

INTRODUCCIÓN AL FORMALISMO DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

Pablo García González

José Enrique Alvarellos Bermejo

José Javier García Sanz



UNIVERSIDAD NACIONAL
DE EDUCACIÓN A DISTANCIA

Pablo García González (Madrid, 1967) es licenciado en Ciencias Físicas por la Universidad Complutense de Madrid (UCM, 1991) y doctor en Ciencias Físicas por la UNED (1997). Ha sido becario predoctoral del MEC, profesor asociado en la UNED y becario postdoctoral del MEC. Actualmente es becario postdoctoral de la UNED.

José Enrique Alvarelllos Bermejo (Santiago de Compostela, 1954) es licenciado en Ciencias Físicas por la Universidad Autónoma de Madrid (UAM, 1977) y doctor en Ciencias Físicas por la misma Universidad (1984). Ha sido profesor ayudante en la UAM, profesor encargado de Curso en la Universidad de Santiago de Compostela (USC) y profesor titular de Universidad en la USC. Actualmente es profesor titular de Universidad en la UNED.

José Javier García Sanz (Zaragoza, 1950) es licenciado en Ciencias Físicas por la UCM, (1972) y doctor en Ciencias Físicas por la UAM (1980). Ha sido profesor ayudante en la UAM, y es profesor titular de Universidad en la UNED

P. García González

J. E. Alvarellos

J. J. García Sanz

INTRODUCCIÓN AL FORMALISMO DE LA MECÁNICA CUÁNTICA



UNIVERSIDAD NACIONAL DE EDUCACIÓN A DISTANCIA

Índice General

Prefacio	iii
1 INTRODUCCIÓN	1
2 ESPACIOS DE HILBERT	15
2.1 Introducción.	15
2.2 Espacios vectoriales o lineales.	16
2.3 Base lineal de un espacio vectorial.	17
2.4 Espacios lineales normados.	18
2.5 Producto escalar. Ortogonalidad.	21
2.6 Espacios de Hilbert. Bases ortonormales.	23
2.7 Isomorfismos entre espacios de Hilbert.*	27
2.8 Operadores lineales en un espacio de Hilbert.	28
2.9 Operador adjunto. Operadores hermíticos y unitarios.	33
2.10 Representación matricial de un operador.	36
2.11 Proyectores. Proyección ortogonal.	38
2.12 Autovalores y autovectores.	40
2.13 Espectro de los operadores hermíticos.	42
2.14 Forma espectral de un operador hermítico.	45
2.15 El problema de los autovalores continuos.	48
2.16 Conmutadores. Conjunto compatible de operadores.	51
2.17 Producto tensorial de espacios de Hilbert.*	54
2.18 La notación de Dirac.	57
2.19 Apéndice: La delta de Dirac.	59
2.20 Apéndice: La transformada de Fourier	61
2.21 Problemas resueltos.	65
3 POSTULADOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA	91
3.1 Introducción.	91
3.2 Descripción de los sistemas físicos: Postulados 1 y 2.	91

3.3	Valores en las medidas de un observable: Postulado 3.	95
3.4	Reducción del estado cuántico: Postulado 4.	101
3.5	Compatibilidad. Relación de incertidumbre generalizada	108
3.6	El espacio de los estados de una partícula con espín.*	113
3.7	Evolución temporal de los estados cuánticos: Postulado 5. . . .	117
3.8	Evolución temporal relativa a los observables.	124
3.9	Relación de incertidumbre energía-tiempo.	126
3.10	Observables posición y momento. Postulado 6.	129
3.11	La función de ondas en la representación de posiciones.	135
3.12	La función de ondas en la representación de momentos.	143
3.13	Ecuaciones de Ehrenfest.	146
3.14	Propiedades generales de los autoestados de la energía.	152
3.15	El formalismo cuántico en notación de Dirac.*	157
3.16	Sobre el problema de la medida en Mecánica Cuántica.*	159
3.17	Introducción a los modelos de variables ocultas.*	164
3.18	Problemas resueltos.	170
3.18.1	Formalismo general.	170
3.18.2	Relaciones de incertidumbre.	187
3.18.3	Pozos cuadrados.	194
3.18.4	Oscilador armónico.	212
3.18.5	Reflexión y transmisión por escalones y barreras cuadra- das.	233
3.18.6	Otros problemas con estados no ligados.	242
Índice de símbolos y glosario		253
Bibliografía		261

Prefacio

Este libro expone el formalismo de la Mecánica Cuántica al nivel que se exige en el tercer curso de Ciencias Físicas de la UNED. Aunque, como es obvio, este texto será de gran utilidad para aquellos alumnos que siguen sus estudios en esa Universidad, esperamos que sea también de ayuda a los estudiantes de otros centros que cursen una Mecánica Cuántica a un nivel parecido.

En la UNED, el curso se articula en dos cuatrimestres, en cada uno de los cuales se estudia básicamente un libro de texto. En concreto:

- En el primer cuatrimestre de la asignatura se sigue el texto *Física Cuántica* de E. Wichman, volumen 4 del Curso de Física de Berkeley (publicado en español por la editorial Reverté), en el cual se introduce de una manera excelente la necesidad de una nueva formulación de la mecánica para el estudio de los objetos microscópicos.
- En el segundo cuatrimestre se estudia el formalismo cuántico propiamente dicho. Es éste el objeto del presente libro.¹

Así, en la primera parte del curso, el alumno se familiariza con aquellos conceptos claves del formalismo cuántico, como pueden ser la función de ondas, los niveles de energía o la interpretación probabilística. Sin embargo, el rigor matemático es el mínimo imprescindible. Una vez que el alumno *conoce* el mundo cuántico, es cuando se le exponen los principios de la Mecánica Cuántica desde una perspectiva formal, aunque adecuada a los conocimientos de un estudiante de tercer curso (o de segundo curso dentro de un programa de cuatro años) de una licenciatura de Ciencias Físicas.

No podemos olvidar que la Mecánica Cuántica es, para la mayoría de los físicos, una herramienta necesaria para profundizar en otras disciplinas, como la *Física Atómica y Molecular* o la *Física del Estado Sólido*. Por esa razón,

¹El libro *Introducción a la Mecánica Cuántica* de Gillespie, publicado por la editorial Reverté, tiene un temario también adecuado para esa parte del curso.

hemos preferido hacer hincapié en los aspectos metodológicos generales más que en las aplicaciones concretas, puesto que éstas serán el objetivo de cursos superiores.

Acorde con estas ideas, el libro está estructurado en tres capítulos:

- Un pequeño capítulo introductorio, que repasa someramente la necesidad de un nuevo formalismo para la descripción del mundo subatómico, cuya fenomenología ha sido objeto de la primera parte del curso.
- Un resumen de la teoría de espacios de Hilbert, que el Alumno ya debe conocer en buena parte tras el estudio previo de la asignatura de *Análisis Matemático II* de la licenciatura en CC. Físicas de la UNED (o de otras asignaturas equivalentes en otras universidades). El material que aquí se presenta pretende establecer una notación matemática consistente para su uso en el texto. A su vez, este capítulo permitirá que posteriormente nos concentremos en los aspectos conceptuales del formalismo cuántico, sin tener que introducir digresiones *técnicas* que dificultarían la comprensión del mismo.
- En el tercer capítulo se estudia el formalismo de la Mecánica Cuántica propiamente dicho. Aunque el texto sigue el orden de los postulados que aparece en el ya citado libro de Gillespie, nuestra presentación será más general. En concreto, a diferencia del mencionado texto, consideraremos desde el principio la posible degeneración de los valores espectrales de un observable y también la eventual aparición de una parte continua del espectro. Por otra parte la formulación de los postulados de la Mecánica Cuántica que aquí presentaremos será lo más general posible. Así, no especificaremos una representación concreta de los estados, aunque lógicamente dedicaremos apartados especiales a las representaciones de posiciones y de momentos que son (sobre todo la de posiciones) las que se usan con más frecuencia.

Al final de los capítulos 2 y 3 el lector encontrará una colección de problemas resueltos en detalle. Como es lógico, la colección del capítulo 3 es la más amplia y se ha hecho hincapié en ejemplos relacionados con la aplicación de los postulados a sistemas unidimensionales de una partícula sin espín. El alumno debe notar que los problemas no son una mera aplicación mecánica de las fórmulas obtenidas en cada capítulo pues en muchos casos los problemas suponen un desarrollo y profundización de los conceptos teóricos. De hecho, algunos grupos de problemas constituyen, por sí solos, una presentación de la teoría cuántica de ciertos sistemas sencillos, que en otros textos podrían

encontrase en los apartados teóricos y no en la parte de problemas resueltos. Por eso insistimos en que los alumnos trabajen especialmente los apartados de problemas de este libro.

Igualmente, a lo largo del texto hemos intercalado ejemplos y ejercicios que clarifican (y que en algunas ocasiones complementan) la teoría de los distintos apartados.

El material de los apartados marcados con un asterisco puede omitirse en un primer estudio del texto, aunque contienen información interesante sobre algunos puntos importantes del formalismo. También queremos mencionar que el capítulo 2 no es completamente imprescindible para la comprensión de la teoría cuántica tal y como aquí se expone. Como hemos comentado, partiendo de la base de que el alumno posee los conocimientos matemáticos correspondientes a los dos primeros años de licenciatura, el objetivo principal de este capítulo dedicado a espacios de Hilbert es el establecimiento de una notación consistente. Bien es cierto que también servirá para entender el porqué del lenguaje empleado en el formalismo, debido a la notable correspondencia que hay en este caso entre la abstracción matemática y la información física. Así, con la inclusión de este complemento matemático relativamente amplio hemos querido facilitar la comprensión de la teoría cuántica, no entorpecerla. Por tanto, no es nuestro deseo que el alumno dedique una parte sustancial de su tiempo a asimilar una cantidad excesiva de información, que rara vez va realmente a necesitar. No está de más el recordar que para un físico las matemáticas son una herramienta, que cumplen su labor en tanto en cuanto proporcionan el lenguaje requerido para describir con precisión la realidad física.

No queremos cerrar esta presentación sin agradecer a nuestros compañeros del Departamento de Física Fundamental, especialmente a la doctora Elka Koroutcheva, a David García Aldea y a Miguel Ángel de la Casa, que nos han ayudado a intentar corregir los errores y las erratas, que son casi imposibles de evitar en cualquier texto.

INSTRUCCIONES

Escoja y resuelva sólo dos de los tres problemas. Recuerde que no basta con indicar cómo se podrían resolver los problemas, sino que hay que resolverlos realmente y discutir, si procede, los resultados.

Deberá contestar razonadamente a cada una de las cuatro cuestiones teóricas.

Cada problema se calificará con una puntuación máxima de 5 y cada cuestión con una de 2.5. Se necesita un mínimo de 4 en cada parte para aprobar el examen.

No se permite el uso de calculadora ni de material auxiliar alguno.

CUESTIONES

1.- Una partícula se mueve en tres dimensiones sometida a un potencial $V(\vec{r}) = a(x^2 + y^2)^2$, siendo a una constante positiva. Encuentre al menos dos constantes del movimiento (además de la energía) para dicho sistema.

2.- Consideremos un oscilador armónico unidimensional de frecuencia ω . Se sabe que al medir la energía sólo se pueden obtener los valores $\hbar\omega/2$ y $7\hbar\omega/2$, ambos con igual probabilidad. Obtenga, para cualquier instante de tiempo, la incertidumbre de la posición de la partícula.

3.- Una partícula de masa m en un potencial cuadrado infinito con paredes en $x = \pm L/2$ se encuentra en un estado normalizado dado por $\psi(x) = (1/\sqrt{2})\phi_1(x) + b\phi_2(x) + c\phi_3(x)$, siendo $\phi_n(x)$ la n -ésima función propia del pozo. Calcule el valor esperado de la paridad $\langle \hat{\Pi} \rangle_\psi$ para dicho estado sabiendo que el valor esperado de la energía es $\langle \hat{H} \rangle_\psi = 15\pi^2\hbar^2/(8mL^2)$.

4.- Sea un potencial $V(x) = kx^4$, y sea una partícula en el estado inicial

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{2}\phi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_3(x) + \frac{1}{2}\phi_5(x)$$

siendo $\phi_n(x)$ los estados propios del sistema con energía E_n . Sean $\langle \hat{X} \rangle_1$ y $\langle \hat{X} \rangle_2$ los valores esperados de la posición en los instantes $t_1 = \hbar/(E_3 - E_1)$ y $t_2 = \hbar/(E_5 - E_1)$. ¿Cual de ellos es mayor?

PROBLEMAS

1.- Una partícula de masa m se encuentra en un potencial de oscilador armónico $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$. Su estado inicial es tal que al hacer una medida de la energía existe un 75% de probabilidades de obtener el valor $\hbar\omega/2$ y un 25% de obtener el valor $3\hbar\omega/2$.

a) Escriba la función de ondas de la partícula $\Psi(x, t)$ para cualquier instante de tiempo.

b) Obtenga el valor esperado de la posición y del momento lineal de la partícula para cualquier instante de tiempo.

Sugerencia: recuerde que $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^+ + \hat{a})$, donde \hat{a}^+ y \hat{a} son los operadores de creación y aniquilación que actúan sobre el n -ésimo estado estacionario del oscilador $\phi_n(x)$ como $\hat{a}^+\phi_n(x) = \sqrt{n+1}\phi_{n+1}(x)$ y $\hat{a}\phi_n(x) = \sqrt{n}\phi_{n-1}(x)$, respectivamente.

2.- El hamiltoniano de una partícula de masa m es

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}_x^2 + \frac{1}{\tau}(\hat{p}_x\hat{x} + \hat{x}\hat{p}_x)$$

donde τ es una constante positiva. Se sabe que la partícula está en un estado tal que el valor esperado del momento lineal \hat{p}_x en el instante $t = 0$ es distinto de cero. Demuestre explícitamente que la partícula no puede estar en un estado estacionario.

3.- Una partícula de masa m se encuentra en el estado fundamental del potencial $V(x) = -g\delta(x)$, donde g es una constante positiva y $\delta(x)$ la función delta de Dirac.

a) ¿Cuál es la energía de la partícula?

b) Encontrar x_0 tal que $\text{Prob}(|x| < x_0) = 1/2$ (es decir, la probabilidad de encontrar a la partícula en el intervalo $[-x_0, +x_0]$ es $1/2$).

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

• A principios del siglo XX diversos fenómenos relacionados con la radiación y la estructura atómica de la materia plantearon dificultades para ser interpretados por la física clásica. La radiación del cuerpo negro parecía contradecir el principio de equipartición, y este problema llevó a la idea de la cuantificación de la energía. Por otra parte, algunas propiedades de la materia (por ejemplo, algo tan básico como el tamaño de los propios átomos) resultaban inexplicables para la mecánica y el electromagnetismo clásicos. Una primera aproximación para tratar de explicar estos fenómenos consistió en complementar las leyes de la mecánica clásica con ciertos principios de cuantificación, como era el caso de la teoría del átomo de Bohr. No obstante, y pese a que con esto se obtenían algunos resultados sorprendentemente buenos, la solución parecía artificiosa e incoherente: los principios se introducían *ad hoc* y, además, resultaban incompatibles con las leyes del electromagnetismo clásico.

• Otros fenómenos, descubiertos posteriormente en relación con el comportamiento puramente mecánico de las partículas subatómicas, no sólo resultaban inexplicables dentro de la mecánica clásica sino que parecían escapar al propio marco de descripción de la misma. **Una partícula clásica tiene una trayectoria bien definida en el espacio ordinario tridimensional.** El estado de la partícula en un instante dado está determinado por su posición y velocidad. Por ello, es conveniente matemáticamente representar la partícula por un punto de coordenadas (x, y, z, p_x, p_y, p_z) en un espacio abstracto de 6 dimensiones (3 de ellas correspondientes a las componentes del vector posición y 3 a las componentes del vector momento lineal¹) que se denomina **espacio de fases**. La evolución temporal del estado de la partícula viene dada por el movimiento del punto

¹En lo sucesivo, cuando se hable de momento, sin especificar si es lineal o angular, ha de entenderse *momento lineal*.

representativo del espacio de fases $(\vec{x}(t), \vec{p}(t))$, que obedece a un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden, que a su vez se sigue de las leyes de Newton.

Sin embargo, los fenómenos de difracción de partículas por estructuras periódicas requieren una explicación que se base en conceptos propios de la física ondulatoria. Los primeros experimentos de difracción de partículas, que llevaron a cabo Davidson y Germer en 1927 e, independientemente, G. E. Thomson en 1928, utilizaban haces de electrones que incidían sobre redes cristalinas. Pocos años más tarde, Estermann y Stern obtuvieron difracción de átomos de helio y actualmente se ha observado difracción de electrones, protones, átomos y moléculas, tanto por redes cristalinas como por el campo periódico creado por una onda electromagnética estacionaria. En todos los casos, las direcciones de los haces difractados son las que corresponderían a una onda plana incidente $\exp(i2\pi x/\lambda)$ de longitud de onda $\lambda = h/p$ (longitud de onda de De Broglie), siendo p el momento de las partículas del haz incidente y $h \simeq 6.64 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ la constante de Planck.

No obstante, estos experimentos de difracción por estructuras periódicas admiten también una explicación alternativa en términos de partículas y principios de cuantificación. En efecto, una forma de obtener la dirección de los haces difractados consiste en admitir que en la colisión con la estructura periódica se verifica la condición $\Delta p_x \cdot a = nh$, siendo a el periodo de la estructura difractante y Δp_x el cambio de la componente del momento de la partícula paralela a la estructura. (Esta explicación fue defendida por W. Duane en los años 1930).

- Por ello, resulta más interesante e instructivo un experimento en el que la estructura periódica “infinita” (en realidad, basta con que sea mucho mayor que la anchura del haz de partículas) queda reducida a un par de rendijas paralelas². Una fuente de partículas lanza un haz de partículas en el mismo estado (es decir, preparadas de la misma forma) sobre una pared en la que hay dos rendijas paralelas separadas una distancia a . (La anchura de las rendijas también es importante pero, por simplicidad, supondremos simplemente que es mucho menor que a). Tras atravesar las rendijas, las partículas inciden sobre una pantalla situada a una distancia d , donde son registradas por detectores distribuidos por la misma (ver Figura 1.1). Cuando sólo está abierta la rendija 1, el registro de las partículas que llegan a los diferentes puntos de la pantalla

²Una exposición especialmente interesante de dicho experimento puede encontrarse en *Seis Piezas Fáciles*, de Richard Feynman (editorial Crítica). Véase también el capítulo quinto del libro *Física Cuántica* de E. Wichman, volumen 4 del Curso de Física de Berkeley (editorial Reverté).

corresponde a la curva P_1 , que tiene un único máximo frente a dicha rendija. Esto parece lógico, puesto que todas las partículas que llegan a la pantalla han tenido que pasar necesariamente por la rendija 1; el ensanchamiento de la curva (mayor cuanto más estrecha es la rendija) no sería difícil de explicar teniendo en cuenta que los bordes de la rendija pueden afectar a algunas de las partículas que la atraviesan. Una curva similar se obtiene cuando sólo está abierta la rendija 2.

