la representación de impulsos.

Si la función  $\Psi^+(\mathbf{x}, t)$  se reemplazara en la ecuación covariante de Dirac

$$\left( \gamma^\mu \hat{p}_\mu - m \right) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \Psi(p^0, \mathbf{p}) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (p^0 t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) \right\} = 0$$

se obtendrá

$$\left\{ -\gamma^0 p^0 + \boldsymbol{\gamma} \mathbf{p} - m \right\} \Psi(p^0, \mathbf{p}) = 0$$

es decir

$$(\gamma^\mu p_\mu + m) \Psi^+(p) = 0 \quad \text{donde} \quad \Psi^+(p) \equiv \Psi(p^0, \mathbf{p}).$$

De manera análoga, al reemplazar la función  $\Psi^-(\mathbf{x}, t)$  en la ecuación de Dirac

$$\left( \gamma^\mu \hat{p}_\mu - m \right) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \Psi(-p^0, \mathbf{p}) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (-p^0 t + \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) \right\} = 0$$

resulta

$$\left\{ \gamma^0 p^0 - \boldsymbol{\gamma} \mathbf{p} - m \right\} \Psi(-p^0, \mathbf{p}) = 0$$

o sea

$$(\gamma^\mu p_\mu - m) \Psi^-(p) = 0 \quad \text{con} \quad \Psi^-(p) \equiv \Psi(-p^0, \mathbf{p}).$$

### 11.5.1. Ecuación para los espinores adjuntos.

Las ecuaciones para los espinores adjuntos  $(\Psi^\pm(p))^\dagger$  se pueden obtener de dos maneras. La primera consiste en emplear la ecuación para  $(\Psi^\pm(x))^\dagger$ , en la cual esta función es reemplazada por su forma explícita

$$\left( \Psi^\pm(\mathbf{x}, t) \right)^\dagger = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \Psi^\dagger(\pm p^0, \mathbf{p}) \exp \left\{ \mp \frac{i}{\hbar} (p^0 t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) \right\}.$$

En efecto, después de tomar las derivadas, para  $(\Psi^\pm(p))^\dagger$  indicadas se obtiene la ecuación

$$(\pm p^0)(\Psi^\pm)^\dagger + (\mp p^i)(\Psi^\pm)^\dagger \alpha^i + (\Psi^\pm)^\dagger \beta m = 0$$

y después de una multiplicación por  $\beta$ , seguida de la anticonmutación de  $\alpha_i$  y  $\beta$ , se tendrá

$$\pm p^0 (\Psi^\pm)^\dagger \beta \pm p^i (\Psi^\pm)^\dagger \beta \alpha^i + (\Psi^\pm)^\dagger m = 0$$

Como  $\beta = \gamma^0$  y  $\beta \alpha_i = \gamma^i$  la ecuación precedente puede ser escrita como

$$\pm p^0 (\Psi^\pm)^\dagger \gamma^0 \pm p^i (\Psi^\pm)^\dagger \gamma^i + (\Psi^\pm)^\dagger m = 0$$

o también

$$(\Psi^\pm)^\dagger \left\{ p^0 \gamma^0 + p^i \gamma^i \pm m \right\} = 0$$

Si ahora la ecuación obtenida es multiplicada por  $\gamma^0$  desde la derecha se tendrá

$$(\Psi^\pm)^\dagger \left\{ p^0 \gamma^0 \gamma^0 + p^i \gamma^i \gamma^0 \pm m \gamma^0 \right\} = 0$$

y, después de la anticonmutación,

$$\overline{\Psi}^\pm \left\{ p^0 \gamma^0 - p^i \gamma^i \pm m \right\} = 0$$

es decir

$$\overline{\Psi}^\pm \left\{ p^\mu \gamma^\mu \pm m \right\} = 0$$

Un resultado análogo se puede obtener si se calcula la adjunta de la ecuación covariante para  $\Psi^\pm$

$$\left\{ \gamma^\mu p_\mu \pm m \right\} \Psi^\pm(p) = 0$$

la cual resulta teniendo la forma

$$(\Psi^\pm)^\dagger \left\{ (\gamma^\mu)^\dagger p_\mu^\dagger \pm m \right\} = 0$$

es decir

$$(\Psi^\pm)^\dagger \left\{ \gamma^0 p^0 + \gamma^i p^i \pm m \right\} = 0$$

Si la ecuación obtenida se multiplica por  $\gamma^0$  desde la derecha se obtiene

$$(\Psi^\pm)^\dagger \left\{ \gamma^0 \gamma^0 p^0 + \gamma^i \gamma^0 p^i \pm m \right\} = 0$$