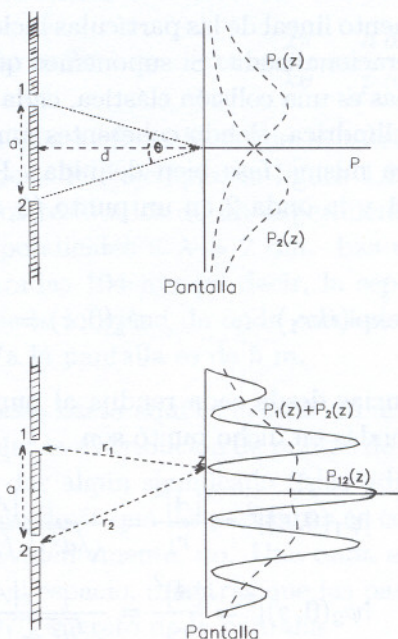


Fig. 1.1. Experimento de la doble rendija. Arriba, las probabilidades de llegada cuando está abierta una u otra rendija (no las dos). Abajo, en línea de trazos la suma de las probabilidades $P_1 + P_2$; en línea continua la probabilidad de llegada cuando ambas rendijas están abiertas simultáneamente.

Ahora bien, desde el punto de vista clásico parece claro que la trayectoria de una partícula que pasa por la rendija 1 no debería verse afectada por el hecho de que la rendija 2 esté abierta o cerrada. Por consiguiente, cabría esperar que cuando están abiertas las dos rendijas, la curva que da la distribución de los puntos de llegada de las partículas fuera la suma de las curvas 1 y 2 (para una misma duración del experimento). Sin embargo, no es esto lo que se observa cuando ambas rendijas están abiertas; lo que se observa realmente es una figura con varios máximos y mínimos, similar a los patrones de interferencia de las ondas. Lo más destacable es que existen puntos en la pantalla a los

que pueden llegar partículas cuando está abierta sólo la rendija 1 o sólo la rendija 2, pero a los que apenas llegan partículas cuando están abiertas ambas rendijas. Asimismo, existen puntos para los que el número de partículas que llegan cuando ambas rendijas están abiertas es mayor que la suma de las que llegaban atravesando la rendija 1 (cuando la 2 estaba cerrada) y las que llegaban atravesando la rendija 2 (cuando la 1 estaba cerrada).

La forma de estas curvas puede explicarse, una vez más, a partir de un formalismo tomado de la teoría ondulatoria. En efecto, supongamos que $p = \hbar k$ es el módulo del momento lineal de las partículas incidentes, con $\hbar = h / (2\pi)$ la constante de Planck racionalizada. Si suponemos que la interacción de las partículas con las rendijas es una colisión elástica, cada rendija se convierte en la fuente de una onda cilíndrica, siendo coherentes ambas ondas emergentes, es decir, que tienen una misma fase bien definida. Para un instante t , las amplitudes de la onda 1 y la onda 2 en un punto $(0, z)$ de la pantalla serán respectivamente

$$\psi_1(0, z) = \frac{A}{\sqrt{r_1}} \exp(ikr_1) \quad \psi_2(0, z) = \frac{A}{\sqrt{r_2}} \exp(ikr_2),$$

siendo r_1 y r_2 las distancias desde cada rendija al punto de la pantalla. Las intensidades de dichas ondas en dicho punto son

$$I_1(0, z) = |\psi_1(0, z)|^2 = \frac{|A|^2}{r_1} = \frac{|A|^2}{\sqrt{d^2 + (z - a/2)^2}}$$

$$I_2(0, z) = |\psi_2(0, z)|^2 = \frac{|A|^2}{r_2} = \frac{|A|^2}{\sqrt{d^2 + (z + a/2)^2}}.$$

Ambas curvas presentan un único máximo (centrado en $z = \pm a/2$) y decrecen a medida que nos alejamos de él. Estas expresiones describen a las curvas 1 y 2 que, recordémoslo, son las que se obtienen cuando sólo la rendija 1 o sólo la rendija 2 está abierta. Por su parte, cuando ambas rendijas están abiertas la amplitud de la onda en $(0, z)$ sería la suma de las amplitudes de las dos ondas procedentes de 1 y de 2

$$\psi_{12}(0, z) = \psi_1(0, z) + \psi_2(0, z) = \frac{A}{\sqrt{r_1}} \exp(ikr_1) + \frac{A}{\sqrt{r_2}} \exp(ikr_2)$$

y su intensidad

$$I_{12}(0, z) = |\psi_{12}(0, z)|^2 = |\psi_1(0, z) + \psi_2(0, z)|^2$$

$$= |\psi_1(0, z)|^2 + |\psi_2(0, z)|^2 + \frac{2|A|^2}{\sqrt{r_1 r_2}} \cos[k(r_1 - r_2)].$$

Si $d \gg a$ podemos aproximar $r_2 - r_1 \simeq za/d$. Además, $a/d \simeq \theta$, siendo éste el ángulo subtendido por las rendijas desde el centro de la pantalla. Así, pues,

$$I_{12}(0, z) = I_1(0, z) + I_2(0, z) + 2\sqrt{I_1(0, z)I_2(0, z)} \cos(k\theta z). \quad (1.1)$$

Vemos que, superpuesto a la suma de las intensidades de ambas ondas, hay un término oscilante que da lugar a varios máximos y mínimos en la curva. La distancia Δz entre dos máximos sucesivos viene dada por ³

$$k\theta\Delta z = 2\pi \quad \Rightarrow \quad \Delta z = \frac{2\pi}{k\theta} = \frac{h}{p} \frac{d}{a}.$$

Lo realmente notable es que el formalismo de la teoría ondulatoria explica exactamente los resultados. Por ejemplo, la figura 1.2 muestra una comparación de la teoría con los resultados de un experimento con neutrones *fríos* (de baja energía) correspondientes a $\lambda = 2$ nm. Las rendijas tienen $22 \mu\text{m}$ de anchura y están separadas $104 \mu\text{m}$ (es decir, la separación entre rendijas es 50000 veces mayor que la longitud de onda asociada a los neutrones). La distancia de las rendijas a la pantalla es de 5 m.

- Lo único que hemos hecho hasta aquí es utilizar un artificio matemático basado en ondas para calcular la distribución de puntos de llegada en la pantalla. ¿Podemos ir más allá y dar algún significado físico adicional a estas *funciones de onda*? ¿Quiere esto decir que las partículas se comportan en todos los aspectos como ondas? Evidentemente, no. Una onda es un objeto extenso y continuo que cubre todo el espacio, mientras que las partículas se detectan de una en una y en un punto concreto de la pantalla.

Una posible solución consistiría en decir que la onda describe a un conjunto de partículas que actúan colectiva y simultáneamente, pero esta interpretación queda fácilmente refutada si podemos asegurar que sólo hay una partícula en vuelo entre la fuente y la pantalla. Consideremos, por ejemplo, un experimento llevado a cabo por Tonomura *et al.* en 1989. En este experimento, las partículas son electrones en un microscopio electrónico y la doble rendija es lo que se denomina un biprisma de Mollendstat. La particularidad de este experimento es que el ritmo de emisión de los electrones es muy lento (1000 por segundo), aunque la velocidad de los electrones en vuelo es de $0.4 c$, siendo c la velocidad de la luz. Por lo tanto, cada electrón tarda aproximadamente 10^{-8}s en llegar a la pantalla. Después de eso, hay que esperar un tiempo aproximadamente 10^5 veces mayor hasta que sea emitido el siguiente electrón. Es decir, sólo durante un cienmilésima parte del tiempo total del experimento

³ Cuando se tiene en cuenta también la anchura finita de las rendijas, hay que introducir algunas correcciones; la expresión exacta puede encontrarse en cualquier libro de óptica.

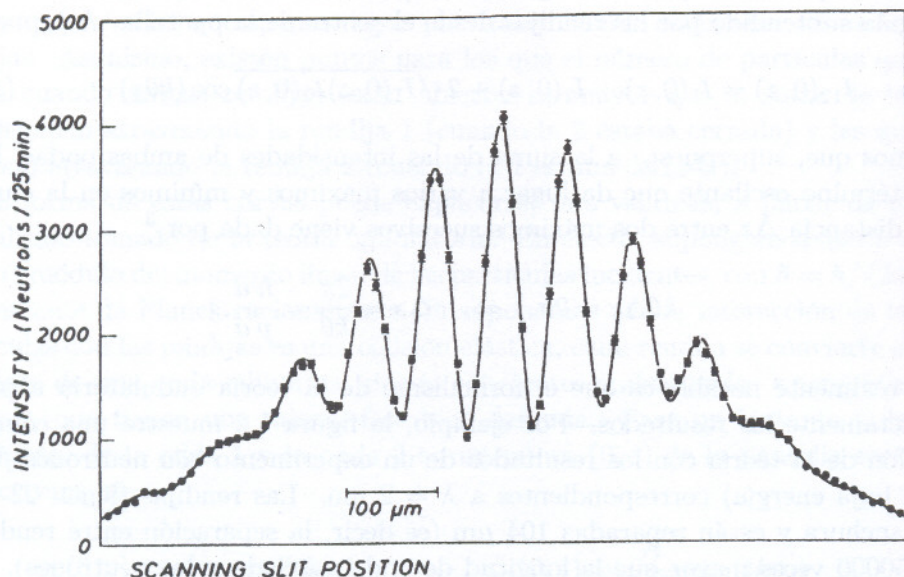


Fig. 1.2. Figura de difracción por una doble rendija para neutrones fríos con una longitud de onda de 2 nm, correspondiente a una velocidad de 200 m/s. Las rendijas tienen una anchura de $22\ \mu\text{m}$ y están separadas una distancia de $104\ \mu\text{m}$. Los ángulos de difracción resultantes son del orden de 10 microrradianes, de modo que el plano de observación está situado a 5 m de la doble rendija para poder resolver esta figura de interferencia (de un experimento de Zeilinger *et al* Rev. Mod. Phys. **60** (1988) 1067).

hay electrones en vuelo. Es más, si los electrones no fueran frenados por la pantalla, un electrón se habría alejado cien kilómetros antes de que saliera el siguiente. (A modo de analogía, esto es similar a una etapa ciclista contra reloj que se recorriera aproximadamente en 1 hora y en la que los corredores salieran con intervalos de 10 años). En estas circunstancias resulta difícil pensar en que cada electrón puede transmitir a los que le siguen alguna información de por dónde ha pasado.

Gracias a este ritmo de emisión relativamente lento, puede registrarse la llegada de cada electrón a la pantalla. Así, las fotografías de la figura 1.3 muestran de arriba a abajo los impactos acumulados tras la emisión de 10, 100, 3000, ... electrones. En la primera fotografía podemos ver que los electrones inciden en la pantalla de una forma aleatoria. No aparece ninguna pauta discernible y no hay forma de predecir dónde irá a parar el próximo electrón.

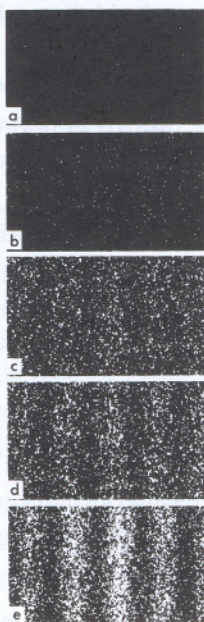


Fig. 1.3. Evolución temporal de la figura de interferencia de los electrones que atraviesan una doble rendija. El número de electrones registrados en cada placa es: (a) 10, (b) 100, (c) 3000, (d) 20000 y (e) 70000. De un experimento de Tonomura et al (Am. J. Phys. **57** (1989) 117). Nótese que las fotografías están giradas y las franjas aparecen verticalmente.

No obstante, a medida que aumenta el número de electrones aparece una pauta clara en la pantalla, y cuando el número de electrones acumulado es muy grande, aparece una pauta de interferencia bien definida que se mantiene estable. En otras palabras, cuando el número de electrones emitidos es muy alto, el cociente entre el número de electrones $N(z)$ que inciden en un punto determinado de coordenada vertical z en la pantalla y el número total de electrones emitidos N_T tiende a un valor constante, es decir

$$\lim_{N_T \rightarrow \infty} \frac{N(z)}{N_T} = \text{Prob}(z).$$

Ésta es precisamente la llamada definición frecuencial de la probabilidad. Nótese que la existencia de este límite y, por lo tanto, de una probabilidad definida, sólo se manifiesta cuando se acumulan muchos sucesos (impactos en la pantalla), pero la probabilidad se asigna a cada suceso individual. Esto es característico de las teorías probabilistas, del mismo modo que se habla de la

probabilidad de obtener una determinada cara de un dado cuando lo lanzamos sobre una mesa.

En resumen, el experimento nos dice lo siguiente: **i)** los electrones se emiten de uno en uno y se detectan en puntos concretos de la pantalla, es decir, se detectan como partículas puntuales; **ii)** no es posible predecir el punto de impacto de cada electrón individual; **iii)** pese a todo, cuando el número de electrones emitidos es suficientemente alto existe una probabilidad definida de detectar un electrón en un punto; **iv)** la figura global muestra una pauta de interferencia, aunque ésta sea el resultado de sucesos independientes; esto quiere decir que existe coherencia entre las diferentes partículas en el mismo estado de preparación.

El experimento nos sugiere también la interpretación que hay que dar a la función de onda. A cada estado de preparación de una partícula le corresponde una función $\psi(\vec{r})$, en general compleja, de las coordenadas espaciales; la probabilidad de encontrar la partícula en un volumen infinitesimal d^3r en torno a un punto \vec{r} es

$$\text{Prob}(\vec{r}) d^3r = |\psi(\vec{r})|^2 d^3r$$

(más adelante, y dado que estamos hablando de probabilidades por unidad de volumen o *densidades de probabilidad*, utilizaremos la notación $\rho(\vec{r}) d^3r = |\psi(\vec{r})|^2 d^3r$).

- La interpretación probabilista de la función de onda ya fue propuesta por Max Born en 1926, antes incluso de que se realizaran los primeros experimentos de difracción de partículas. No obstante, tal interpretación va acompañada a menudo de otras hipótesis más fuertes. Por ello, conviene dejar claro que todo lo que tenemos por el momento es una forma de calcular las probabilidades de los diferentes resultados de un experimento. Nada se dice sobre el comportamiento de las partículas antes de ser detectadas. En este sentido más estricto, la interpretación anterior se suele denominar **interpretación mínima**.

Desde luego, el recurso a una teoría probabilista no es privativo de la Mecánica Cuántica. Sin embargo, hay una diferencia crucial entre las probabilidades clásicas y las cuánticas. En mecánica estadística clásica las probabilidades se obtienen como medidas de volumen del espacio de fases en que evoluciona el sistema. Por ello, la probabilidad de encontrar un sistema clásico en una u otra región del espacio de fases es la suma de las probabilidades de encontrarlo en cada región por separado. En otras palabras, la probabilidad de que una partícula siga una trayectoria u otra es la suma de las probabilidades de cada trayectoria por separado. En el caso concreto de nuestro experimento de la do-

ble rendija, la probabilidad clásica de detectar partículas en un punto cuando ambas rendijas están abiertas sería la suma de las probabilidades $\text{Prob}_1(z)$ y $\text{Prob}_2(z)$. Sin embargo, **las probabilidades cuánticas no se suman**, como vemos en la fórmula (1.1). **Lo que se suma son las amplitudes de onda** o, si queremos, *amplitudes de probabilidad* (para distinguirlas de las probabilidades; nótese que las amplitudes de probabilidad pueden ser complejas mientras que las probabilidades son reales).

Esta última es una propiedad esencial. Una función de onda que corresponde a un estado físico del sistema puede construirse como suma de otras funciones de onda correspondientes a estados cuánticos diferentes. La suma de dos funciones de onda admisibles es también una función de onda admisible. Éste es el *principio de superposición*, e implica que las funciones de onda deben obedecer a ecuaciones lineales.

- Como muy bien puede concluirse de la discusión anterior, $\exp(ipx/\hbar)$ corresponde al estado físico de una partícula con momento p perfectamente definido.⁴ Por tanto, debido al principio de superposición, el estado definido por $A \exp(ip_1x/\hbar) + B \exp(ip_2x/\hbar)$ corresponde a un posible estado físico, construido a partir de dos estados con p_1 y p_2 bien definidos, aunque en este nuevo estado el momento lineal ya no estará bien definido. En general, cualquier superposición

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} a(p) \exp(ipx/\hbar) dp \quad (1.2)$$

es también un posible estado cuántico. Más importante incluso es la afirmación recíproca; es decir, cualquier función admite un desarrollo de este tipo (salvo excepciones que no vienen al caso). En otras palabras, podemos construir cualquier función de onda a partir de una suma de ondas planas $a(p) \exp(ipx/\hbar)$, siendo $a(p)$ la amplitud de la onda correspondiente a un momento p .

Esta expresión es simplemente un caso especial de la transformación matemática conocida como *transformada de Fourier*. Las propiedades de la transformada de Fourier nos permiten establecer algunas relaciones sencillas entre la forma de la función $\psi(x)$ y la función $a(p)$: cuanto más localizada está $\psi(x)$ menos localizada está $a(p)$ y viceversa. Es decir, cuanto más localizada está la partícula [esto es, más estrecha es la función $\psi(x)$] más amplio es el intervalo de valores de p de las ondas planas que intervienen en la superposición [esto es, más ancha es la función $a(p)$] y, en consecuencia, más indeterminado está el momento. El *principio de indeterminación* posición-momento constituye una

⁴En el resto de este capítulo, para simplificar la notación, hablaremos de sistemas unidimensionales.

formulación cuantitativa de este hecho, y desde un punto de vista matemático no es más que un resultado inmediato de la transformación de Fourier.⁵

• En definitiva, resulta imposible determinar simultáneamente la posición y el momento de una partícula y, por consiguiente, no es posible una descripción de los estados cuánticos en el espacio de fases. Necesitamos por tanto otro espacio matemático en el que sea posible construir unos estados a partir de otros mediante superposición, esto es, un espacio lineal.

La siguiente cuestión es saber cómo vamos a obtener ahora los valores de las variables dinámicas. En mecánica clásica, a cada magnitud dinámica A le corresponde una función $A(x, p)$ definida sobre el espacio de fases. Así, el valor de la magnitud física A en el estado (x_0, p_0) de un sistema unidimensional es $A(x_0, p_0) = A_0$. Ahora bien, si los estados cuánticos ya no se definen como puntos en un espacio de fases (correspondientes a posiciones y velocidades definidas) sino que son funciones de una variable x , ¿cómo se obtienen ahora los valores de las magnitudes físicas? Para la posición (o cualquier función de la posición) no hay ningún problema. En efecto, si hemos dicho que $\rho(x) dx = |\psi(x)|^2 dx$ es una densidad de probabilidad de posición, la simple definición estadística de valor medio es

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \rho(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx, \quad (1.3)$$

y para una función $f(x)$ cualquiera

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \rho(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) f(x) \psi(x) dx.$$

Este valor medio nos servirá para asignar valores a la posición o a la magnitud f .

Pero, ¿cómo podemos ahora calcular los valores medios del momento? Ya hemos visto que cualquier función $\psi(x)$ que describa el estado cuántico de una partícula puede escribirse como superposición de ondas planas de la forma (1.2), donde $a(p)$ mide la contribución de la onda plana de momento p a la función de onda $\psi(x)$. Además, por las propiedades de la transformada de Fourier, sabemos que $\int |\psi(x)|^2 dx = \int |a(p)|^2 dp$. Así pues, del mismo modo que $\rho(x) dx \equiv |\psi(x)|^2 dx$ es la densidad de probabilidad de posición, cabría pensar que $\rho_p(p) dp \equiv |a(p)|^2 dp$ pueda interpretarse como una densidad de probabilidad de momento, de modo que tendríamos

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p |a(p)|^2 dp. \quad (1.4)$$

⁵ Véase la sección sobre la transformada de Fourier en el capítulo 2.

Ahora bien, la función $a(p)$ es una función cuya variable es el momento p y no la posición x . Lo que nos interesa realmente es cómo calcular directamente $\langle p \rangle$ a partir de la función $\psi(x)$. Evidentemente, dada cualquier función $\psi(x)$ siempre podríamos calcular su transformada de Fourier y luego utilizar la expresión (1.4). Sin embargo, no tendría sentido estar pasando continuamente del espacio de posiciones al de momentos. Además, ¿cómo podríamos calcular entonces valores medios de magnitudes tales como $\langle xp \rangle$?

Notemos que para una onda plana $\phi_{p_0}(x) = \exp(ip_0 x/\hbar)$, de momento lineal bien definido p_0 , se tiene

$$-i\hbar \frac{d}{dx} \phi_{p_0}(x) = p_0 \phi_{p_0}(x)$$

y

$$\phi_{p_0}^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \phi_{p_0}(x) = p_0 |\phi_{p_0}(x)|^2.$$

Vamos a ver que esta relación se puede generalizar para calcular el valor medio de p para cualquier función de onda $\psi(x)$ en una forma similar a (1.3), a saber:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) dx. \quad (1.5)$$

En efecto, escribiendo la función como un desarrollo (1.2) tenemos

$$-i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} = -i\hbar \frac{d}{dx} \int_{-\infty}^{\infty} a(p) \exp(ipx/\hbar) dp = \int_{-\infty}^{\infty} p a(p) \exp(ipx/\hbar) dp$$

y así

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} \right) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} a^*(p') \exp(-ip'x/\hbar) dp' \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} p a(p) \exp(ipx/\hbar) dp \right) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} p a^*(p') a(p) \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')x/\hbar} dx \right) dp' dp \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(p-p') p a^*(p') a(p) dp dp' = \int_{-\infty}^{\infty} p |a(p)|^2 dp, \end{aligned}$$

con lo que queda demostrada la equivalencia de las expresiones (1.4) y (1.5).

Para este cálculo hemos utilizado la delta de Dirac que estudiaremos en detalle más adelante. En realidad, es una pequeña trampa introducir directamente esta "función", pues en ella está contenido parte del secreto del formalismo cuántico. En cualquier caso, el resultado matemático anterior es intuitivo: si multiplicamos dos ondas planas infinitas de diferentes longitudes de onda, en el producto se alternarán las partes positivas con las negativas y, en la integral total, unas se cancelarán con otras. La única forma de que no haya cancelación es que las longitudes de onda sean iguales.

• Veamos una forma general de expresar todo lo visto hasta ahora. Si *definimos* dos operadores \hat{X} y \hat{P}_x que actúan sobre $\psi(x)$ de modo que

$$\hat{X}\psi(x) \equiv x\psi(x) \qquad \hat{P}_x\psi(x) \equiv -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx},$$

y definimos un *producto escalar de funciones* en la forma

$$(\phi(x), \psi(x)) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x)\psi(x)dx,$$

podemos escribir las expresiones (1.3) y (1.5) para los valores medios como

$$\langle x \rangle_\psi = (\psi, \hat{X}\psi) \qquad \langle p \rangle_\psi = (\psi, \hat{P}_x\psi).$$

Podemos preguntarnos ahora si estos resultados pueden extenderse: es decir, si otras magnitudes físicas representadas por un operador lineal \hat{Q} permiten el cálculo de los valores medios como

$$\langle Q \rangle_\psi \equiv \sum_i q_i \rho(q_i) = (\psi, \hat{Q}\psi),$$

siendo $\rho(q)$ una distribución de probabilidad normalizada. Supongamos que existe un conjunto de funciones $\{\phi_i(x)\}$ tales que el operador \hat{Q} actúa sobre ellas de la siguiente manera

$$\hat{Q}\phi_i(x) = q_i \phi_i(x).$$

Llamemos a esto **condición 1**. Supongamos, además, que cualquier función $\psi(x)$ puede desarrollarse como suma de estas funciones $\{\phi_i(x)\}$ en la forma

$$\psi(x) = \sum_i c_i \phi_i(x).$$

Llamaremos a esto **condición 2**. Entonces podemos escribir

$$(\psi, \hat{Q}\psi) = \left(\sum_j c_j \phi_j(x), \hat{Q} \sum_i c_i \phi_i(x) \right) = \sum_{j,i} q_i c_j^* c_i (\phi_j(x), \phi_i(x)).$$

Si, finalmente, exigimos (**condición 3**) que

$$(\phi_j(x), \phi_i(x)) = \delta_{j,i} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j, \end{cases}$$

resulta

$$(\psi, \hat{Q}\psi) = \sum_i q_i |c_i|^2,$$

que es un valor medio estadístico si interpretamos $|c_i|^2 \equiv \rho(q_i)$ como una probabilidad para el valor q_i .

En definitiva, para que un operador \hat{Q} represente a una magnitud cuántica, y cuyo valor medio para la función de onda $\psi(x)$ pueda calcularse mediante la expresión $(\psi, \hat{Q}\psi)$, debemos de exigirle que tenga un conjunto de autofunciones (esto es lo que significa la condición 1), que estas funciones constituyan una base del espacio de funciones que representan estados cuánticos (condición 2) y que estas autofunciones sean ortogonales (condición 3). Como veremos más adelante, estas condiciones definen a un operador hermítico o autoadjunto.

- Resumiendo: para trabajar con los estados cuánticos necesitamos un espacio lineal que permita construir unos estados a partir de otros mediante la combinación lineal de ellos. Además necesitamos un conjunto de operadores sobre dicho espacio que representen a las magnitudes físicas. Por consiguiente, el formalismo matemático apropiado para la mecánica cuántica es una teoría de operadores lineales en un espacio vectorial lineal. En el próximo capítulo expondremos los fundamentos matemáticos de esta teoría.

14

Capítulo 2

ESPACIOS DE HILBERT

2.1 Introducción.

La teoría de espacios de Hilbert, además de ser la principal herramienta matemática de la Mecánica Cuántica, ocupa un lugar cada vez mayor en cualquier rama de la Física teórica. En este capítulo presentaremos un amplio resumen de la misma que sirva para una mejor comprensión del formalismo de la Mecánica Cuántica, que se explicará con detalle en el próximo capítulo. Muchas de las ideas aquí expuestas ya deberían ser conocidas, puesto que han sido el contenido de la asignatura de Análisis Matemático II de la licenciatura en CC. Físicas de la UNED¹ (u otra equivalente en otros centros). Sin embargo, el alumno encontrará algunas diferencias, tanto en el enfoque como en la terminología, con respecto a dicha asignatura. Una buena referencia para profundizar en la teoría de estos espacios es el libro de L. Abellanas y A. Galindo *Espacios de Hilbert* (Eudema Universidad).

Esencialmente, los espacios de Hilbert son espacios vectoriales, o lineales, en los que se ha definido un producto escalar y en los que se pueda extender el concepto de combinación lineal finita a un número infinito de sumandos. Por ello, la parte más delicada de su formulación está en la extensión de los resultados ya conocidos para espacios de dimensión finita a otros espacios, como los espacios de funciones, cuya dimensión es infinita.

¹Véase, por ejemplo, el libro de Linés Escardó *Análisis Matemático II*, publicado por la UNED.

2.2 Espacios vectoriales o lineales.

Definición: Un espacio vectorial (o lineal) complejo² \mathcal{U} es un conjunto de elementos, llamados **vectores**, al que se ha dotado de dos leyes de composición:

1. Una **ley de composición interna**, que denotaremos por el símbolo "+", que asocia unívocamente a cada par de elementos $\vec{u}, \vec{v} \in \mathcal{U}$ otro elemento $\vec{u} + \vec{v} \in \mathcal{U}$. Esta ley debe satisfacer las propiedades siguientes:
 - i) **Asociativa**. Para cualquier trío de elementos $\vec{u}, \vec{v}, \vec{w} \in \mathcal{U}$ se cumple: $\vec{u} + (\vec{v} + \vec{w}) = (\vec{u} + \vec{v}) + \vec{w}$.
 - ii) **Conmutativa**. Para todo par $\vec{u}, \vec{v} \in \mathcal{U}$ se cumple: $\vec{u} + \vec{v} = \vec{v} + \vec{u}$.
 - iii) Existe un **elemento nulo**, denotado por $\vec{0}$, tal que $\vec{v} + \vec{0} = \vec{v}$ para todo $\vec{v} \in \mathcal{U}$.
 - iv) Para todo $\vec{v} \in \mathcal{U}$ existe un **elemento inverso**, denotado por $-\vec{v}$, tal que $\vec{v} + (-\vec{v}) = \vec{0}$.
2. Una **ley de composición externa**, llamada **multiplicación por un escalar complejo**, que asocia a cada par $\vec{v} \in \mathcal{U}, \lambda \in \mathbb{C}$ un vector $\lambda\vec{v} \in \mathcal{U}$. Esta ley debe satisfacer, para todos $\vec{u}, \vec{v} \in \mathcal{U}$ y $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, las propiedades:
 - i) Es **distributiva respecto a elementos de \mathcal{U}** ; es decir, $\alpha(\vec{u} + \vec{v}) = \alpha\vec{u} + \alpha\vec{v}$.
 - ii) Es **distributiva respecto a elementos de \mathbb{C}** ; es decir, $(\alpha + \beta)\vec{v} = \alpha\vec{v} + \beta\vec{v}$.
 - iii) $\alpha(\beta\vec{v}) = (\alpha\beta)\vec{v}$.
 - iv) $1\vec{v} = \vec{v}$.
 - v) $0\vec{v} = \vec{0}$,

siendo 0 y 1 los elementos neutros para la suma y la multiplicación, respectivamente, en \mathbb{C} .

Nota: Aunque hemos utilizado la notación \vec{v} para denotar a los elementos de un espacio vectorial, no hay que identificarlos con los vectores a los que estamos acostumbrados en el cálculo vectorial ordinario (por ejemplo, los del espacio euclídeo n -dimensional \mathbb{E}^n). Así, el conjunto de todas las matrices complejas de dimensión $N \times N$, con la suma de matrices ordinaria y la multiplicación por un escalar, tiene estructura de espacio vectorial. Asimismo, el conjunto de todas las funciones complejas $\psi(x_1, x_2, \dots, x_n)$ definidas sobre $\mathbb{R}^n = \mathbb{R} \times \mathbb{R} \times \dots \times \mathbb{R}$, con la suma ordinaria de funciones y

²O espacio vectorial sobre el cuerpo de los números complejos.

la multiplicación por un escalar complejo, tiene también estructura de espacio vectorial. En una definición más general de espacio vectorial, el cuerpo usado en la ley de composición externa no tiene por qué ser \mathbb{C} . Así, si sustituyésemos \mathbb{C} por \mathbb{R} , tendríamos un espacio vectorial *real*. Supondremos que los espacios lineales a los que nos referimos en el texto son todos complejos.

Cuando tratamos con espacios vectoriales de dimensión finita puede resultar útil hacer analogías con los vectores del espacio ordinario. Sin embargo, estas analogías fallan cuando llegamos a espacios de dimensión infinita y en tales casos la intuición puede engañarnos. A lo largo de este capítulo pondremos especial énfasis en las cuestiones específicas que se plantean en estos casos.

Definición: Un subconjunto $\mathcal{W} \subset \mathcal{U}$ es un **subespacio** vectorial (o lineal) de \mathcal{U} si es cerrado respecto a las dos leyes de composición; es decir, para cualesquiera pares $\vec{u}, \vec{v} \in \mathcal{W}$ y $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, se tiene $\alpha\vec{u} + \beta\vec{v} \in \mathcal{W}$.

Ejemplo: El conjunto $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ de las funciones complejas de cuadrado integrable (las que cumplen que $\int_{\mathbb{R}^n} |\psi(\vec{x})|^2 d^n x < \infty$) es un subespacio del espacio de las funciones complejas de n variables reales.

Ejercicio: Demostrar que la intersección de dos subespacios lineales es también un subespacio lineal. (Nótese que dos subespacios no pueden ser disjuntos puesto que el vector $\vec{0}$ forma parte de todo subespacio vectorial. A su vez, $\{\vec{0}\}$ es un subespacio lineal en sí mismo).

2.3 Base lineal de un espacio vectorial.

Definición: Sea \mathcal{U} un espacio lineal complejo. Una **combinación lineal** es toda suma **finita** de elementos de \mathcal{U} , cada uno multiplicado por un escalar complejo:

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i \vec{v}_i \quad \text{con} \quad \alpha_i \in \mathbb{C} \quad \text{y} \quad \vec{v}_i \in \mathcal{U}.$$

Definición: Un subconjunto finito \mathcal{V} , $\{\vec{v}_i\}_{i=1, \dots, N}$, formado por elementos no nulos de \mathcal{U} , es **linealmente independiente** si la única combinación lineal de elementos de \mathcal{V} igual al vector nulo es aquella en la que todos los coeficientes escalares son iguales a cero, es decir

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i \vec{v}_i = \vec{0} \quad \text{con} \quad \vec{v}_i \in \mathcal{V} \quad \implies \quad \alpha_i = 0.$$

Si \mathcal{V} está formado por un número infinito de vectores de \mathcal{U} , entonces \mathcal{V} es un conjunto linealmente independiente si todo subconjunto *finito* de \mathcal{V} es linealmente independiente. (Nótese cómo el concepto de combinación lineal está **siempre** restringido a un **número finito** de términos en la suma).

Definición: Sea \mathcal{W} un subconjunto cualquiera del espacio \mathcal{U} . Llamamos $\text{lin}(\mathcal{W})$ a la **envolvente lineal** de \mathcal{W} , que es el conjunto formado por todos los elementos de \mathcal{U} que son combinación lineal de elementos de \mathcal{W} .

Definición: Un conjunto \mathcal{B} de vectores *linealmente independientes* de un espacio lineal \mathcal{U} se denomina **base lineal** si su envolvente lineal, $\text{lin}(\mathcal{B})$, es el espacio \mathcal{U} .

Dado un espacio vectorial \mathcal{U} , puede demostrarse que si una base lineal tiene un número finito de elementos, **todas** las bases lineales tienen igual número de vectores. A este cardinal, $\dim(\mathcal{U})$, se le denomina **dimensión** del espacio vectorial \mathcal{U} .

A su vez, también puede demostrarse que un conjunto linealmente independiente no puede tener un número de vectores mayor que la **dimensión** del espacio vectorial \mathcal{U} . Además, si dicho número es igual a $\dim(\mathcal{U})$, entonces dicho conjunto es una base lineal. Recíprocamente, si la envolvente lineal de un conjunto \mathcal{W} es igual a todo el espacio vectorial \mathcal{U} , el número de vectores de dicho conjunto tiene que ser mayor o igual que $\dim(\mathcal{U})$. En el caso de que el número de vectores de este conjunto \mathcal{W} sea igual a la dimensión del espacio, \mathcal{W} será también linealmente independiente y, por tanto base lineal. Como consecuencia de lo anterior, una base es todo conjunto *máximo* de vectores linealmente independientes o bien cualquier conjunto *mínimo* cuya envolvente lineal sea igual a todo el espacio vectorial. De esta forma, si un espacio vectorial \mathcal{U} tiene conjuntos linealmente independientes arbitrariamente grandes, entonces \mathcal{U} es un espacio lineal de **dimensión infinita**.

2.4 Espacios lineales normados.

Definición: Una **norma** sobre un espacio lineal \mathcal{U} es una aplicación de \mathcal{U} en \mathbb{R}

$$\mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R} : \vec{u} \rightarrow \|\vec{u}\|$$

tal que, para cualesquiera $\vec{u}, \vec{v} \in \mathcal{U}$ y para cualquier escalar α complejo, se cumplen las cuatro propiedades siguientes:

- a) $\|\vec{u}\| \geq 0$.
- b) $\|\vec{u}\| = 0 \Leftrightarrow \vec{u} = \vec{0}$.
- c) $\|\alpha\vec{u}\| = |\alpha| \cdot \|\vec{u}\|$.
- d) $\|\vec{u} + \vec{v}\| \leq \|\vec{u}\| + \|\vec{v}\|$ (desigualdad triangular).

Todo espacio lineal en el que se ha definido una norma se denomina **espacio normado**.

Un vector \vec{u} se dice **normalizado** si $\|\vec{u}\| = 1$.