resultado que, después de la anticonmutación, puede ser escrito como

$$(\Psi^\pm)^\dagger \left\{ \gamma^0 \gamma^0 p^0 - \gamma^0 \gamma^i p^i \pm m \right\} = 0$$

es decir

$$\overline{\Psi}^\pm \left\{ \gamma^\mu p_\mu \pm m \right\} = 0$$

### 11.5.2. Propiedades de los espinores $\Psi(\pm p)$

Si a la ecuación para  $\Psi(\pm p)$  la multiplicamos por

$$\bar{\Psi}(\pm p)\gamma_\alpha \times / (\gamma^\mu p_\mu \pm m) \Psi(\pm p) = 0$$

y a la relación para  $\bar{\Psi}(\pm p)$ , por

$$\bar{\Psi}(\pm p) (\gamma^\mu p_\mu \pm m) = 0 / \times \gamma^\alpha \Psi(\pm p),$$

y luego sumamos ambos resultados se obtiene

$$\bar{\Psi}(\pm p)p_\mu (\gamma^\alpha \gamma^\mu + \gamma^\mu \gamma^\alpha) \Psi(\pm p) = \mp 2m \bar{\Psi}(\pm p)\gamma^\alpha \Psi(\pm p)$$

lo cual es equivalente a

$$p^\alpha \bar{\Psi}(\pm p)\Psi(\pm p) = \mp m \bar{\Psi}(\pm p)\gamma^\alpha \Psi(\pm p)$$

ya que

$$\gamma^\alpha \gamma^\mu p_\mu + \gamma^\mu p_\mu \gamma^\alpha = 2p^\alpha$$

Cuando  $\alpha = 0$ ,

$$\bar{\Psi}(\pm p)\gamma^0 \Psi(\pm p) = \Psi^\dagger(\pm p)\Psi(\pm p) > 0$$

Por lo tanto,

$$\bar{\Psi}(\pm p)\Psi(\pm p) \leq 0$$

lo que significa que para los espinores  $\Psi(\pm p)$  se puede postular la siguiente condición de normalización

$$\bar{\Psi}(\pm p)\Psi(\pm p) = \mp 2m$$

gracias a lo cual se obtiene

$$\bar{\Psi}(\pm p)\gamma^\alpha \Psi(\pm p) = 2p^\alpha$$

## 11.6. Espín de las partículas de Dirac

Un operador que puede ser entendido como el operador del espín se obtiene a partir de las matrices de Dirac mediante la siguiente relación

$$\Sigma^i = \frac{1}{2}\varepsilon^{ijk}\sigma_{jk} = \frac{i}{2}\varepsilon^{ijk}\gamma_j\gamma_k$$

Para  $i = 1$ , de la definición anterior se tendrá

$$\Sigma^1 = \frac{i}{2}(-\gamma^2\gamma^3 + \gamma^3\gamma^2) = -i\gamma^2\gamma^3$$

lo que significa que

$$\Sigma^1 = -i\gamma^0\gamma^0\gamma^2\gamma^3\gamma^1\gamma^1 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3\gamma^0\gamma^1 = \gamma^5\gamma^0\gamma^1$$

es decir, para un  $i$  arbitrario, los operadores  $\Sigma^i$  se expresarán como

$$\Sigma^i = \gamma^5 \gamma^0 \gamma^i$$

de modo que, en la representación de Dirac-Pauli, tendrán la forma

$$\Sigma^i = \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix}$$

La acción de su componente  $\Sigma_z$  sobre el espinor  $\Psi^+(p)$  en el sistema de reposo de la partícula, en el cual tal espinor tiene la forma

$$\Psi^+(p) = \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi \end{pmatrix},$$

se transforma en

$$\begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi \end{pmatrix} = s \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi \end{pmatrix}$$

y luego en

$$\sigma_z \varphi = s \varphi$$

La relación precedente no es otra cosa que la ecuación para los valores propios de la componente  $z$  del espín. En consecuencia, los espinores  $\varphi$  son funciones propias del operador del espín.

De su fórmula general, se puede verificar que los operadores  $\Sigma^i$  satisfacen las relaciones de conmutación de los operadores de momento angular. Por lo tanto, el operador del espín de una partícula relativista puede ser definido de tal manera que en su sistema de reposo tenga la forma

$$\hat{S}^\alpha = \left( 0, \frac{1}{2} \Sigma \right)$$

Para verificar que el operador  $\hat{S}^\alpha$  es el operador del espín es conveniente introducir el pseudovector de Pauli-Lubanski