Ejercicio: Consideremos el conjunto \mathbb{C}_2^∞ formado por las sucesiones convergentes de números complejos $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3, \dots)$ tales que la suma infinita $\sum_{j=1}^\infty |a_j|^2 < \infty$. Definiendo la suma y el producto por un escalar complejo en la forma habitual, es decir

$$\vec{a} + \vec{b} = (a_1 + b_1, a_2 + b_2, a_3 + b_3, \dots) \quad ; \quad c\vec{a} = (ca_1, ca_2, ca_3, \dots),$$

\mathbb{C}_2^∞ es un espacio lineal de dimensión infinita sobre el cuerpo de los números complejos. Sobre este espacio se puede definir la norma $\|\vec{a}\|$ como

$$\|\vec{a}\| = \sqrt{\sum_{j=1}^\infty |a_j|^2}.$$

Demuestre que, efectivamente, esta definición cumple las propiedades de una norma.

Ejercicio: El conjunto de las funciones complejas de variable real, definidas en el intervalo $[0, 1]$ y que son continuas (al que designaremos por $C[0, 1]$) también es un espacio vectorial de dimensión infinita. En él definimos la norma en media 2 (habitualmente llamada norma estándar por el motivo que pronto veremos) como

$$\|\phi\| = \sqrt{\int_0^1 \phi(x)^* \phi(x) dx} = \sqrt{\int_0^1 |\phi(x)|^2 dx}.$$

Compruebe que esta definición satisface las propiedades de una norma.

Definición: Sea \mathcal{U} un espacio normado. Dada una sucesión $\{\vec{u}_1, \vec{u}_2, \vec{u}_3, \dots\}$ de vectores de \mathcal{U} , decimos que la **sucesión es convergente** si existe un vector $\vec{u} \in \mathcal{U}$, llamado **límite** de la sucesión, tal que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\vec{u}_n - \vec{u}\| = 0.$$

Esto es, si para cualquier real $\varepsilon > 0$, existe un N tal que $\|\vec{u}_n - \vec{u}\| < \varepsilon$ para todo $n > N$.

Definición: Una sucesión de vectores $\{\vec{u}_1, \vec{u}_2, \vec{u}_3, \dots\} \subset \mathcal{U}$ es una **sucesión de Cauchy** si

$$\lim_{m, n \rightarrow \infty} \|\vec{u}_m - \vec{u}_n\| = 0,$$

esto es, si para cualquier real $\varepsilon > 0$, existe un N tal que $\|\vec{u}_m - \vec{u}_n\| < \varepsilon$ para todo par de números m, n mayores que N .

Es fácil demostrar que toda sucesión convergente es de Cauchy. En espacios vectoriales de dimensión finita la recíproca también es cierta, pero no lo es para espacios vectoriales de dimensión infinita: en ellos hay sucesiones de Cauchy que no son convergentes (bajo la norma en cuestión) debido a que el límite de la sucesión no pertenece al espacio lineal que se está considerando.

El siguiente ejemplo lo aclara. Sea $P[0, 1]$ el espacio lineal de los polinomios con coeficientes complejos definidos en el intervalo $[0, 1]$ de la recta real. Considérese la sucesión de polinomios $\{\phi_1(x), \phi_2(x), \phi_3(x), \dots\} \subset P[0, 1]$ cuyo término general es

$$\phi_n(x) = \sum_{j=1}^n \frac{1}{j!} x^j.$$

Bajo la norma estándar $\|\vec{a}\| = \sqrt{\int_0^1 |\phi(x)|^2 dx}$, esta sucesión es de Cauchy (compruébese). Sin embargo, el límite de esta sucesión es la función $\exp(x)$, que no es un polinomio y que por tanto no pertenece a $P[0, 1]$. La sucesión anterior, aunque es de Cauchy, no converge en $P[0, 1]$.

Definición: Sea \mathcal{U} un espacio normado. Se dice que \mathcal{U} es un **espacio de Banach** o que es **completo** si toda sucesión de Cauchy es convergente:

$$\mathcal{U} \text{ es espacio de Banach} \Leftrightarrow \text{Sucesión de Cauchy} = \text{Sucesión convergente}.$$

Ejemplo: Sea el intervalo cerrado $[a, b]$, sobre el que definimos los siguientes espacios lineales:

- i) el de las funciones continuas y acotadas $C[a, b]$
- ii) el de los polinomios con coeficientes complejos $P[a, b]$

iii) el espacio $\mathcal{L}^2[a, b]$, conjunto de funciones complejas de variable real que verifican $\int_a^b |\phi(x)|^2 dx < \infty$ (funciones de cuadrado integrable).

Definida en todos ellos la norma estándar

$$\|\phi\| = \sqrt{\int_a^b \phi(x)^* \phi(x) dx} = \sqrt{\int_a^b |\phi(x)|^2 dx},$$

tanto el espacio de los polinomios como el de las funciones continuas no son espacios de Banach, aunque sí lo es el $\mathcal{L}^2[a, b]$.

2.5 Producto escalar. Ortogonalidad.

Definición: Un **producto escalar** (o producto interno) en un espacio lineal complejo \mathcal{U} es una aplicación $\mathcal{U} \times \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{C}$, que asocia a cada par $\vec{u}, \vec{v} \in \mathcal{U}$ un escalar complejo, que designaremos por $(\vec{u}, \vec{v}) \in \mathbb{C}$, de modo que se satisfacen las siguientes condiciones

- i) $(\vec{w}, (\vec{u} + \vec{v})) = (\vec{w}, \vec{u}) + (\vec{w}, \vec{v})$.
- ii) $(\vec{u}, \vec{v}) = (\vec{v}, \vec{u})^*$.
- iii) $(\vec{v}, \vec{v}) \geq 0$, y $(\vec{v}, \vec{v}) = 0$ si y sólo si $\vec{v} = \vec{0}$.
- iv) $(\vec{u}, \alpha \vec{v}) = \alpha (\vec{u}, \vec{v})$.

A partir de estas propiedades, se deducen también fácilmente las siguientes

- v) $(\alpha \vec{u} + \beta \vec{v}, \vec{w}) = \alpha^* (\vec{u}, \vec{w}) + \beta^* (\vec{v}, \vec{w})$.
- vi) si $\forall \vec{v} \in \mathcal{U}$ se cumple que $(\vec{u}, \vec{v}) = 0$, entonces $\vec{u} = \vec{0}$.
- vii) si $\forall \vec{w} \in \mathcal{U}$ se cumple que $(\vec{u}, \vec{w}) = (\vec{v}, \vec{w})$, entonces $\vec{u} = \vec{v}$.

Definición: A los espacios lineales en los que se ha definido un producto escalar se les denomina **espacios pre-Hilbert**.

Definición: Un par de vectores $\vec{u}, \vec{v} \in \mathcal{U}$ son **ortogonales** si $(\vec{u}, \vec{v}) = 0$.

Un subconjunto $\mathcal{W} \subset \mathcal{U}$ es un **conjunto ortogonal** si todos sus elementos son ortogonales dos a dos.

Se verifica que todo conjunto ortogonal es linealmente independiente, aunque evidentemente la recíproca no es cierta. (Intente demostrar esta importante afirmación. Para ello pruebe la contrarrecíproca, esto es, que dado un conjunto que no sea linealmente independiente, éste no puede ser ortogonal).

Dos subespacios $\mathcal{W}_1, \mathcal{W}_2 \subset \mathcal{U}$ son mutuamente ortogonales si cualquier vector de \mathcal{W}_1 es ortogonal a cualquier vector de \mathcal{W}_2 ; es decir, si para cualquier par $\vec{v}_1 \in \mathcal{W}_1, \vec{v}_2 \in \mathcal{W}_2$, se cumple que $(\vec{v}_1, \vec{v}_2) = 0$.

Definición: Sea \mathcal{U} un espacio pre-Hilbert. Sobre dicho espacio se puede definir una norma como $\|\vec{u}\| = (\vec{u}, \vec{u})^{1/2}$. Esta norma se denomina **norma**

estándar o asociada al producto escalar. (Demuéstrese que, efectivamente, la norma así definida satisface las propiedades (a)-(d) de la definición de norma). De aquí en adelante admitiremos que todo espacio pre-Hilbert está dotado de una norma, que es la asociada a su producto escalar.

Ejemplo: Sea el espacio de funciones de cuadrado integrable $\mathcal{L}^2[a, b]$. En $\mathcal{L}^2[a, b]$ el producto escalar habitual o estándar es

$$(\vec{\phi}, \vec{\psi}) = \int_a^b \phi(x)^* \psi(x) dx,$$

y la norma asociada,

$$\|\vec{\phi}\| = \sqrt{(\vec{\phi}, \vec{\phi})} = \sqrt{\int_a^b \phi(x)^* \phi(x) dx} = \sqrt{\int_a^b |\phi(x)|^2 dx},$$

es precisamente la norma estándar (en media 2) que vimos en la sección anterior.

Nótese que hemos escrito $\vec{\phi}$ y $\vec{\psi}$ porque las funciones $\phi(x)$ y $\psi(x)$ son elementos de un espacio vectorial. Para evitar la (improbable) confusión con una función vectorial $\vec{\psi}(x)$, escribiremos muchas veces el producto escalar como (ϕ, ψ) o como $(\phi(x), \psi(x))$.

Definición: Un subconjunto, con un número finito o infinito de elementos, $\mathcal{W} = \{\vec{u}_1, \vec{u}_2, \vec{u}_3, \dots\} \subset \mathcal{U}$ es un **conjunto ortonormal** si es ortogonal y está formado por vectores normalizados, esto es, que para todos los pares i y j se cumple que $(\vec{u}_i, \vec{u}_j) = \delta_{ij}$, siendo δ_{ij} la delta de Kronecker.

Hemos visto antes que todos los vectores de un espacio vectorial de dimensión finita pueden representarse como combinación lineal de vectores de una base lineal. Los vectores de la misma no tienen por qué ser ortogonales. Sin embargo, de entre las posibles bases lineales, aquellas que sean ortonormales son particularmente útiles, pues si $\mathcal{B} = \{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots, \vec{e}_N\}$ es una base lineal *ortonormal*, y $\vec{v} = \sum_{i=1}^N v_i \vec{e}_i$, es fácil calcular los coeficientes v_i de la combinación. En efecto,

$$(\vec{e}_j, \vec{v}) = \left(\vec{e}_j, \sum_{i=1}^N v_i \vec{e}_i \right) = \sum_{i=1}^N v_i (\vec{e}_j, \vec{e}_i) = \sum_{i=1}^N v_i \delta_{ji} = v_j.$$

Asimismo, el producto escalar de dos vectores puede escribirse de forma simple

$$(\vec{u}, \vec{v}) = \left(\sum_{i=1}^N u_i \vec{e}_i, \sum_{j=1}^N v_j \vec{e}_j \right) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N u_i^* v_j (\vec{e}_i, \vec{e}_j) = \sum_{i=1}^N u_i^* v_i.$$

Antes de continuar es necesario aclarar una cuestión que se plantea al trabajar en espacios de dimensión infinita. En efecto, el desarrollo $\vec{v} = \sum_{i=1}^N v_i \vec{e}_i$ no plantea ningún problema, pero ¿qué sentido hay que dar a la suma $\sum_{i=1}^{\infty} v_i \vec{e}_i$? Cuando tratamos con sucesiones de escalares $\{a_n\}$ sabemos que

$$\sum_{i=1}^{\infty} a_i = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^N a_i.$$

Pero ¿cómo se puede extender esto a los vectores de un espacio vectorial de dimensión infinita? Supongamos, como paso previo, que construimos dos vectores \vec{v}_N y \vec{v}_M de la forma

$$\vec{v}_M = \sum_{i=1}^M v_i \vec{e}_i, \quad \vec{v}_N = \sum_{i=1}^N v_i \vec{e}_i.$$

Estos vectores son evidentemente distintos pues uno es una suma de M términos y el otro una suma de N . Sin embargo, debe haber una forma de decir si \vec{v}_M y \vec{v}_N están muy próximos cuando M y N son muy grandes. Para ello, lo que hacemos es construir un escalar a partir de dichos vectores y aplicar la definición de convergencia para escalares. Evidentemente, el escalar más obvio para este fin es la norma que hemos definido antes. Sin embargo, sólo en espacios de Banach bajo una norma dada podemos tratar directamente sumas infinitas. De lo contrario, el resultado de la suma infinita bien pudiera ser igual a un objeto que no pertenezca al espacio en el que estamos trabajando; ese es el caso ya comentado en el apartado 2.4 de la sucesión cuyo término general es $\sum_{j=1}^n \frac{1}{j!} x^j$.

2.6 Espacios de Hilbert. Bases ortonormales.

Definición: Sea \mathcal{H} un espacio lineal. \mathcal{H} es un **espacio de Hilbert** si es un espacio pre-Hilbert y de Banach bajo la norma asociada al producto escalar.

Definición: Dado un espacio de Hilbert \mathcal{H} , un subconjunto $\mathcal{W} \subset \mathcal{H}$ es un **subespacio de Hilbert** si es un subespacio lineal y es de Banach.

Ejemplo: Evidentemente, todo espacio pre-Hilbert de dimensión finita es un espacio de Hilbert.

Ejemplo: Definido el producto escalar estándar en $\mathcal{L}^2[a, b]$, esto es, $(\vec{\phi}, \vec{\psi}) = \int_a^b \phi(x)^* \psi(x) dx$, $\mathcal{L}^2[a, b]$ es un espacio de Hilbert. El

subespacio vectorial de las funciones continuas $C[a, b]$ de $\mathcal{L}^2[a, b]$ no es un subespacio de Hilbert porque no es completo.

Nótese que no hemos impuesto restricción alguna a la dimensión del espacio de Hilbert. De hecho, muchos de los espacios de Hilbert de interés en Mecánica Cuántica serán espacios lineales de dimensión infinita. Sin embargo, como acabamos de ver en la sección anterior no habrá mayor problema a la hora de tratar en un Hilbert las sumas infinitas, pues es un espacio de Banach y, por tanto, toda sucesión de Cauchy es convergente en el espacio. Para ello empezamos definiendo el concepto de desarrollo de Fourier, entendido éste figuradamente como una combinación lineal con infinitos términos.

Definición: Sea \mathcal{H} un espacio de Hilbert y $\mathcal{C} = \{\vec{f}_1, \vec{f}_2, \vec{f}_3, \dots\}$ un conjunto ortonormal numerable. A la suma

$$\sum_j v_j \vec{f}_j, \quad v_i \in \mathbb{C}$$

se le denomina **desarrollo de Fourier** con coeficientes complejos $\{v_1, v_2, v_3, \dots\}$.

Fíjese que esta definición es más amplia que la de combinación lineal, puesto que ahora *la suma no está restringida a un número finito de términos* (aunque es más restringida en el sentido de que los vectores que aparecen han de ser ortonormales).

Definición: Sea \mathcal{H} un espacio de Hilbert. El conjunto ortonormal $\mathcal{B}_F = \{\vec{f}_1, \vec{f}_2, \vec{f}_3, \dots\}$ es una **base ortonormal o de Fourier** de \mathcal{H} si todo vector de \mathcal{H} se puede escribir como un **desarrollo de Fourier** $\vec{v} = \sum_j v_j \vec{f}_j$. Los números (en general complejos) v_j son las **coordenadas** del vector \vec{v} en la base \mathcal{B}_F .

Evidentemente, para espacios de dimensión finita esta definición no es sino un caso particular de base lineal. Sin embargo, para espacios de dimensión infinita la distinción entre los dos tipos de base es esencial, pues puede demostrarse que las bases de Fourier *no* son bases lineales. En un espacio de dimensión infinita sólo consideraremos bases de Fourier.

Por otro lado, cabe preguntarse si en un espacio de Hilbert de dimensión infinita *existe* una base de Fourier *numerable*, tal y como la acabamos de definir. En todos los casos de interés físico la respuesta es afirmativa, aunque desde una perspectiva puramente

matemática se admite la existencia de espacios de Hilbert en los que las bases de Fourier no son numerables. Obviamente, y a la vista de este comentario, supondremos en lo que sigue que el espacio de Hilbert \mathcal{H} posee una base de Fourier numerable (en cuyo caso puede demostrarse que *todas* las bases de Fourier son numerables; nótese la analogía entre esta afirmación y el hecho de que en un espacio vectorial finito todas las bases lineales poseen el mismo número de elementos).

Teorema: Dada la base de Fourier $\mathcal{B}_F = \{\vec{f}_1, \vec{f}_2, \vec{f}_3, \dots\}$ de un espacio de Hilbert \mathcal{H} , las coordenadas v_i del desarrollo de Fourier $\vec{v} = \sum_j v_j \vec{f}_j$ están dadas por

$$v_i = (\vec{f}_i, \vec{v}).$$

Como consecuencia del anterior teorema, dados dos vectores $\vec{v} = \sum_j v_j \vec{f}_j$ y $\vec{w} = \sum_j w_j \vec{f}_j$, se cumple

$$\begin{aligned} \|\vec{v}\| &= \sqrt{\sum_j |v_j|^2} \\ (\vec{v}, \vec{w}) &= \sum_j v_j^* w_j. \end{aligned}$$

Ejercicio: Demuéstranse las dos igualdades anteriores.

Ejemplos de bases ortonormales en espacios de Hilbert son los siguientes (admitámoslo sin demostración):

1.- En \mathbb{C}_2^∞ , la base $\mathcal{B}_F = \{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3, \dots\}$ con $\vec{e}_1 = (1, 0, 0, \dots)$, $\vec{e}_2 = (0, 1, 0, \dots)$, ...

2.- En $\mathcal{L}^2[0, L]$:

- La base exponencial de Fourier $\mathcal{B}_F = \{\gamma_0(x), \gamma_1(x), \gamma_{-1}(x), \dots\}$ con $\gamma_n(x) = \sqrt{1/L} \exp(i2\pi nx/L)$.

- La base en cosenos de Fourier $\mathcal{B}_F = \{\zeta_0(x), \zeta_1(x), \zeta_2(x), \zeta_3(x), \dots\}$ con $\zeta_n(x) = \sqrt{2/L} \cos(n\pi x/L)$.

- La base en senos de Fourier $\mathcal{B}_F = \{\chi_1(x), \chi_2(x), \chi_3(x), \dots\}$ con $\chi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$.