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_\alpha &= \frac{1}{4} \varepsilon_{\alpha\beta\mu\nu} p^\beta \sigma^{\mu\nu} = -\frac{i}{2} \gamma^5 \sigma_{\alpha\beta} p^\beta \\ &= \frac{1}{2} \gamma^5 (\gamma_\alpha \gamma_\beta p^\beta - p_\alpha) \end{aligned}$$

entre cuyas propiedades es necesario destacar, en primer lugar, el hecho de que es un vector ortogonal al vector  $p^\alpha$ . En efecto,

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_\alpha p^\alpha &= \frac{1}{2} \gamma^5 (\gamma_\alpha \gamma^\beta p_\beta - p_\alpha) p^\alpha \\ &= \frac{1}{2} \gamma^5 (\gamma^\alpha \gamma^\beta p_\beta p_\alpha - p_\alpha p^\alpha) \\ &= \frac{1}{2} \gamma^5 (p^2 - p^2) = 0 \end{aligned}$$

Por lo tanto, en el sistema de reposo de la partícula, se tendrá que

$$\mathcal{W}^0_{/p=0} = 0 \quad \text{y} \quad \mathcal{W}^i_{/p=0} = -\frac{1}{2}\Sigma^i m$$

de modo que el vector  $\hat{\mathcal{S}}^\alpha$  puede ser expresado como

$$\hat{\mathcal{S}}^\alpha = \frac{\mathcal{W}^\alpha}{m}$$

Seguidamente es necesario introducir un pseudovector unitario ortogonal al vector  $p^\alpha$ , es decir, un pseudovector  $n^\alpha$  con las siguientes propiedades

$$n^\alpha p_\alpha = 0, \quad n^2 = -1 \quad \text{y} \quad n^\alpha_{/p=0} = (0, \mathbf{n}),$$

y el operador de proyección del espín sobre el pseudovector  $n^\alpha$ .

$$\hat{\mathcal{S}}_n = -\hat{\mathcal{S}}^\alpha n_\alpha = -\frac{1}{2m}\gamma^5\gamma^\alpha n_\alpha\gamma^\beta p_\beta$$

el cual conmuta con el operador  $\gamma^\mu p_\mu$ . En efecto,

$$\begin{aligned} \left[ \hat{\mathcal{S}}_n, \gamma^\mu p_\mu \right] &= \frac{1}{2m} \left( \gamma^5\gamma^\alpha n_\alpha\gamma^\beta p_\beta\gamma^\mu p_\mu - \gamma^\mu p_\mu\gamma^5\gamma^\alpha n_\alpha\gamma^\beta p_\beta \right) \\ &= \frac{1}{m}\gamma^5(n^\alpha p_\alpha)\gamma^\mu p_\mu = 0 \end{aligned}$$

En consecuencia, los espinores  $\Psi(\pm p)$ , que son funciones propias del hamiltoniano, también deben ser funciones propias del operador  $\hat{\mathcal{S}}_n$

$$\hat{\mathcal{S}}_n\Psi(\pm p) = \mp s\Psi(\pm p)$$

con valores propios  $s = \pm 1/2$ . Esto se puede demostrar si se tiene en cuenta que

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{S}}_n^2 &= \frac{1}{4m^2} \left( \gamma^5\gamma^\alpha n_\alpha\gamma^\beta p_\beta \right)^2 \\ &= -\frac{n^2 p^2}{4m^2} = 1/4 \end{aligned}$$

gracias a lo cual, la ecuación

$$\hat{\mathcal{S}}_n^2\Psi(\pm p) = s^2\Psi(\pm p)$$

se reduce a la relación

$$(1/4)\Psi(\pm p) = s^2\Psi(\pm p) \quad \text{de donde} \quad s = \pm 1/2$$

Por otro lado, de la ecuación de Dirac se tiene que

$$\gamma^\mu p_\mu\Psi(\pm p) = \pm m\Psi(\pm p)$$

lo que significa que en una ecuación para valores propios,  $\gamma^\mu p_\mu$  puede ser reemplazado por  $m$ . Entonces

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{S}}_n \Psi(\pm p) &= -\frac{1}{2m} \gamma^5 \gamma^\alpha n_\alpha \gamma^\beta p_\beta \Psi(\pm p) \\ &= \frac{1}{2m} \gamma^5 \gamma^\alpha n_\alpha m \Psi(\pm p)\end{aligned}$$

por lo tanto

$$\hat{\mathcal{S}}_n \equiv \frac{1}{2} \gamma^5 \gamma^\alpha n_\alpha$$

Al emplear esta definición de  $\hat{\mathcal{S}}_n$  es posible verificar que

$$\begin{aligned}{}_s \bar{\Psi}_{s'}(\pm p) \Psi_s(\pm p) &= -\bar{\Psi}_{s'}(\pm p) \left( \frac{1}{2} \gamma^5 \gamma^\alpha n_\alpha \right) \Psi_s(\pm p) \\ &= s' \bar{\Psi}_{s'}(\pm p) \Psi_s(\pm p)\end{aligned}$$

de donde, si  $s \neq s'$  se tendrá

$$\bar{\Psi}_{s'}(\pm p) \Psi_s(\pm p) = 0$$

es decir

$$\bar{\Psi}_{s'}(\pm p) \Psi_s(\pm p) = \pm 2m \delta_{ss'}$$

Finalmente, si se tiene en cuenta la ecuación de Dirac, se puede verificar que

$$\begin{aligned}\bar{\Psi}_{s'}(\mp p) \Psi_s(\pm p) &= \frac{1}{m} \bar{\Psi}_{s'}(\mp p) \gamma^\alpha p_\alpha \Psi_s(\pm p) \\ &= -\bar{\Psi}_{s'}(\mp p) \Psi_s(\pm p)\end{aligned}$$

es decir que

$$\bar{\Psi}_{s'}(\mp p) \Psi_s(\pm p) = 0$$

## 11.7. Propiedades de transformación de los espinores.

La ecuación de Dirac describe partículas relativistas, razón por la cual es conveniente que sea una expresión covariante<sup>6</sup>. Para que dicha condición tenga lugar, es decir para que la ecuación sea en verdad covariante la función  $\Psi(x)$ , que describe el campo espinorial, debe comportarse de manera diferente a las de todos los campos analizados hasta ahora.

---

<sup>6</sup>Una expresión se denomina covariante si después de una transformación de Lorentz tiene la misma forma que antes de la transformación.

### 11.7.1. Traslaciones

En una traslación sobre cualquiera de los ejes del espacio-tiempo

$$x^\alpha \longrightarrow x'^\alpha = x^\alpha + a^\alpha$$

el operador de Dirac no cambia

$$i\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - m = i\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x'^\mu} - m.$$

Por lo tanto, para que la ecuación

$$\left( i\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x'^\mu} - m \right) \Psi'(x') = 0$$

sea covariante la función  $\Psi'(x')$  debe ser igual a  $\Psi(x)$ , es decir tampoco debe cambiar.

### 11.7.2. Rotaciones

La situación es diferente cuando se producen rotaciones

$$x^\alpha \longrightarrow x'^\alpha = x^\alpha + \omega_\beta^\alpha x^\beta = x^\alpha + g^{\alpha\gamma} x^\beta \omega_\beta^\gamma$$

ya que en este caso, el operador de Dirac no mantiene su estructura sino cambia de acuerdo con la fórmula

$$i\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x'^\mu} - m = i\gamma^\mu \left( \frac{\partial}{\partial x^\mu} - \omega_\mu^\nu \frac{\partial}{\partial x^\nu} \right) - m.$$

En consecuencia, es necesario exigir que la función  $\Psi(x)$  se transforme con ayuda de una matriz  $\Lambda_R$  que está directamente relacionada con los parámetros de las rotaciones.

La relación entre  $\Lambda_R$  y  $\omega^{\alpha\beta}$  se determina si se exige que la ecuación obtenida después de la rotación tenga la misma forma que la inicial, es decir que se cumpla la relación

$$\left\{ i\gamma^\mu \left( \frac{\partial}{\partial x^\mu} - \omega_\mu^\nu \frac{\partial}{\partial x^\nu} \right) - m \right\} \Lambda_R \Psi(x) = \left\{ i\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - m \right\} \Psi(x) = 0$$

Si la ecuación transformada se multiplica desde la izquierda por  $\Lambda_R^{-1}$ , se puede ver que para que se cumpla la condición anterior es necesario que

$$\Lambda_R^{-1} \gamma^\mu \Lambda_R - \Lambda_R^{-1} \gamma^\mu \Lambda_R \omega_\mu^\nu = \gamma^\mu$$

lo cual se transforma en

$$\gamma^\mu - \gamma^\nu \omega_\nu^\mu = \Lambda_R \gamma^\mu \Lambda_R^{-1}$$

En primer lugar es conveniente analizar transformaciones infinitesimales, en cuyo caso la matriz  $\Lambda_R$  puede ser expresada como

$$\Lambda_R = 1 + \lambda^{\alpha\beta} \omega_{\alpha\beta} \quad \text{y} \quad \Lambda_R^{-1} = 1 - \lambda^{\alpha\beta} \omega_{\alpha\beta}$$

donde  $\lambda^{\alpha\beta}$  son coeficientes antisimétricos. En este caso, la relación entre  $\Lambda_R$  y  $\omega$  se escribirá como