3.- En $\mathcal{L}^2[-1, 1]$, la base de polinomios de Legendre $\mathcal{B}_F = \{P_0, P_1, P_2, \dots\}$ con

$$P_n(x) = \sqrt{\frac{2n+1}{2}} \frac{1}{n! 2^n} \frac{d^n [(x^2-1)^n]}{dx^n}.$$

4.- En $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^+)$, con $\mathbb{R}^+ = [0, +\infty)$, la base de funciones de Laguerre $\mathcal{B}_F = \{\mathfrak{L}_0, \mathfrak{L}_1, \mathfrak{L}_2, \dots\}$ con

$$\mathfrak{L}_n(x) \equiv \frac{1}{n!} \exp(-x/2) \cdot L_n(x),$$

siendo $L_n(x)$ los polinomios de Laguerre,

$$L_n(x) = \exp(x) \frac{d^n}{dx^n} (x^n \exp(-x)).$$

5.- En $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, la base de las llamadas funciones $\mathfrak{H}_n(x)$ de Hermite $\mathcal{B}_F = \{\mathfrak{H}_0(x), \mathfrak{H}_1(x), \mathfrak{H}_2(x), \dots\}$ con

$$\mathfrak{H}_n(x) \equiv \frac{1}{(2^n n! \sqrt{\pi})^{1/2}} \exp(-x^2/2) \cdot H_n(x),$$

siendo $H_n(x)$ los polinomios de Hermite,

$$H_n(x) = (-1)^n \exp(x^2) \frac{d^n}{dx^n} (\exp(-x^2)).$$

Aunque en este capítulo nos movemos a un nivel puramente formal, conviene mencionar que estas bases van a jugar un papel importante en Mecánica Cuántica. En concreto, las bases de Fourier, Legendre, Laguerre y Hermite desempeñan papeles esenciales en el tratamiento cuántico del pozo cuadrado infinito, la teoría del momento angular, el átomo de hidrógeno y el oscilador armónico, respectivamente.

Definición: Sea \mathcal{H} un espacio de Hilbert y $\mathcal{W} \subset \mathcal{H}$ un subespacio de Hilbert. Se dice que un vector $\vec{v} \in \mathcal{H}$ es ortogonal a \mathcal{W} si \vec{v} es ortogonal a todos los vectores de \mathcal{W} (esto es, si $\vec{v} \perp \vec{w} \quad \forall \vec{w} \in \mathcal{W}$).

Al conjunto formado por todos los vectores que son ortogonales a \mathcal{W} se le denomina **complemento ortogonal** de \mathcal{W} , simbolizándose por \mathcal{W}^\perp .

Ejercicio: Demuestre que el complemento ortogonal \mathcal{W}^\perp es un subespacio lineal de \mathcal{H} . (Puede también probarse, aunque con mayor dificultad, que \mathcal{W}^\perp es subespacio de Hilbert).

Teorema (de la proyección ortogonal): Dado un subespacio de Hilbert \mathcal{W} de un Hilbert \mathcal{H} , todo vector $\vec{v} \in \mathcal{H}$ puede escribirse de forma única como

$$\vec{v} = \vec{v}_{\mathcal{W}} + \vec{v}_{\mathcal{W}^{\perp}}, \quad \text{con } \vec{v}_{\mathcal{W}} \in \mathcal{W} \text{ y } \vec{v}_{\mathcal{W}^{\perp}} \in \mathcal{W}^{\perp}.$$

Al vector $\vec{v}_{\mathcal{W}}$ se le llama **proyección ortogonal** de \vec{v} sobre \mathcal{W} .

Se dice entonces que el espacio de Hilbert \mathcal{H} es **suma directa** de los subespacios \mathcal{W} y \mathcal{W}^{\perp} y se escribe $\mathcal{H} = \mathcal{W} \oplus \mathcal{W}^{\perp}$.

2.7 Isomorfismos entre espacios de Hilbert.*

Definición. Sean $\mathcal{H}^{(1)}$ y $\mathcal{H}^{(2)}$ dos espacios de Hilbert. Se dice que son **isomorfos** si existe una aplicación biyectiva entre $\mathcal{H}^{(1)}$ y $\mathcal{H}^{(2)}$, llamada isomorfismo, que conserva el producto escalar. Esto significa que si la aplicación asigna a un vector cualquiera $\vec{v}^{(1)} \in \mathcal{H}^{(1)}$ un vector único $\vec{v}^{(2)} \in \mathcal{H}^{(2)}$, y hace corresponder a otro vector cualquiera $\vec{w}^{(1)} \in \mathcal{H}^{(1)}$ otro vector único $\vec{w}^{(2)} \in \mathcal{H}^{(2)}$, entonces la aplicación conserva en $\mathcal{H}^{(2)}$ el producto escalar en $\mathcal{H}^{(1)}$, esto es, que se cumple que $(\vec{v}^{(1)}, \vec{w}^{(1)}) = (\vec{v}^{(2)}, \vec{w}^{(2)})$.

Teorema: Todos los espacios de Hilbert con igual dimensión finita son isomorfos entre sí.

Teorema: Si un espacio de Hilbert es de **dimensión infinita** y posee bases de Fourier numerables entonces es **isomorfo a \mathbb{C}_2^{∞}** (este es el llamado *teorema de Reisz-Fisher*).

Ejemplo: Sea $\mathcal{B}_F = \{\vec{f}_1, \vec{f}_2, \vec{f}_3, \dots\}$ la base de Fourier usual de \mathbb{C}_2^{∞} , y consideremos el espacio de funciones $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ y una base de Fourier $\mathcal{B}'_F = \{\phi_1(x), \phi_2(x), \phi_3(x), \dots\}$ (por ejemplo, la formada por las funciones de Hermite). Tomemos un vector $\eta(x) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ escrito como

$$\eta(x) = \sum_{j=1}^{\infty} \eta_j \phi_j(x), \quad \text{siendo } \eta_j = (\phi_j(x), \eta(x)),$$

donde se ha escrito la dependencia explícita en x de los vectores de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Establezcamos ahora la aplicación

$$\eta(x) \rightarrow \vec{u} = \sum_{j=1}^{\infty} \eta_j \vec{f}_j \in \mathbb{C}_2^{\infty},$$

que nos da un vector \vec{u} de \mathbb{C}_2^{∞} , cuyas componentes en la base \mathcal{B}_F de \mathbb{C}_2^{∞} coinciden con las componentes de $\eta(x)$ en la base \mathcal{B}'_F de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Esta aplicación cumple las propiedades de isomorfismo.

Nota: Naturalmente, que dos espacios sean isomorfos no quiere decir que el isomorfismo que los conecte sea único. En el ejemplo que hemos discutido, el isomorfismo depende de la base concreta \mathcal{B}'_F utilizada. Este teorema de Reisz-Fisher es la clave para entender que las formulaciones de Heisenberg (matricial) y Schrödinger (funcional) de la Mecánica Cuántica son equivalentes: la primera trabaja en \mathbb{C}_2^∞ , mientras que la segunda lo hace en el espacio de Hilbert isomorfo $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.

2.8 Operadores lineales en un espacio de Hilbert.

Tras haber caracterizado los espacios de Hilbert es necesario, como ya se apuntó en el primer capítulo, hablar de los operadores definidos en un espacio de Hilbert. La discusión de las próximas secciones no será exhaustiva, ya que nos centraremos sólo en los puntos que vayamos realmente a necesitar. Invitamos al alumno interesado en un tratamiento más extenso y riguroso a que consulte la Bibliografía sugerida al final de este libro.

Definición: Sea \mathcal{H} un espacio de Hilbert. Un **operador** \hat{A} es cualquier aplicación de un subespacio lineal (no necesariamente de Hilbert) $\mathcal{D}(\hat{A}) \subset \mathcal{H}$, llamado **dominio** del operador, en \mathcal{H} tal que a cada vector $\vec{v} \in \mathcal{D}(\hat{A})$ le hace corresponder un segundo vector $\hat{A}\vec{v}$ que pertenece al espacio de Hilbert \mathcal{H} .

Nótese que para definir un operador no basta con indicar su regla de actuación, sino que además hay que establecer su dominio $\mathcal{D}(\hat{A})$, esto es, $\hat{A} : \mathcal{D}(\hat{A}) \rightarrow \mathcal{H}$.

Por otra parte, imponer que $\mathcal{D}(\hat{A})$ sea un subespacio lineal de \mathcal{H} puede parecer restrictivo. El no hacerlo sería el origen de problemas meramente técnicos y, por tanto, perjudiciales para nuestros propósitos. Por igual motivo introduciremos una hipótesis algo más fuerte en lo relativo a los dominios de definición: **sólo** consideraremos aquellos operadores cuyo dominio contenga una base de Fourier (no única, naturalmente) de \mathcal{H} . Técnicamente, éstos son los llamados operadores *con dominio denso*.

Definición: Sea \hat{A} un operador en un espacio de Hilbert \mathcal{H} . El **recorrido** de \hat{A} es el subconjunto $\mathcal{R}(\hat{A})$ de \mathcal{H} definido por

$$\mathcal{R}(\hat{A}) = \left\{ \vec{u} \in \mathcal{H} \text{ tal que existe } \vec{w} \in \mathcal{D}(\hat{A}) \text{ de forma que } \vec{u} = \hat{A}\vec{w} \right\},$$

esto es, el conjunto de resultados de la aplicación de \hat{A} a todos los vectores de su dominio. El recorrido $\mathcal{R}(\hat{A})$ recibe a veces el nombre de *imagen* de $\mathcal{D}(\hat{A})$.

Definición: Sea \hat{A} un operador de un espacio de Hilbert \mathcal{H} . Se dice que \hat{A} es **lineal** si, para todo par $\vec{u}, \vec{v} \in \mathcal{D}(\hat{A})$ y para todo complejo α , se cumple que $\hat{A}(\vec{u} + \vec{v}) = \hat{A}\vec{u} + \hat{A}\vec{v}$ y que $\hat{A}(\alpha\vec{u}) = \alpha\hat{A}\vec{u}$.

Ejercicio: Sea \hat{A} un operador lineal sobre \mathcal{H} . Demuestre que $\mathcal{R}(\hat{A})$ es un subespacio lineal de \mathcal{H} .

Definiciones: Sean \hat{A} y \hat{B} dos operadores lineales de un espacio de Hilbert \mathcal{H} , y α un número complejo.

1. El operador $\hat{A} + \hat{B}$, **suma** de \hat{A} y \hat{B} , se define de la forma

$$(\hat{A} + \hat{B})\vec{u} = \hat{A}\vec{u} + \hat{B}\vec{u},$$

siendo su dominio $\mathcal{D}(\hat{A}) \cap \mathcal{D}(\hat{B})$.

2. El operador $\alpha\hat{A}$, **producto** de \hat{A} por el escalar complejo α , se define mediante

$$(\alpha\hat{A})\vec{u} = \alpha(\hat{A}\vec{u})$$

y su dominio es igual al dominio de \hat{A} .

Nótese que, implícitamente, a todo escalar $\alpha \in \mathbb{C}$ le corresponde un operador $\alpha\hat{I}$, donde \hat{I} es el operador unidad definido como $\hat{I}\vec{u} = \vec{u}$, para todo $\vec{u} \in \mathcal{H}$. Es por ello por lo que se suele escribir ese operador como α en lugar de $\alpha\hat{I}$.

Ejercicio: Demuestre que, bajo la suma y el producto por un escalar que acabamos de presentar, el conjunto de los operadores lineales definidos en un espacio de Hilbert \mathcal{H} posee estructura de espacio lineal.

3. El operador $\hat{A}\hat{B}$, **producto o composición** de los operadores \hat{A} y \hat{B} se define como

$$(\hat{A}\hat{B})\vec{u} = \hat{A}(\hat{B}\vec{u})$$

y su dominio es el subconjunto de $\mathcal{D}(\hat{B})$ formado por aquellos vectores \vec{u} tales que $\hat{B}\vec{u} \in \mathcal{D}(\hat{A})$.

A la vez, dado el número natural n , definiremos el operador lineal \hat{A}^n como el resultado de componer \hat{A} consigo mismo n veces:

$$\hat{A}^n = \hat{A}\hat{A}\dots\hat{A} \text{ (} n \text{ veces)}$$

Por convenio $\hat{A}^0 = \hat{I}$, donde \hat{I} es el operador identidad.

Ejercicio: Pruebe que la composición de dos operadores lineales es un operador lineal. Demuestre que, al igual que la suma, el producto de operadores verifica la propiedad asociativa. Análogamente, pruebe que el producto de operadores es distributivo respecto a la suma.

Ejercicio: Demuestre que la suma de operadores verifica la propiedad conmutativa, pero que esto no es cierto en general para el producto.

4. El operador lineal \hat{A} se dice **invertible** si para cualquier par $\vec{u}, \vec{v} \in \mathcal{D}(\hat{A})$ con $\vec{u} \neq \vec{v}$, entonces $\hat{A}\vec{u} \neq \hat{A}\vec{v}$. Como consecuencia, si \hat{A} es invertible se puede definir el **operador inverso** \hat{A}^{-1} , con dominio igual al recorrido de \hat{A} , y cuya regla de actuación es

$$\hat{A}^{-1}\vec{u} = \vec{w}, \text{ donde } \hat{A}\vec{w} = \vec{u}.$$

Nótese que el recorrido de \hat{A}^{-1} es, precisamente, $\mathcal{D}(\hat{A})$.

Ejercicio: Demuéstranse las siguientes propiedades relativas al operador inverso (no preste atención a los problemas relativos a los dominios de definición):

- \hat{A}^{-1} es lineal.
- $(\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}$.
- $(\hat{A}^{-1})^{-1} = \hat{A}$.
- $(\alpha\hat{A})^{-1} = (1/\alpha)\hat{A}^{-1}$.

Ejercicio: Demostrar que la condición necesaria y suficiente para que un operador lineal \hat{A} sea invertible es que $\hat{A}\vec{v} = 0 \Leftrightarrow \vec{v} = 0$.

• El lector ya sabe que la consecuencia más relevante del carácter completo de un espacio de Hilbert es el poder tratar las sumas infinitas de vectores como si fuesen finitas. En Mecánica Cuántica aparecerán también sumas infinitas de operadores lineales, por lo que también es necesario saber en qué condiciones podemos asegurar su convergencia. Este será el objetivo general del resto de esta sección.

Definición: Se define la **norma** de un operador lineal como

$$\|\hat{A}\| = \sup_{\vec{u} \in \mathcal{H}} \frac{\|\hat{A}\vec{u}\|}{\|\vec{u}\|}.$$

La norma de un operador $\|\hat{A}\|$ verifica las cuatro propiedades (a)-(d) de una norma.

Un operador se dice **acotado** si tiene norma finita.

Al conjunto de los operadores acotados definidos en un Hilbert \mathcal{H} lo designaremos por $\mathcal{A}(\mathcal{H})$. Dados $\hat{A}, \hat{B} \in \mathcal{A}(\mathcal{H})$, se tienen las siguientes propiedades (demuéstranse como ejercicio):

1. $\alpha\hat{A} + \beta\hat{B} \in \mathcal{A}(\mathcal{H})$ siendo $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$.
2. $\hat{A}\hat{B} \in \mathcal{A}(\mathcal{H})$ y $\|\hat{A}\hat{B}\| \leq \|\hat{A}\| \|\hat{B}\|$. Por tanto $\hat{A}^n \in \mathcal{A}(\mathcal{H})$ y $\|\hat{A}^n\| \leq \|\hat{A}\|^n$, con n un número natural
3. Las propiedades anteriores dotan a $\mathcal{A}(\mathcal{H})$ de una estructura de espacio de Banach; sin embargo, en general no es posible dotarle de una estructura de espacio de Hilbert puesto que normalmente no encontraremos un producto escalar de operadores cuya norma estándar sea la norma que acabamos de definir.

La característica más importante de los operadores acotados es que éstos son **continuos**. Es decir, cambios infinitesimales en un vector implican cambios infinitesimales en la aplicación del operador sobre dicho vector. En efecto, dados $\hat{A} \in \mathcal{A}(\mathcal{H})$ y los vectores \vec{u} y $\vec{u} + \delta\vec{u}$ (con $\delta\vec{u}$ un vector infinitesimal) entonces $\hat{A}(\vec{u} + \delta\vec{u}) - \hat{A}\vec{u} = \hat{A}\delta\vec{u}$. Ahora bien, \hat{A} es acotado por lo que

$$\|\hat{A}(\vec{u} + \delta\vec{u}) - \hat{A}\vec{u}\| = \|\hat{A}\delta\vec{u}\| \leq R\|\delta\vec{u}\|,$$

siendo $R = \|\hat{A}\|$. Como R es finito, $R\|\delta\vec{u}\|$ es infinitesimal, que es lo que se quería demostrar. Otra forma de decir lo anterior es que *sucesiones convergentes en el dominio de un operador acotado se transforman en sucesiones convergentes en su recorrido*. Por ello, dada la sucesión $\{\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots\} \subset \mathcal{D}(\hat{A})$, con límite $\vec{u} \in \mathcal{D}(\hat{A})$, podemos estar seguros que el límite de la sucesión $\{\hat{A}\vec{u}_1, \hat{A}\vec{u}_2, \dots\}$ es $\hat{A}\vec{u}$.

Veamos dos consecuencias de la continuidad de los operadores acotados. En primer lugar **es posible extender la linealidad de un operador acotado a una serie de Fourier** (y, en general, a toda suma infinita convergente de vectores): si $\{\vec{f}_1, \vec{f}_2, \dots\}$ es una base de Fourier contenida en $\mathcal{D}(\hat{A})$, tenemos que para todo $\vec{u} \in \mathcal{D}(\hat{A})$:

$$\vec{u} = \sum_n \alpha_n \vec{f}_n \Rightarrow \hat{A}\vec{u} = \sum_n \alpha_n \hat{A}\vec{f}_n$$

Además, debido al carácter acotado de \hat{A} la expresión anterior siempre converge, incluso aunque \vec{u} no pertenezca al dominio de \hat{A} . Nada impide entonces extender el dominio de un operador acotado a todo el espacio de Hilbert y así lo haremos a partir de ahora.

En segundo lugar, si $g(x)$ es una función de variable compleja que admite el desarrollo de Taylor $g(x) = \sum_n \gamma_n x^n$, $\gamma_n \in \mathbb{C}$, dado el operador acotado \hat{A} podremos definir el operador lineal $g(\hat{A})$ a partir de la regla de actuación

$$g(\hat{A}) \vec{u} = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N \gamma_n \hat{A}^n \vec{u}$$

y, si el límite existe, escribiremos simplemente $g(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n \hat{A}^n$.