$$\left(1 + \lambda^{\alpha\beta}\omega_{\alpha\beta}\right)\gamma^\mu \left(1 - \lambda^{\alpha\beta}\omega_{\alpha\beta}\right) = \gamma^\mu - \gamma^\nu\omega_\nu^\mu$$

y si se desprecian términos de un grado de pequeñez mayor se obtendrá

$$\left(\gamma^\mu\lambda^{\alpha\beta} - \lambda^{\alpha\beta}\gamma^\mu\right)\omega_{\alpha\beta} = \gamma^\beta g^{\mu\alpha}\omega_{\alpha\beta}$$

$$\gamma^\mu\lambda^{\alpha\beta} - \lambda^{\alpha\beta}\gamma^\mu = \gamma^\beta g^{\mu\alpha}$$

que se puede satisfacer si

$$\lambda^{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\gamma^\alpha\gamma^\beta = -\frac{i}{2}\sigma^{\alpha\beta}$$

por lo tanto

$$\Lambda = 1 + \frac{1}{2}\gamma^\alpha\gamma^\beta\omega_{\alpha\beta} = 1 - \frac{i}{2}\sigma^{\alpha\beta}\omega_{\alpha\beta}$$

Para verificar que, también en el caso de una rotación de las coordenadas, la conjugada de Dirac se transforma mediante la fórmula

$$\bar{\Psi}'(x') = \bar{\Psi}(x)\Lambda_R^{-1}$$

es suficiente comprobar que, es correcta la relación

$$\gamma^0\Lambda_R^\dagger\gamma^0 = \Lambda_R^{-1}$$

En efecto,

$$\Lambda_R^\dagger = \left(1 + \frac{1}{2}\gamma^\alpha\gamma^\beta\omega_{\alpha\beta}\right)^\dagger = \left(1 + \frac{1}{2}\gamma^{\beta\dagger}\gamma^{\alpha\dagger}\omega_{\alpha\beta}\right)$$

por lo tanto

$$\begin{aligned}\gamma^0\Lambda_R^\dagger\gamma^0 &= \left(1 + \frac{1}{2}\gamma^0\gamma^{\beta\dagger}\gamma^0\gamma^0\gamma^{\alpha\dagger}\gamma^0\omega_{\alpha\beta}\right) = \left(1 + \frac{1}{2}\gamma^\beta\gamma^\alpha\omega_{\alpha\beta}\right) \\ &= \left(1 - \frac{1}{2}\gamma^\alpha\gamma^\beta\omega_{\alpha\beta}\right) = \Lambda_R^{-1}\end{aligned}$$

Para determinar la forma de  $\Lambda_R$  en caso de una rotación finita se emplea las propiedades de aditividad de los grupos. En efecto, si se analiza dos rotaciones sucesivas en ángulos  $\varphi$  y  $d\varphi$  en uno de los planos (Por ejemplo, en  $x^1x^2$ ) se tendrá

$$\Lambda_R(\varphi + d\varphi) = \Lambda(\varphi)\Lambda_R(d\varphi)$$

de donde

$$\frac{d\Lambda_R(\varphi)}{d\varphi} = \frac{\Lambda_R(\varphi + d\varphi) - \Lambda_R(\varphi)}{d\varphi} = \Lambda_R(\varphi)\frac{\Lambda_R(d\varphi) - 1}{d\varphi}$$



La ecuación diferencial que satisface  $\Lambda_R(\varphi)$  se puede obtener si se considera que

$$\Lambda_R(d\varphi) = 1 + \lambda^{12}d\varphi = 1 - \frac{i}{2}\sigma^{12}d\varphi$$

gracias a lo cual se tendrá

$$\frac{d\Lambda_R(\varphi)}{d\varphi} = \Lambda_R(\varphi)\lambda^{12} = \Lambda_R(\varphi)\frac{-i\sigma^{12}}{2}$$

la que al ser integrada, con la condición inicial  $\Lambda_R(0) = 1$ , permite obtener la relación entre  $\Lambda_R$  y el ángulo de rotación

$$\Lambda_R^{12} = \exp\left(-\frac{i}{2}\sigma^{12}\varphi\right) = \cos\frac{\varphi}{2} - i\sigma^{12}\sin\frac{\varphi}{2}$$

De la última relación se deduce que las transformaciones de las funciones espinoriales no son unívocas. En efecto, por un lado, una rotación en un ángulo de  $2\pi$  provoca un cambio en el signo de la función. Pero, por otro, una rotación en tal ángulo significa volver a la posición inicial. En consecuencia, se puede afirmar que las funciones espinoriales están definidas con aproximación de un signo.

### 11.7.3. Transformaciones de Lorentz

Una transformación de Lorentz puede ser expresada por la relación

$$x^\alpha \longrightarrow x'^\alpha = L^\alpha_\beta x^\beta$$

donde, en caso de que el sistema  $\Sigma'$  se desplace a lo largo del eje  $x$  del sistema  $\Sigma$ , la matriz de transformación se expresará como

$$L^\alpha_\beta = \begin{pmatrix} \cosh \chi & -\sinh \chi & 0 & 0 \\ -\sinh \chi & \cosh \chi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

donde  $\tanh \chi = \beta = v/c$ .

Por su parte, la función de Dirac se transformará mediante la relación

$$\Psi(x) \longrightarrow \Psi'(x') = \Lambda_L \Psi(x)$$

y la ecuación

$$\left(i\gamma^\alpha \frac{\partial}{\partial x^\alpha} - m\right) \Psi(x),$$

expresada en las coordenadas del sistema  $\Sigma'$ , tendrá la forma

$$\left(i\gamma^\alpha L^\beta_\alpha \frac{\partial}{\partial x'^\beta} - m\right) \Lambda_L^{-1} \Psi'(x') = 0$$

Después de multiplicarla por  $\Lambda_L$ , desde la izquierda, la ecuación anterior resultará como

$$\left( iL_\alpha^\beta \Lambda_L \gamma^\alpha \Lambda_L^{-1} \frac{\partial}{\partial x'^\beta} - m \right) \Psi'(x') = 0$$

lo que significa que la ecuación será covariante si

$$L_\alpha^\beta \Lambda_L \gamma^\alpha \Lambda_L^{-1} = \gamma^\beta \quad \text{es decir si} \quad \Lambda_L^{-1} \gamma^\beta \Lambda_L = L_\alpha^\beta \gamma^\alpha$$

En componentes, la igualdad precedente tendrá la forma

$$\Lambda_L^{-1} \gamma^0 \Lambda_L = \cosh \chi \gamma^0 - \sinh \chi \gamma^1$$

$$\Lambda_L^{-1} \gamma^1 \Lambda_L = -\sinh \chi \gamma^0 + \cosh \chi \gamma^1$$

$$\Lambda_L^{-1} \gamma^i \Lambda_L = \gamma^i, \quad i = 2, 3$$

y se podrá expresar mediante la fórmula única

$$\Lambda_L^{-1} \gamma^\alpha \Lambda_L = \left\{ \cosh(\chi/2) + \gamma^0 \gamma^1 \sinh(\chi/2) \right\} \gamma^\alpha \left\{ \cosh(\chi/2) - \gamma^0 \gamma^1 \sinh(\chi/2) \right\}$$

si se emplea las relaciones de anticonmutación de las matrices  $\gamma^\alpha$ .

En consecuencia

$$\Lambda_L = \cosh(\chi/2) - \gamma^0 \gamma^1 \sinh(\chi/2),$$

y, si se tiene en cuenta que

$$\cosh(\chi/2) = \sqrt{\frac{p^0 + m}{2m}}, \quad \sinh(\chi/2) = \sqrt{\frac{p^0 - m}{2m}}$$

entonces

$$\Lambda_L = \sqrt{\frac{p^0 + m}{2m}} \left( 1 - \gamma^0 \gamma^1 \frac{|\mathbf{p}|}{p^0 + m} \right)$$

La fórmula precedente ha sido obtenida en el supuesto de que el sentido de que la velocidad está orientada a lo largo del eje  $x$ . En un caso general, dicha fórmula se transformaría en

$$\Lambda_L = \sqrt{\frac{p^0 + m}{2m}} \left( 1 - \gamma^0 \frac{\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p}}{p^0 + m} \right)$$

De manera análoga se tiene que concluir que la matriz inversa debe ser expresada por la relación

$$\Lambda_L^{-1} = \cosh(\chi/2) + \gamma^0 \gamma^1 \sinh(\chi/2),$$

y, expresada a través de la energía y el momento lineal, debe tener la forma

$$\Lambda_L^{-1} = \sqrt{\frac{p^0 + m}{2m}} \left( 1 + \gamma^0 \frac{\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p}}{p^0 + m} \right)$$

### 11.7.4. Inversión de coordenadas

Después de una inversión de las coordenadas

$$x^i \longrightarrow x'^i = -x^i$$

la ecuación de Dirac en las nuevas coordenadas

$$\left( i\gamma^0 \frac{\partial}{\partial x'^0} - i\gamma^i \frac{\partial}{\partial x'^i} - m \right) \Psi'(x') = 0,$$

al ser expresada a través de las coordenadas iniciales, tendrá la forma

$$\left( i\gamma^0 \frac{\partial}{\partial x^0} + i\gamma^i \frac{\partial}{\partial x^i} - m \right) \eta(P) \Lambda_P \Psi(x) = 0,$$

donde  $\eta(P)$  es un factor de fase tal que  $\eta^2(P) = \pm 1$ .