Puesto que, como acabamos de comentar, el dominio de un operador acotado es todo el espacio de Hilbert, no existe problema alguno relacionado con el dominio de $g(\hat{A})$. El único problema es determinar cuándo converge la serie. Esto último es sencillo, ya que si $R = \|\hat{A}\|$, entonces para cualquier \vec{u} se cumple

$$\left\| \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N \gamma_n \hat{A}^n \vec{u} \right\| = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\| \sum_{n=0}^N \gamma_n \hat{A}^n \vec{u} \right\| \leq \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N |\gamma_n| R^n \|\vec{u}\|$$

(en el primer paso hemos tenido en cuenta el carácter completo del espacio de Hilbert, mientras que en el segundo hemos aplicado la desigualdad triangular y propiedades de la norma de un operador).

Por tanto,

$$\|g(\hat{A}) \vec{u}\| = \left\| \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N \gamma_n \hat{A}^n \vec{u} \right\| \leq \left(\sum_{n=0}^{\infty} |\gamma_n| R^n \right) \|\vec{u}\|.$$

Así, si la serie $\sum_{n=0}^{\infty} |\gamma_n| R^n$ converge, el operador lineal $g(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n \hat{A}^n$ existe y es acotado (con norma $R_g \leq \sum_{n=0}^{\infty} |\gamma_n| R^n$).

El problema es que los operadores lineales de interés en Mecánica Cuántica *no tienen por qué ser acotados*. Sin embargo en el formalismo aparecen

habitualmente las expresiones

$$g(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n \hat{A}^n$$

$$\hat{A}\vec{u} = \hat{A} \left(\sum_n u_n \vec{f}_n \right) = \sum_n u_n \hat{A} \vec{f}_n$$

que, en principio, son sólo válidas para operadores acotados. La primera igualdad (función de un operador) basta con entenderla en sentido simbólico, pero teniendo en cuenta que pueden existir vectores para los cuales la actuación de $g(\hat{A})$ no tenga sentido (bien por problemas relacionados con el dominio de los operadores o bien porque el resultado sea divergente, aunque conviene notar que esto último es lo que sucedería también si \hat{A} fuese acotado pero la serie $\sum_{n=0}^{\infty} |\gamma_n| R^n$ no convergiese). Para discutir la segunda igualdad debemos esperar a algunos de los resultados de la siguiente sección, aunque podemos anticipar que, a efectos prácticos, es cierta para los operadores de interés en Mecánica Cuántica que no sean acotados.

2.9 Operador adjunto. Operadores hermíticos y unitarios.

Tras la discusión general de la sección anterior nos vamos a centrar en aquellos operadores lineales que serán necesarios en el formalismo cuántico. Para ello definiremos en primer lugar el operador adjunto y, a continuación, describiremos varios tipos de operadores lineales.

• **Definición:** Sea el operador lineal \hat{A} definido en un espacio de Hilbert \mathcal{H} . Definimos el **operador adjunto** de \hat{A} , al que llamaremos \hat{A}^\dagger , como el operador que verifica

$$(\vec{u}, \hat{A}\vec{v}) = (\hat{A}^\dagger \vec{u}, \vec{v})$$

para cualquier vector $\vec{v} \in \mathcal{D}(\hat{A})$ y $\vec{u} \in \mathcal{D}(\hat{A}^\dagger)$.

Algunas propiedades del operador adjunto son (demuéstranse como ejercicio):

$$(\vec{v}, \hat{A}^\dagger \vec{u}) = (\hat{A} \vec{v}, \vec{u}), \text{ para cualquier vector } \vec{v} \in \mathcal{D}(\hat{A}) \text{ y } \vec{u} \in \mathcal{D}(\hat{A}^\dagger).$$

$$(\alpha \hat{A} + \beta \hat{B})^\dagger = \alpha^* \hat{A}^\dagger + \beta^* \hat{B}^\dagger, \text{ donde } \alpha \text{ y } \beta \text{ son números complejos.}$$

$$(\widehat{A}\widehat{B})^\dagger = \widehat{B}^\dagger \widehat{A}^\dagger \text{ (¡atención al cambio de orden!).}$$

$$(\widehat{A}^{-1})^\dagger = (\widehat{A}^\dagger)^{-1}.$$

$$(\widehat{A}^\dagger)^\dagger \vec{v} = \widehat{A}\vec{v}, \quad \forall \vec{v} \in \mathcal{D}(\widehat{A}).$$

• **Definición:** Se dice que un operador lineal \widehat{A} es **hermítico** si

$$\widehat{A}\vec{u} = \widehat{A}^\dagger\vec{u} \text{ para todo } \vec{u} \in \mathcal{D}(\widehat{A}).$$

Nota: Por definición, si \widehat{A} es hermítico se tiene que $\mathcal{D}(\widehat{A}) \subseteq \mathcal{D}(\widehat{A}^\dagger)$ y que \widehat{A} actúa igual que \widehat{A}^\dagger sobre los vectores $\vec{u} \in \mathcal{D}(\widehat{A})$. Ahora bien, en principio nada impide que el dominio de \widehat{A}^\dagger sea más amplio que el de \widehat{A} . Si éste no fuese el caso, $\mathcal{D}(\widehat{A}) = \mathcal{D}(\widehat{A}^\dagger)$ y podremos afirmar estrictamente que $\widehat{A} = \widehat{A}^\dagger$. Entonces el operador, además de hermítico, es **autoadjunto**. En lo que sigue *identificaremos operadores hermíticos con autoadjuntos* (lo que muchas veces se podrá hacer tras una redefinición adecuada del dominio de \widehat{A}). Esta falta de rigor sólo sería relevante en formulaciones matemáticas más rigurosas que las que pretendemos ofrecer en este libro. Empero, el lector deberá advertir que algunos de los resultados de las siguientes secciones sólo pueden aplicarse estrictamente a operadores autoadjuntos.³

Algunas propiedades de los operadores hermíticos son (demuéstrense como ejercicio):

1. Si \widehat{A} y \widehat{B} son hermíticos y $a, b \in \mathbb{R}$, entonces $a\widehat{A} + b\widehat{B}$ es hermítico.
2. Si \widehat{A} es hermítico, entonces \widehat{A}^n , con n un número natural, es hermítico.

Teorema: La condición necesaria y suficiente para que un operador lineal \widehat{A} sea hermítico es que $(\vec{v}, \widehat{A}\vec{u}) = (\widehat{A}\vec{v}, \vec{u})$ para todo $\vec{u}, \vec{v} \in \mathcal{D}(\widehat{A})$.

En efecto, si \widehat{A} es hermítico $(\vec{v}, \widehat{A}\vec{u}) = (\widehat{A}^\dagger\vec{v}, \vec{u}) = (\widehat{A}\vec{v}, \vec{u})$, quedando probada la condición necesaria. Para probar la condición

³ Al final del capítulo hay un par de problemas en los que se discute la diferencia estricta entre operadores hermíticos y autoadjuntos.

suficiente, consideremos una base ortonormal $\{\vec{f}_1, \vec{f}_2, \dots\} \subset \mathcal{D}(\hat{A})$.

Dado un vector $\vec{v} \in \mathcal{D}(\hat{A})$ intentemos evaluar $\hat{A}^\dagger \vec{v}$. Así

$$\hat{A}^\dagger \vec{v} = \sum_n (\vec{f}_n, \hat{A}^\dagger \vec{v}) \vec{f}_n = \sum_n (\hat{A} \vec{f}_n, \vec{v}) \vec{f}_n,$$

pero, por hipótesis, $(\hat{A} \vec{f}_n, \vec{v}) = (\vec{f}_n, \hat{A} \vec{v})$, luego

$$\hat{A}^\dagger \vec{v} = \sum_n (\vec{f}_n, \hat{A} \vec{v}) \vec{f}_n = \hat{A} \vec{v}$$

y, por construcción, $\hat{A}^\dagger \vec{v}$ existe y es igual a $\hat{A} \vec{v}$ para todo vector \vec{v} del dominio de \hat{A} .

A partir de este teorema de caracterización se puede demostrar otro equivalente:

$$\hat{A} \text{ es hermítico} \Leftrightarrow (\vec{u}, \hat{A} \vec{u}) \in \mathbb{R} \text{ para todo } \vec{u} \in \mathcal{D}(\hat{A}).$$

Ejercicio: Sea \hat{A} un operador hermítico y consideremos la función

$$g(x) = \sum_n \gamma_n x^n; \quad \gamma_n \in \mathbb{R}.$$

Si el operador $g(\hat{A})$ existe, demuestre que también es hermítico. Análogamente demuestre que si $g(i\hat{A})$ existe, entonces

$$(g(i\hat{A})\vec{u}, v) = (\vec{u}, g(-i\hat{A})v).$$

• **Definición:** Un operador hermítico es **positivo** si $(\vec{u}, \hat{A} \vec{u}) \geq 0$ para todo $\vec{u} \in \mathcal{D}(\hat{A})$.

Dados dos operadores hermíticos \hat{A} y \hat{B} con dominio común, se dice que \hat{A} es **mayor o igual que** \hat{B} si $\hat{A} - \hat{B}$ es positivo.

Sea \hat{A} un operador positivo. Puede demostrarse que existe un único operador positivo \hat{B} , con igual dominio que \hat{A} , tal que $\hat{B}^2 = \hat{A}$. Al operador \hat{B} se le denomina **operador raíz cuadrada** de \hat{A} .

• **Definición:** Un operador lineal \hat{U} es **unitario** si $\hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger \hat{U} = 1$.

Algunas propiedades de los operadores unitarios son (demuéstrense como ejercicio):

1. \hat{U} es unitario si y sólo si se cumple que $\|\hat{U}\vec{v}\| = \|\vec{v}\|$. Los operadores unitarios son, pues, acotados, siendo su norma la unidad.
2. Si \hat{U}_1 y \hat{U}_2 son unitarios, entonces $\hat{U}_1\hat{U}_2$ es unitario.
3. Si \hat{A} es hermítico, entonces $e^{i\hat{A}}$ es un operador unitario.

2.10 Representación matricial de un operador.

Hemos comentado que la validez de la expresión

$$\hat{A} \sum_n u_n \vec{f}_n = \sum_n u_n \hat{A} \vec{f}_n$$

no está garantizada, excepto para operadores acotados. Sin embargo, con la ayuda del operador adjunto, vamos a ver que en la mayoría de los casos podremos extender la linealidad de un operador a desarrollos de Fourier siempre que consideremos las coordenadas del resultado en una cierta base.

Sea \hat{A} un operador lineal de \mathcal{H} y $\mathcal{B}_F = \{\vec{f}_1, \vec{f}_2, \dots\}$ una base de Fourier contenida tanto en el dominio de \hat{A} como en el de su adjunto \hat{A}^\dagger (esto será siempre posible en la práctica). Entonces, dado un vector $\vec{u} \in \mathcal{D}(\hat{A})$

$$\hat{A}\vec{u} = \sum_n (\vec{f}_n, \hat{A}\vec{u}) \vec{f}_n = \sum_n (\hat{A}^\dagger \vec{f}_n, \vec{u}) \vec{f}_n$$

Sustituyendo \vec{u} por su desarrollo $\sum_k u_k \vec{f}_k$ en la base \mathcal{B}_F

$$\begin{aligned} \hat{A}\vec{u} &= \sum_n \left(\hat{A}^\dagger \vec{f}_n, \sum_k u_k \vec{f}_k \right) \vec{f}_n = \sum_n \sum_k u_k (\hat{A}^\dagger \vec{f}_n, \vec{f}_k) \vec{f}_n \\ &= \sum_n \left(\sum_k u_k (\vec{f}_n, \hat{A} \vec{f}_k) \right) \vec{f}_n. \end{aligned}$$

Por tanto, si w_n es la coordenada n -ésima de $\hat{A}\vec{u}$ en la base \mathcal{B}_F , se tiene que

$$w_n = (\vec{f}_n, \hat{A}\vec{u}) = \sum_k (\vec{f}_n, \hat{A} \vec{f}_k) u_k = \sum_k A_{nk} u_k$$

donde la “matriz” de coeficientes

$$A_{nk} = (\vec{f}_n, \hat{A} \vec{f}_k)$$

se denomina **representación matricial** del operador \hat{A} en la base \mathcal{B}_F .

Fíjese que la idea subyacente ha sido evitar la actuación de \hat{A} sobre una suma infinita, trasladando la actuación del operador al otro lado del producto escalar usando el operador adjunto. Además, a partir del desarrollo anterior, se tiene que

$$\left(\vec{f}_n, \hat{A} \sum_k u_k \vec{f}_k \right) = \sum_k \left(\vec{f}_n, u_k \hat{A} \vec{f}_k \right).$$

Esto no quiere decir *exactamente* que $\hat{A} \sum_k u_k \vec{f}_k = \sum_k u_k \hat{A} \vec{f}_k$, ya que como hemos dicho la segunda suma puede ser divergente. Lo que hemos presentado es una expresión que relaciona las coordenadas de $\hat{A}\vec{u}$ con las de \vec{u} a través de la representación matricial. Bien es cierto que dicha expresión se puede “deducir” sin recurrir al operador adjunto partiendo de la hipótesis $\hat{A} \sum_k u_k \vec{f}_k = \sum_k u_k \hat{A} \vec{f}_k$. Esto último nos permite afirmar que la suma $\sum_k u_k \hat{A} \vec{f}_k$, de converger, lo hace a $\hat{A}\vec{u}$, y esa es también la razón por la que muchas veces se escriba directamente la última igualdad, aunque entonces ésta ha de entenderse condicionalmente si el operador no es acotado.⁴

De similar manera puede demostrarse que:

1. $(\hat{A} + \hat{B})_{nk} = A_{nk} + B_{nk}$.
2. $(\alpha \hat{A})_{nk} = \alpha A_{nk}$.
3. $(\hat{A}\hat{B})_{nk} = \sum_j A_{nj} B_{jk}$.
4. $\hat{A}_{nk}^\dagger = A_{kn}^*$. Fíjese entonces que la matriz de \hat{A}^\dagger es la traspuesta conjugada de la de \hat{A} .

Especial importancia tienen los productos escalares $(\vec{u}, \hat{A}\vec{w})$, denominados **elementos de matriz**. Así, si $\{u_n\}$ y $\{w_n\}$ son las coordenadas de \vec{u} y \vec{w}

⁴De todas maneras, para que la igualdad no fuese cierta tendría que producirse una situación en principio excepcional: que la suma $\sum_k u_k \hat{A} \vec{f}_k$ fuese igual a un elemento no perteneciente al espacio de Hilbert (por ejemplo a una función $\eta(x)$ no normalizable) pero tal que se cumpliese $(\vec{f}_n, \vec{\eta}) = (\vec{f}_n, \hat{A}\vec{u})$. En la colección de problemas resueltos de este capítulo veremos un ejemplo sencillo en el que tal situación aparece, pero tenga en cuenta que la esencia del formalismo cuántico no se ve afectada en absoluto por este tipo de detalles. Tómense éstos, simplemente, como meras advertencias complementarias de los riesgos de trabajar con expresiones que contengan sumas infinitas.

respectivamente,

$$\begin{aligned}
 (\vec{u}, \hat{A}\vec{w}) &= (\hat{A}^\dagger \vec{u}, \vec{w}) = \left(\hat{A}^\dagger \vec{u}, \sum_n w_n \vec{e}_n \right) = \sum_n w_n (\hat{A}^\dagger \vec{u}, \vec{e}_n) = \\
 &= \sum_n w_n (\vec{u}, \hat{A} \vec{e}_n) = \sum_n w_n \left(\sum_k u_k \vec{e}_k, \hat{A} \vec{e}_n \right) \\
 &= \sum_n \sum_k u_k^* w_n (\vec{e}_k, \hat{A} \vec{e}_n)
 \end{aligned}$$

y, en definitiva,

$$(\vec{u}, \hat{A}\vec{w}) = \sum_n \sum_k u_k^* A_{kn} w_n,$$

con $\vec{w} \in \mathcal{D}(\hat{A})$ y $\vec{u} \in \mathcal{D}(\hat{A}^\dagger)$.

Dado un operador hermítico, todas las expresiones anteriores son válidas puesto que las hipótesis adicionales que hemos hecho se cumplen automáticamente. También lo son para un operador unitario para el que, al ser acotado, las precauciones expuestas están de más.

2.11 Proyectores. Proyección ortogonal.

Definición: Un operador lineal \hat{P} , cuyo dominio sea todo el espacio de Hilbert, es un **proyector** si es hermítico y además $\hat{P}^2 = \hat{P} \hat{P} = \hat{P}$ (esto es, si es idempotente).

Como ya hemos comentado en el apartado 2.6, un subespacio \mathcal{W} de \mathcal{H} y su complemento ortogonal \mathcal{W}^\perp verifican el teorema de la proyección ortogonal, de manera que cualquier vector $\vec{u} \in \mathcal{H}$ puede descomponerse de forma unívoca como suma de un elemento de \mathcal{W} (llamado proyección ortogonal de \vec{u} sobre \mathcal{W}) y de un elemento de \mathcal{W}^\perp :

$$\vec{u} = \vec{u}_{\mathcal{W}} + \vec{u}_{\mathcal{W}^\perp} \quad \text{con} \quad \vec{u}_{\mathcal{W}} \in \mathcal{W} \quad \text{y} \quad \vec{u}_{\mathcal{W}^\perp} \in \mathcal{W}^\perp.$$

Usando una base de Fourier $\mathcal{B}_{\mathcal{W}} = \{\vec{f}_1, \vec{f}_2, \dots\}$ de \mathcal{W} , tenemos que la expresión

$$\hat{P}_{\mathcal{W}} \vec{u} = \vec{u}_{\mathcal{W}} = \sum_n (\vec{f}_n, \vec{u}) \vec{f}_n$$

nos da la proyección ortogonal de \vec{u} sobre \mathcal{W} y, además, define la actuación de un operador lineal $\hat{P}_{\mathcal{W}}$ cuyo dominio es todo el espacio de Hilbert. Este operador $\hat{P}_{\mathcal{W}}$ es, por tanto, el **proyector ortogonal** sobre el subespacio \mathcal{W} . Análogamente, $1 - \hat{P}_{\mathcal{W}}$ es el proyector ortogonal sobre \mathcal{W}^\perp .