La ecuación precedente coincidirá con la ecuación inicial si  $\Lambda_P = \gamma^0$  ya que en este caso

$$\left( i\gamma^0 \gamma^0 \frac{\partial}{\partial x^0} + i\gamma^i \gamma^0 \frac{\partial}{\partial x^i} - m \right) \Psi(x) = 0$$

$$\left( i\gamma^0 \gamma^0 \frac{\partial}{\partial x^0} - i\gamma^0 \gamma^i \frac{\partial}{\partial x^i} - m \right) \Psi(x) = 0$$

$$\left( \gamma^0 \frac{\partial}{\partial x^0} - i\gamma^i \frac{\partial}{\partial x^i} - m \right) \Psi(x) = 0$$

Para determinar la ley de transformación de la conjugada de Dirac  $\bar{\Psi}(x)$  se debe tener en cuenta que

$$\bar{\Psi}'(x') = \Psi'^{\dagger}(x') \gamma^0 = \Psi^{\dagger}(x) \Lambda_P^{\dagger} \gamma^0 = \bar{\Psi}(x) \gamma^0 \Lambda_P^{\dagger} \gamma^0$$

y que, de las propiedades del grupo de Lorentz se deduce que  $\gamma^0 \Lambda^{\dagger} \gamma^0 = \Lambda^{-1}$ , por lo tanto

$$\bar{\Psi}'(x') = \bar{\Psi}(x) \Lambda_P^{-1}$$

En el caso de inversión de las coordenadas espaciales, la relación anterior puede ser verificada si se tiene en cuenta, primero, que

$$\gamma^0 \Lambda_P^{\dagger} \gamma^0 = \gamma^0 \gamma^{0\dagger} \gamma^0 = \gamma^0 \gamma^0 \gamma^0 = \gamma^0$$

y, luego, que

$$\gamma^0 \gamma^{0\dagger} = I, \quad \text{es decir,} \quad \gamma^0 = (\gamma^0)^{-1} = \Lambda_P^{-1}$$

### 11.7.5. Inversión del tiempo

La inversión del tiempo significa que

$$x^0 \longrightarrow x'^0 = -x^0$$

después de lo cual la función  $\Psi'(x')$  puede ser expresada a través de la transpuesta de la conjugada de Dirac  $\widetilde{\Psi}(x)$ .

En efecto, si en la ecuación de Dirac en las nuevas coordenadas

$$\left( i\gamma^0 \frac{\partial}{\partial x'^0} - i\gamma^i \frac{\partial}{\partial x'^i} - m \right) \Psi'(x')$$

se ejecuta la inversión del tiempo y se postula que  $\Psi'(x') = \Lambda_T \widetilde{\Psi}(x)$ , se tendrá

$$\left( -i\gamma^0 \frac{\partial}{\partial x^0} - i\gamma^i \frac{\partial}{\partial x^i} - m \right) \Lambda_T \widetilde{\Psi}(x) = 0$$

y, si luego se la multiplica por  $\Lambda_T^{-1}$  desde la izquierda se tendrá

$$\left( i\Lambda_T^{-1} \tilde{\gamma}^0 \Lambda_T \frac{\partial}{\partial x^0} + i\Lambda_T^{-1} \tilde{\gamma}^i \Lambda_T \frac{\partial}{\partial x^i} + m \right) \Lambda_T \widetilde{\Psi}(x)$$

Si la matriz  $\Lambda_T$  fuera tal que satisfaga las condiciones

$$\Lambda_T \tilde{\gamma}^0 \Lambda_T^{-1} = \gamma^0 \quad \text{y} \quad \Lambda_T \tilde{\gamma}^i \Lambda_T^{-1} = -\gamma^i$$

la ecuación precedente será equivalente a

$$\left( i\tilde{\gamma}^0 \frac{\partial}{\partial x^0} - i\tilde{\gamma}^i \frac{\partial}{\partial x^i} + m \right) \widetilde{\Psi}(x) = 0$$

que es la transpuesta de la ecuación para la adjunta de Dirac.