No es difícil demostrar que \hat{P}_W es un proyector (en el sentido de que es hermítico e idempotente). También la recíproca es cierta: dado un proyector cualquiera \hat{P} existe un subespacio de Hilbert tal que \hat{P} es el proyector ortogonal sobre dicho subespacio. En efecto, partiendo de la igualdad trivial $\vec{v} = \hat{P}\vec{v} + (1 - \hat{P})\vec{v} \equiv \vec{v}_1 + \vec{v}_2$ es fácil demostrar que \vec{v}_1 y \vec{v}_2 son ortogonales y, usando la desigualdad triangular se tiene además que $\|\hat{P}\vec{v}\| \leq \|\vec{v}\|$, con lo que \hat{P} es acotado con norma unidad. Por tanto, \hat{P} proyecta ortogonalmente sobre su recorrido, que es un subespacio vectorial de \mathcal{H} . Que dicho subespacio es también de Hilbert se prueba a partir de la acotación de \hat{P} .

Como ya se ha comentado en el apartado 2.6, se dice entonces que el espacio de Hilbert \mathcal{H} es **suma directa** de los dos subespacios \mathcal{W} y \mathcal{W}^\perp y se escribe $\mathcal{H} = \mathcal{W} \oplus \mathcal{W}^\perp$. El concepto de suma directa puede generalizarse a un número cualquiera (incluso infinito) de subespacios de Hilbert mutuamente ortogonales. En efecto, dado un espacio de Hilbert \mathcal{H} , éste es suma directa de los subespacios $\mathcal{W}_1, \mathcal{W}_2, \dots$ (simbolizándose como $\mathcal{H} = \mathcal{W}_1 \oplus \mathcal{W}_2 \oplus \mathcal{W}_3 \oplus \dots$) si todos estos subespacios son ortogonales entre sí y si cualquier vector $\vec{u} \in \mathcal{H}$ puede escribirse como

$$\vec{u} = \vec{u}_{\mathcal{W}_1} + \vec{u}_{\mathcal{W}_2} + \vec{u}_{\mathcal{W}_3} + \dots,$$

donde

$$\vec{u}_{\mathcal{W}_n} = \hat{P}_{\mathcal{W}_n} \vec{u}$$

es la proyección ortogonal de \vec{u} sobre \mathcal{W}_n . Nótese que esta relación entre vectores se traduce en la relación siguiente para los proyectores

$$\hat{I} = \hat{P}_{\mathcal{W}_1} + \hat{P}_{\mathcal{W}_2} + \hat{P}_{\mathcal{W}_3} + \dots$$

Ejercicio: Sea \mathcal{B}_W una base ortonormal de \mathcal{W} y \mathcal{B}_{W^\perp} una base del complemento ortogonal \mathcal{W}^\perp . Demuestre que $\mathcal{B}_W \cup \mathcal{B}_{W^\perp}$ es una base ortonormal de todo el espacio de Hilbert. ¿Cuál será la representación matricial del proyector \hat{P}_W en esta base? ¿Y la del proyector $\hat{P}_{W^\perp} = 1 - \hat{P}_W$? Generalice el resultado al caso de una descomposición del espacio de Hilbert en una suma directa de un número arbitrario de subespacios de Hilbert ortogonales entre sí.

2.12 Autovalores y autovectores.

Las siguientes definiciones son de gran importancia, ya que tendrán una interpretación física directa dentro del formalismo cuántico.

Definición: Sea \hat{A} un operador lineal de \mathcal{H} y $\vec{u} \in \mathcal{H}$ un vector no nulo. Diremos que \vec{u} es un **autovector** de \hat{A} (o función propia si estamos en un espacio de funciones) con **autovalor** a , en general complejo, si se cumple que

$$\hat{A}\vec{u} = a\vec{u}.$$

(Los autovalores y autovectores reciben también el nombre de *valores propios* y *vectores propios*, respectivamente). El conjunto de todos los autovalores de un operador se denomina **espectro puntual** y se designa mediante el símbolo $\sigma_p(\hat{A})$.

Un autovalor a de \hat{A} es **no degenerado** si, salvo constante multiplicativa, sólo tiene asociado un autovector, esto es, si sólo existe un vector \vec{v} linealmente independiente tal que $\hat{A}\vec{v} = a\vec{v}$. Nótese que la condición de independencia lineal es obvia, ya que si \vec{u} es un autovector con autovalor a , también lo será $\vec{w} = \alpha\vec{u}$ para todo $\alpha \in \mathbb{C}$, pero \vec{u} y \vec{w} no son linealmente independientes. En cualquier caso, esta consideración resultará irrelevante en Mecánica Cuántica, puesto que ésta sólo toma en cuenta vectores de norma unidad, definidos salvo un factor multiplicado de módulo unidad (factor de fase).

Puede darse el caso, sin embargo, de que existan g_n vectores linealmente independientes $\vec{v}_{n1}, \vec{v}_{n2}, \dots, \vec{v}_{ng_n}$ asociados a un mismo autovalor a_n . Entonces se dice que dicho autovalor es **g_n -degenerado**. En este caso, cualquier combinación lineal de los g_n vectores es también un autovector con el mismo autovalor. En efecto

$$\hat{A} \left(\sum_{i=1}^{g_n} c_i \vec{v}_{ni} \right) = \sum_{i=1}^{g_n} c_i \hat{A} \vec{v}_{ni} = \sum_{i=1}^{g_n} c_i a_n \vec{v}_{ni} = a_n \left(\sum_{i=1}^{g_n} c_i \vec{v}_{ni} \right).$$

Así, pues, los autovectores asociados con un autovalor g_n -degenerado constituyen un subespacio vectorial de dimensión g_n , llamado **subespacio propio** asociado al autovalor en cuestión.

Definición: Para algunos operadores lineales \hat{A} pueden existir valores complejos $\alpha \notin \sigma_p(\hat{A})$ para los que, no existiendo ningún vector \vec{u} que satisfaga estrictamente la expresión $\hat{A}\vec{u} = \alpha\vec{u}$, es posible encontrar una sucesión de vectores *normalizados* \vec{u}_n de \mathcal{H} tales que la sucesión $\left\{ (\hat{A} - \alpha) \vec{u}_n \right\}$ tiende a

cero. En ese caso, se dice que el número complejo $\alpha \notin \sigma_p(\hat{A})$ es un **autovalor impropio**. El conjunto de autovalores impropios de un operador \hat{A} se denomina **espectro continuo** y se designa mediante $\sigma_c(\hat{A})$.

Definición: A la unión del espectro puntual y del espectro continuo de un operador lineal \hat{A} (esto es, el conjunto de todos los autovalores de un operador, sean propios o no) se le denomina **espectro del operador**, designándose por $\sigma(\hat{A})$. Los valores del espectro se denominan, genéricamente, **valores espectrales**.

Nótese que podemos definir simultáneamente todos los valores espectrales de un operador lineal \hat{A} de la siguiente manera: un número complejo α pertenece al espectro de \hat{A} si existe al menos un vector normalizado $\vec{u} \in \mathcal{D}(\hat{A})$ para el cual la norma $\|(\hat{A} - \alpha)\vec{u}\|$ es arbitrariamente pequeña. Si además, dicha norma puede hacerse idénticamente cero, α será un autovalor de \hat{A} con autovector \vec{u} .

Sin embargo, muchas veces, y por abuso del lenguaje, llamaremos autovalor a cualquier valor espectral, aunque éste sea un autovalor impropio. Estrictamente, algunos de los resultados anteriores sólo son válidos para operadores hermíticos o unitarios; dado que los operadores de la Mecánica Cuántica son, en su práctica totalidad, de un tipo u otro, no merece la pena incluir más detalles.

Definición: Al igual que un autovalor $a \in \sigma_p(\hat{A})$ tiene asociado un espacio vectorial *propio* formado por todos los autovectores de \hat{A} con dicho autovalor, podemos preguntarnos si existen **autovectores impropios**, esto es, elementos $\vec{\eta}$ tales que $\hat{A}\vec{\eta} = \alpha\vec{\eta}$, con $\alpha \in \sigma_c(\hat{A})$. Naturalmente, estos objetos, de existir, no pueden pertenecer al espacio de Hilbert, ya que entonces estaríamos hablando de autovalores del espectro puntual. La respuesta es afirmativa y, aunque la incorporación de estos objetos a la teoría de espacios de Hilbert no está exenta de problemas, veremos más adelante que pueden tratarse en pie de igualdad con respecto a los autovectores *propios* de un operador. Así, sea el operador lineal \hat{A} y $\alpha \in \sigma_c(\hat{A})$. Un objeto $\vec{\eta}$ no perteneciente al espacio de Hilbert (por ejemplo, una función de norma infinita) es un **autovector impropio** de \hat{A} si se satisface la siguiente igualdad

$$\hat{A}\vec{\eta} = \alpha\vec{\eta}.$$

Nótese que para poder escribir esta igualdad necesitamos extender de alguna manera la actuación del operador sobre elementos no pertenecientes al espacio

de Hilbert. En cualquier caso, en aquellas situaciones de interés físico, esto se podrá hacer sin mayor dificultad.

Ejemplo: Un ejemplo característico es el operador $\hat{P}_x = -i \, d/dx$ cuyo dominio son las funciones continuas y normalizables de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Si planteamos la ecuación de autovalores

$$-i \frac{d}{dx} \eta(x) = a \eta(x)$$

vemos que las únicas posibles soluciones son

$$\eta(x) = A \exp(iax) \quad a \in \mathbb{C},$$

con A una constante multiplicativa arbitraria. Dado que el vector $\eta(x)$ no está normalizado (por lo que no pertenece a $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$), el espectro puntual \hat{P}_x es el conjunto vacío, esto es, $\sigma_p(\hat{P}_x) = \emptyset$. Ahora bien, si a no es real, $\eta(x)$ es una función divergente y resulta imposible construir una sucesión como la que hemos indicado en la definición de un autovalor del continuo. Sin embargo, si a es cualquier número real, el operador $(\hat{P}_x - a)$ aplicado a la sucesión de funciones de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ cuyo término general es

$$\phi_n(x) = \left[\frac{1}{n\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{2n^2}\right) \right] \exp(iax)$$

(es decir, una onda plana e^{iax} modulada por una gaussiana normalizada, de anchura creciente con el valor de n) nos lleva a otra sucesión $(\hat{P}_x - a) \phi_n(x)$ cuyo límite es igual a cero. De esta forma, el espectro continuo de \hat{P}_x es igual al conjunto de todos los números reales, y los autovectores impropios correspondientes son las ondas planas $\eta(x) = A \exp(iax)$. Como ya hemos dicho, estas ondas planas no pertenecen al espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, ya que no son normalizables.

2.13 Espectro de los operadores hermíticos.

En general, los autovalores de un operador lineal son números complejos (no necesariamente reales). Asimismo, sus autovectores no son, en general, ortogonales. Sin embargo, en el caso concreto de los operadores hermíticos es fácil demostrar los siguientes teoremas.

Teorema 1: Dado un espacio de Hilbert \mathcal{H} , el espectro de cualquier operador hermítico \hat{A} es real.

La demostración tiene dos partes. En primer lugar probaremos el carácter real de σ_p y, a continuación generalizaremos el resultado para valores espectrales del continuo.

Así, si $a \in \sigma_p(\hat{A})$ y \vec{u} es uno de sus autovalores, tenemos que

$$(\vec{u}, \hat{A} \vec{u}) = (\vec{u}, a \vec{u}) = a \|\vec{u}\|^2.$$

Por otro lado, puesto que \hat{A} es hermítico

$$(\vec{u}, \hat{A} \vec{u}) = (\hat{A} \vec{u}, \vec{u}) = (a \vec{u}, \vec{u}) = a^* \|\vec{u}\|^2.$$

Pero \vec{u} tiene, por hipótesis, norma no nula. Luego $a = a^*$ y, entonces, a es real.

Sea ahora un autovalor $\alpha \in \sigma_c(\hat{A})$. Por la definición de valor espectral del continuo, existe un vector normalizado \vec{u} tal que $\hat{A} \vec{u} - \alpha \vec{u} = \vec{\mu}$, donde $\vec{\mu}$ es un vector cuya norma es infinitesimal. De esta manera

$$(\vec{u}, \hat{A} \vec{u}) = (\vec{u}, \alpha \vec{u} + \vec{\mu}) = \alpha \|\vec{u}\|^2 + (\vec{u}, \vec{\mu}) = \alpha + (\vec{u}, \vec{\mu})$$

A su vez,

$$\begin{aligned} (\vec{u}, \hat{A} \vec{u}) &= (\hat{A} \vec{u}, \vec{u}) = (\alpha \vec{u} + \vec{\mu}, \vec{u}) = \alpha^* \|\vec{u}\|^2 + (\vec{\mu}, \vec{u}) \\ &= \alpha^* + (\vec{u}, \vec{\mu}) \end{aligned}$$

y, como consecuencia,

$$\alpha^* - \alpha = (\vec{u}, \vec{\mu}) - (\vec{u}, \vec{\mu})^* \Rightarrow -\text{Im} \alpha = \text{Im} (\vec{u}, \vec{\mu}).$$

Teniendo en cuenta que $\vec{\mu}$ puede ser tan pequeño como se quiera, el producto escalar $(\vec{u}, \vec{\mu})$ es también infinitesimal. Ya que α es finito, resulta que la parte imaginaria de α es arbitrariamente pequeña, con lo que podemos concluir que α es real.

Teorema 2: Sea \hat{A} un operador hermítico en un espacio de Hilbert. Entonces, los autovectores asociados a autovalores distintos son ortogonales entre sí.

En efecto, sean \vec{u}_1 y \vec{u}_2 dos autovectores asociados a los autovalores a_1 y a_2 respectivamente. Entonces

$$(\vec{u}_1, \hat{A} \vec{u}_2) = (\vec{u}_1, a_2 \vec{u}_2) = a_2 (\vec{u}_1, \vec{u}_2).$$

Por otra parte, ya que \hat{A} es hermítico y a_1 es real

$$(\vec{u}_1, \hat{A} \vec{u}_2) = (\hat{A} \vec{u}_1, \vec{u}_2) = (a_1 \vec{u}_1, \vec{u}_2) = a_1 (\vec{u}_1, \vec{u}_2).$$

Como consecuencia, $a_2(\vec{u}_1, \vec{u}_2) = a_1(\vec{u}_1, \vec{u}_2)$. Pero, por hipótesis, $a_1 \neq a_2$, y no queda más remedio que $(\vec{u}_1, \vec{u}_2) = 0$.

A su vez, puede demostrarse que $\sigma_p(\hat{A})$ es un subconjunto numerable de \mathbb{R} (esto es, el espectro puntual de un operador hermítico es un conjunto discreto, aunque pueda ser infinito). Sin embargo, nótese que esto no es cierto para operadores no hermíticos. Por ejemplo, existen operadores unitarios cuyo espectro puntual está formado por todos los números complejos de módulo unidad.

Ahora podemos demostrar un teorema recíproco de los teoremas anteriores.

Teorema 3: Sea \hat{A} un operador lineal sobre \mathcal{H} cuyos autovectores constituyen una base de Fourier (u ortonormal) de \mathcal{H} , y cuyos autovalores son todos reales. Entonces \hat{A} es hermítico.

En efecto, llamemos \vec{f}_i al i -ésimo autovector y a_i al autovalor correspondiente. Entonces, las condiciones del teorema se escriben

$$\hat{A}\vec{f}_i = a_i\vec{f}_i \quad \text{con} \quad (\vec{f}_i, \vec{f}_j) = \delta_{ij} \quad \text{y} \quad a_i \text{ real.}$$

Sean ahora dos vectores cualesquiera $\vec{u}, \vec{v} \in \mathcal{H}$. Puesto que los autovectores de \hat{A} constituyen una base de Fourier de \mathcal{H} podemos escribir

$$\vec{u} = \sum_i u_i \vec{f}_i \quad \vec{v} = \sum_j v_j \vec{f}_j.$$

Admitiendo que no existen problemas con los dominios de definición, usando el operador adjunto y escribiendo el producto escalar en términos de las coordenadas en la base de autovectores,

$$\begin{aligned} (\hat{A}\vec{u}, \vec{v}) &= (\vec{u}, \hat{A}^\dagger \vec{v}) = \sum_n (\vec{u}, \vec{f}_n) (\vec{f}_n, \hat{A}^\dagger \vec{v}) = \sum_n (\vec{u}, \vec{f}_n) (\hat{A}\vec{f}_n, \vec{v}) \\ &= \sum_n (\vec{u}, \vec{f}_n) (a_n \vec{f}_n, \vec{v}) = \sum_n (\vec{u}, \vec{f}_n) a_n (\vec{f}_n, \vec{v}) = \sum_n a_n u_n^* v_n, \end{aligned}$$

donde hemos usado el carácter real de a_n . De modo análogo se tendría

$$(\vec{u}, \hat{A}\vec{v}) = \sum_n a_n u_n^* v_n.$$

Por lo tanto, $(\vec{u}, \hat{A}\vec{v}) = (\hat{A}\vec{u}, \vec{v})$, que es precisamente la definición de operador hermítico.

Teorema 4: Dado un espacio de Hilbert \mathcal{H} , si \hat{P} es un proyector, entonces $\sigma_p(\hat{P}) \subseteq \{0, 1\}$. Además, \hat{P} carece de espectro continuo, esto es, $\sigma_c(\hat{P}) = \emptyset$.

Puesto que \hat{P} es hermítico, sabemos que su espectro es real. A su vez, \hat{P} es idempotente, luego si a es un autovalor y \vec{u} uno de sus autovectores

$$(\vec{u}, \hat{P}^2 \vec{u}) = (\vec{u}, \hat{P} \vec{u}) = a \|\vec{u}\|^2.$$

A su vez

$$(\vec{u}, \hat{P}^2 \vec{u}) = (\hat{P} \vec{u}, \hat{P} \vec{u}) = a^2 \|\vec{u}\|^2.$$

Por tanto $a = a^2$. Ya que a es real, la única solución de esa ecuación es que a sea 1 o 0. De hecho, si \mathcal{W} es el subespacio de Hilbert sobre el que proyecta \hat{P} , todos los vectores de \mathcal{W} son autovectores de \hat{P} con autovalor 1, mientras que los vectores del complemento ortogonal \mathcal{W}^\perp son autovectores de \hat{P} con autovalor 0.

De manera similar se puede probar que los valores del espectro continuo podrían ser 0 o 1, pero acabamos de ver que estos dos valores espectrales tienen como autovectores elementos del espacio de Hilbert, luego un proyector no tiene espectro continuo.