Como  $\tilde{\gamma}^0 = \gamma^0$ ,  $\tilde{\gamma}^1 = -\gamma^1$ ,  $\tilde{\gamma}^2 = \gamma^2$  y  $\tilde{\gamma}^3 = -\gamma^3$ , las condiciones para la matriz  $\Lambda_T$  significan que dicha matriz debe conmutar con  $\gamma^0, \gamma^1, \gamma^3$  y anticonmutar con  $\gamma^2$ . Una matriz que satisface tales condiciones es el producto

$$\Lambda_T = \gamma^3 \gamma^1 \gamma^0$$

### 11.7.6. Conjugación de la carga

Si la ecuación de Dirac para la adjunta

$$i \frac{\partial}{\partial x^\alpha} \bar{\Psi}(x) \gamma^\alpha + m \bar{\Psi}(x) = 0$$

es transpuesta

$$\left( i\tilde{\gamma}^\alpha \frac{\partial}{\partial x^\alpha} + m \right) \tilde{\Psi}(x) = 0$$

y luego multiplicada por una matriz  $\Lambda_C$  se obtiene la ecuación

$$\left( i\Lambda_C \tilde{\gamma}^\alpha \Lambda_C^{-1} \frac{\partial}{\partial x^\alpha} + m \right) \Lambda_C \tilde{\Psi}(x) = 0$$

La ecuación anterior puede ser equivalente a una ecuación de Dirac, si

$$\Lambda_C \tilde{\gamma}^\alpha \Lambda_C^{-1} = -\gamma^\alpha$$

relación que significa

$$\Lambda_C \gamma^i \Lambda_C^{-1} = -\gamma^i, \quad i = 0, 2$$

$$\Lambda_C \gamma^j \Lambda_C^{-1} = \gamma^j, \quad j = 1, 3$$

y puede ser satisfecha, por ejemplo, por la matriz  $\Lambda = i\gamma^2\gamma^0$ .

### 11.7.7. Transformación de formas bilineales

Gracias a las relaciones de transformación obtenidas para  $\Psi$  y  $\bar{\Psi}$  se puede demostrar que las formas bilineales del tipo  $\bar{\Psi} O(\gamma) \Psi$  se transforman con ayuda de representaciones tensoriales del grupo de Lorentz. Efectivamente,

$$\bar{\Psi}'(x') O(\gamma) \Psi'(x') = \bar{\Psi}(x) \Lambda^{-1} O(\gamma) \Lambda \Psi(x)$$

Si  $O = I$  entonces

$$\bar{\Psi}'(x') I \Psi'(x') = \bar{\Psi}(x) \Lambda^{-1} I \Lambda \Psi(x) = \bar{\Psi}(x) I \Psi(x)$$

la expresión se transforma como un escalar y si  $O = \gamma^\mu$

$$\bar{\Psi}'(x') \gamma^\mu \Psi'(x') = \bar{\Psi}(x) \Lambda^{-1} \gamma^\mu \Lambda \Psi(x)$$

se tiene que tener en cuenta que en general

$$\Lambda^{-1} \gamma^\mu \Lambda = L^{\mu\nu} \gamma_\nu$$

en consecuencia,

$$\bar{\Psi}'(x') \gamma^\mu \Psi'(x') = L^{\mu\nu} \bar{\Psi}(x) \gamma_\nu \Psi(x)$$

y, por lo tanto, la expresión se transforma como un cuadrivector. Idéntica situación ocurre cuando el operador  $O$  es un tensor de rango superior al primero.

La transformación de operadores en los que aparece  $\gamma^5$  depende de la transformación que se esté analizando. Así, cuando se trata de una del grupo propio<sup>7</sup> se tendrá

$$\Lambda^{-1}(\gamma^\alpha.\gamma^\beta) \gamma^5 \Lambda(\gamma^\alpha.\gamma^\beta) = \Lambda^{-1}(\gamma^\alpha.\gamma^\beta) \Lambda(\gamma^5\gamma^\alpha.\gamma^\beta) =$$

$$\Lambda^{-1}(\gamma^\alpha.\gamma^\beta) \Lambda(\gamma^\alpha.\gamma^\beta\gamma^5) = \Lambda^{-1}(\gamma^\alpha.\gamma^\beta) \Lambda(\gamma^\alpha.\gamma^\beta) \gamma^5 = \gamma^5$$

en cambio si la transformación es del grupo impropio<sup>8</sup>

$$\Lambda^{-1} \gamma^5 \Lambda = \gamma^0 \gamma^5 \gamma^0 = -\gamma^0 \gamma^0 \gamma^5 = -\gamma^5$$

En consecuencia, la expresión  $\bar{\Psi}\gamma^5\Psi$  se comporta como escalar en rotaciones y como pseudoescalar en las inversiones de coordenadas. Similar situación se da en caso de las combinaciones  $\bar{\Psi}\gamma^\mu\gamma^5\Psi$ : éstas se comportan como pseudovectores.

---

<sup>7</sup>El grupo propio incluye rotaciones, transformaciones de Lorentz e inversiones de un número par de coordenadas.

<sup>8</sup>En este caso se incluye las inversiones de un número impar de coordenadas.