Por otro lado, resulta obvio que el único proyector que verifica $\sigma_p = \{1\}$ es el operador identidad, mientras que si $\sigma_p = \{0\}$ el proyector sería el operador nulo.

2.14 Forma espectral de un operador hermítico.

Hemos visto que, en el caso de un operador hermítico, los subespacios propios son ortogonales entre sí. Esto trae como consecuencia inmediata que, si $\sigma_p(\hat{A}) = \{a_1, a_2, \dots\}$ es el espectro puntual de un operador hermítico \hat{A} , se puede construir una base ortonormal formada exclusivamente por autovectores normalizados de \hat{A} . En concreto, consideremos el conjunto de dichos autovectores,

$$\mathcal{C}_{\hat{A}} = \{\vec{u}_{11}, \vec{u}_{12}, \dots, \vec{u}_{1g_1}; \vec{u}_{21}, \vec{u}_{22}, \dots, \vec{u}_{2g_2}; \dots\},$$

donde g_n es la multiplicidad del autovalor a_n . Es obvio que este conjunto $\mathcal{C}_{\hat{A}}$ contiene todos los autovectores de \hat{A} linealmente independientes (aunque, lógicamente, debido a la degeneración, dicho conjunto no es único). Además, si el espectro de \hat{A} es puramente puntual, podemos afirmar algo más:

Teorema: Sea \hat{A} un operador hermítico de un espacio de Hilbert \mathcal{H} . Si el espectro de \hat{A} es enteramente puntual, existe una base de Fourier de \mathcal{H} formada por autovectores de \hat{A} .

Por tanto, dado que los autovectores de un operador hermítico \hat{A} constituyen una base de Fourier, la representación matricial de \hat{A} en dicha base es

$$A_{jk} = (\vec{e}_j, \hat{A}\vec{e}_k) = a_k (\vec{e}_j, \vec{e}_k) = a_k \delta_{jk},$$

con lo que **matriz es diagonal** en esa representación.

Esta es una primera versión (restringida) del **teorema espectral para operadores hermíticos** que será de importancia capital en el formalismo cuántico. Aunque, de nuevo, no incluimos una demostración del mismo es conveniente analizar cuidadosamente sus consecuencias. Son algunas de ellas:

1. Si \mathcal{E}_n es el subespacio de autovectores de \hat{A} con autovalor a_n , \mathcal{H} es suma directa de todos estos subespacios:

$$\mathcal{H} = \mathcal{E}_1 \oplus \mathcal{E}_2 \oplus \mathcal{E}_3 \oplus \dots$$

2. Si \hat{P}_n es el proyector ortogonal sobre \mathcal{E}_n , entonces tenemos la siguiente igualdad (llamada **descomposición espectral de la unidad**):

$$\hat{I} = \hat{P}_1 + \hat{P}_2 + \hat{P}_3 + \dots$$

y, por tanto, cualquier vector \vec{w} del espacio de Hilbert puede escribirse de forma única como

$$\vec{w} = \vec{w}_1 + \vec{w}_2 + \vec{w}_3 + \dots,$$

donde \vec{w}_n es un autovector de \hat{A} con autovalor a_n . Naturalmente los vectores \vec{w}_n son

$$\vec{w}_n = \sum_{j=1}^{g_n} (\vec{u}_{nj}, \vec{w}) \vec{u}_{nj},$$

donde \vec{u}_{nj} es el j -ésimo autovector normalizado de \hat{A} con autovalor a_n y g_n es la multiplicidad de dicho autovalor.

3. Además, haciendo uso de la descomposición espectral de la identidad, tenemos que para cualquier vector \vec{w} se cumple que

$$\hat{A}\vec{w} = \hat{A}(\vec{w}_1 + \vec{w}_2 + \vec{w}_3 + \dots) = a_1\vec{w}_1 + a_2\vec{w}_2 + \dots$$

e introduciendo los proyectores \hat{P}_n tenemos la forma espectral de un operador hermítico \hat{A} :

$$\hat{A} = a_1 \hat{P}_1 + a_2 \hat{P}_2 + a_3 \hat{P}_3 + \dots$$

Así, consideremos una base ortonormal de \mathcal{H} constituida por los autovalores de un operador hermítico \hat{A} . Sea a_n un autovalor de \hat{A} , con degeneración g_n y sean \vec{u}_{ni} ($i = 1, 2, \dots, g_n$) los vectores de la base que pertenecen al subespacio de dimensión g_n asociado a a_n . Entonces, la proyección de cualquier vector $\vec{v} \in \mathcal{H}$ sobre dicho subespacio podrá escribirse como

$$\hat{P}_n \vec{v} = \sum_{i=1}^{g_n} (\vec{u}_{ni}, \vec{v}) \vec{u}_{ni}$$

y, por lo tanto,

$$\hat{A} \vec{v} = \sum_n a_n \hat{P}_n \vec{v} = \sum_n a_n \sum_{i=1}^{g_n} (\vec{u}_{ni}, \vec{v}) \vec{u}_{ni}.$$

Las igualdades, aunque aparezcan sumas infinitas, son estrictas.

4. Sea $h(x)$ una función real de variable real. Si la función h está bien definida para todos los valores espectrales de \hat{A} , entonces es posible definir el operador $h(\hat{A})$ de la siguiente manera

$$h(\hat{A}) = h(a_1) \hat{P}_1 + h(a_2) \hat{P}_2 + h(a_3) \hat{P}_3 + \dots$$

Nota: La pregunta obvia es si podemos generalizar el teorema espectral para operadores hermíticos con espectro continuo. Esto es importante, puesto que gran parte del formalismo cuántico descansa en la idea de que, dado un operador hermítico cualquiera, todo vector se puede escribir como suma de autovectores de ese operador. Aunque ya hemos anticipado que el tratamiento de los valores espectrales del continuo es muy delicado, esta extensión sí es posible. No entraremos en detalle en ese tema, sino que nos limitaremos a esbozar las líneas generales en la próxima sección.

2.15 El problema de los autovalores continuos.

En el apartado anterior hemos supuesto que el espectro de los operadores hermíticos era puramente puntual, aunque ya sabemos que pueden poseer valores espectrales *impropios* pertenecientes al espectro continuo. El suponer que los autovalores y autovectores de un operador hermítico sean discretos no plantea problema conceptual alguno, ni en las propiedades de ortogonalidad ni en la consideración de un espacio de Hilbert escrito como suma directa de una sucesión de subespacios propios. Sin embargo, **muchos de los operadores más importantes de la Mecánica Cuántica poseen una parte continua del espectro, σ_c , y para ellos ya no es válido el teorema espectral en la versión que ya conocemos.**

Son varios los problemas que plantea el espectro continuo de un operador hermítico. En primer lugar, recordemos que **los autovectores asociados no son estrictamente vectores del espacio de Hilbert, puesto que no son normalizables;** y la noción usual de ortonormalidad ya no es aplicable. En segundo lugar, y como su propio nombre indica, **$\sigma_c(\hat{A})$ es continuo y, por lo tanto, no numerable.** De esta forma, si queremos una versión más general del teorema espectral tendríamos que determinar el significado de proyectar sobre un conjunto continuo de vectores y también deberíamos distinguir entre proyectores sobre vectores infinitamente próximos. Estas son algunas de las cuestiones que complican el formalismo de la Mecánica Cuántica.

Podemos ilustrar el problema como sigue. Supongamos que estamos trabajando en el espacio de funciones definidas sobre toda la recta real. En primera aproximación podemos limitarnos al intervalo finito $[-L/2, L/2]$, de manera que nuestras funciones sean idénticamente nulas fuera de dicho intervalo. Una base de Fourier de $\mathcal{L}^2[-L/2, L/2]$ es la formada por las ondas planas $L^{-1/2}\exp(ik_n x)$, donde $k_n = 2\pi n/L$, siendo n un número entero. Así, toda función puede desarrollarse como suma infinita, aunque discreta, de ondas planas. Los términos de la serie serán ortogonales entre sí y la diferencia entre dos k_n sucesivos será $\Delta k = \pi/L$. Parece ahora intuitivo que si hiciéramos tender L a infinito, $\Delta k \rightarrow 0$ y las sumas se convertirían en integrales. Así, cualquier función de cuadrado integrable definida en toda la recta real podría escribirse como una integral sobre ondas planas $\exp(ikx)$, donde k puede tomar un continuo de valores.

Ahora bien, por intuitiva que parezca la idea, tal paso al límite no está exento de problemas. Incluso en el límite $L \rightarrow \infty$, los valores de k no llenarían la recta real, sólo constituirían un conjunto numerable y tal integral no estaría bien definida. Cuando menos, habría que introducir una medida de Lebesgue sobre el conjunto de los posibles k , y definir una

integral de Lebesgue sobre dichas ondas planas.

Hay dos maneras de resolver las dificultades asociadas a esta cuestión. La primera, debida a von Neumann, implica el recurso a la teoría matemática de medidas de Borel-Lebesgue. En esencia, la idea consiste en construir proyectores sobre un subespacio asociado a un subintervalo $[a, b] \subset \sigma_c(\hat{A})$ y construir una descomposición espectral usando estos proyectores. Dicha descomposición espectral no será única, por la libertad que se tiene al dividir el espectro continuo en intervalos disjuntos. No entraremos aquí en detalle, pero en el ejemplo posterior se ve cómo definir tales proyectores.

La otra alternativa es la sugerida en una sección anterior: suponer que sí existen los autovectores del continuo. Esto implica rehacer un poco las cosas. Es necesario aumentar el espacio de Hilbert para incluir estos vectores no normalizables, ampliando en consecuencia la noción de producto escalar y ortogonalidad. Así, si llamábamos a_n a un valor propio, caracterizado por un índice discreto n , simbolizaremos a los autovalores del continuo mediante $a(s)$, donde s es un parámetro continuo. Análogamente, si $\vec{u}_{n,j}$ es un autovector asociado al valor propio a_n , $\vec{u}_j(s)$ es el j -ésimo autovector impropio (no normalizable) asociado a $a(s)$. Podemos así afirmar que:

a) la ecuación de autovalores

$$\hat{A}\vec{u}_j(s) = a(s)\vec{u}_j(s)$$

es válida.

b) los autovectores $\vec{u}_j(s)$, $\vec{u}_{j'}(s')$ asociados a dos autovalores $a(s)$, $a(s')$ son ortonormales en el sentido

$$(\vec{u}_j(s), \vec{u}_{j'}(s')) = \delta(s - s') \delta_{jj'},$$

siendo $\delta(s)$ la delta de Dirac.

c) los autovectores del continuo son ortogonales a los autovectores del espectro puntual:

$$(\vec{u}_{n,j}, \vec{u}_i(s)) = 0.$$

Con esto, la descomposición espectral de la identidad y del operador hermitico \hat{A} puede ampliarse para incluir los autovalores del continuo. Así, un vector $\vec{v} \in \mathcal{H}$ se escribe, en general, como

$$\vec{v} = \sum_n \sum_{j=1}^{g_n} (\vec{u}_{n,j}, \vec{v}) \vec{u}_{n,j} + \int ds \sum_{j=1}^{g(s)} (\vec{u}_j(s), \vec{v}) \vec{u}_j(s),$$

donde la integral está extendida a todos los posibles valores del parámetro s y $g(s)$ es la degeneración del autovalor del continuo $a(s)$. Análogamente,

$$\hat{A}\vec{v} = \sum_n a_n \sum_{j=1}^{g_n} (\vec{u}_{n,j}, \vec{v}) \vec{u}_{n,j} + \int ds a(s) \sum_{j=1}^{g(s)} (\vec{u}_j(s), \vec{v}) \vec{u}_j(s).$$

Recordemos que el proyector sobre el subespacio propio asociado a a_n venía dado por la regla de actuación

$$\hat{P}_n \vec{v} = \sum_{j=1}^{g_n} (\vec{u}_{n,j}, \vec{v}) \vec{u}_{n,j}.$$

De igual forma, podemos definir un *proyector* (aunque no lo sea en sentido estricto, puesto que su resultado es un vector no perteneciente al espacio de Hilbert) sobre el espacio de autovectores impropios asociados a $a(s)$:

$$\hat{P}(s) \vec{v} = \sum_{j=1}^{g(s)} (\vec{u}_j(s), \vec{v}) \vec{u}_j(s).$$

Así, la descomposición espectral de la identidad es

$$\hat{I} = \sum_n \hat{P}_n + \int \hat{P}(s) ds,$$

y la del operador hermítico \hat{A}

$$\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n + \int a(s) \hat{P}(s) ds.$$

Ejercicio: Dada la descomposición espectral de un vector \vec{v} , demuestre que

$$\|\vec{v}\|^2 = \sum_n \sum_{j=1}^{g_n} |(\vec{u}_{n,j}, \vec{v})|^2 + \int ds \sum_{j=1}^{g(s)} |(\vec{u}_j(s), \vec{v})|^2.$$

Ejemplo: Aunque $\hat{P}(s)$ no es un proyector, podemos definir el operador

$$\hat{P}_{[a,b]} = \int_a^b \hat{P}(s) ds,$$

que proyecta sobre el subespacio generado por todos los autovectores impropios asociados a los autovalores del continuo dentro del intervalo

$[a, b] \subset \sigma_c(\hat{A})$. Si suponemos un espectro no degenerado (la generalización al caso degenerado es inmediata) y que $\vec{v} \in \mathcal{H}$:

$$\hat{P}_{[a,b]}\vec{v} = \int_a^b (\vec{u}(s), \vec{v}) \vec{u}(s) ds$$

y, entonces,

$$\|\hat{P}_{[a,b]}\vec{v}\|^2 = \int_a^b |(\vec{u}(s), \vec{v})|^2 ds.$$

Pero como

$$\|\vec{v}\|^2 = \sum_n |(\vec{u}_n, \vec{v})|^2 + \int_a^b |(\vec{u}(s), \vec{v})|^2 ds,$$

tenemos que $\|\hat{P}_{[a,b]}\vec{v}\| \leq \|\vec{v}\|$. Ya que \vec{v} es normalizable, $\hat{P}_{[a,b]}\vec{v}$ tiene norma finita y pertenece al espacio de Hilbert. Por otro lado, para cualquier vector \vec{v}

$$(\vec{v}, \hat{P}_{[a,b]}\vec{v}) = \int_a^b (\vec{u}(s), \vec{v}) (\vec{v}, \vec{u}(s)) ds = \int_a^b |(\vec{u}(s), \vec{v})|^2 ds \in \mathbb{R}$$

y, entonces, $\hat{P}_{[a,b]}$ es hermítico. Por último,

$$\begin{aligned} \hat{P}_{[a,b]}^2 \vec{v} &= \hat{P}_{[a,b]} \int_a^b (\vec{u}(s), \vec{v}) \vec{u}(s) ds = \int_a^b (\vec{u}(s), \vec{v}) \hat{P}_{[a,b]} \vec{u}(s) ds \\ &= \int_a^b \int_a^b (\vec{u}(s), \vec{v}) (\vec{u}(s'), \vec{u}(s)) \vec{u}(s') ds ds' \\ &= \int_a^b \int_a^b (\vec{u}(s), \vec{v}) \delta(s - s') \vec{u}(s') ds ds' \\ &= \int_a^b (\vec{u}(s), \vec{v}) \vec{u}(s) ds = \hat{P}_{[a,b]}\vec{v}, \end{aligned}$$

y queda demostrado que $\hat{P}_{[a,b]}$ es idempotente. Precisamente éstos son los proyectores que mencionamos al hablar del método de von Neumann para tratar los valores espectrales del continuo.

2.16 Conmutadores. Conjunto compatible de operadores.

Definición. Dados dos operadores \hat{A} y \hat{B} (no necesariamente hermíticos) se define el **conmutador** de ambos como

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

Definición. Dos operadores conmutan si su conmutador es nulo, es decir, $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$.

Es fácil demostrar (hágase) que si \hat{A} y \hat{B} son hermíticos y no conmutan, su conmutador $[\hat{A}, \hat{B}]$ no es hermítico. En cambio el operador $i[\hat{A}, \hat{B}]$ sí lo es.

Teorema: Dos operadores hermíticos \hat{A} y \hat{B} conmutan si y sólo si existe una base de Fourier de \mathcal{H} cuyos elementos son simultáneamente autovectores de \hat{A} y de \hat{B} .

Nos limitaremos al caso en que los operadores \hat{A} y \hat{B} tienen espectro puramente puntual. Supongamos que existe una base de Fourier de \mathcal{H} , cada uno de cuyos elementos \vec{f}_i es autovector de \hat{A} y de \hat{B} , con autovalores a_i y b_i respectivamente. Cualquier vector $\vec{v} \in \mathcal{H}$ puede escribirse como $\vec{v} = \sum_i v_i \vec{f}_i$. Entonces

$$\hat{A}\hat{B}\vec{v} = \hat{A}\hat{B}\left(\sum_i v_i \vec{f}_i\right) = \sum_i v_i \hat{A}\hat{B}\vec{f}_i = \sum_i v_i \hat{A}b_i \vec{f}_i = \sum_i v_i a_i b_i \vec{f}_i.$$

Análogamente se tiene $\hat{B}\hat{A}\vec{v} = \sum_i v_i b_i a_i \vec{f}_i$; de donde $\hat{A}\hat{B}\vec{v} = \hat{B}\hat{A}\vec{v}$ para todo $\vec{v} \in \mathcal{H}$.

Supongamos ahora que $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ y sea \vec{u}_i un autovector de \hat{A} con autovalor a_i . Entonces

$$\hat{A}(\hat{B}\vec{u}_i) = \hat{B}(\hat{A}\vec{u}_i) = a_i(\hat{B}\vec{u}_i),$$

de modo que $(\hat{B}\vec{u}_i)$ es también un autovector de \hat{A} con el mismo autovalor a_i . Si a_i no es degenerado es evidente que \vec{u}_i y $(\hat{B}\vec{u}_i)$ deben ser proporcionales; es decir, $\hat{B}\vec{u}_i = b_i \vec{u}_i$, y así \vec{u}_i es también autovector de \hat{B} con autovalor b_i . Si a_i es g_i -degenerado, le corresponderá un subespacio de dimensión g_i . Entonces, al actuar con \hat{B} sobre vectores de este subespacio se obtienen vectores del mismo subespacio. Así pues, habrá g_i autovectores de \hat{B} que constituirán una base ortonormal del mismo. La unión de todas estas bases constituirá una base del espacio total \mathcal{H} .

Teorema: Sean \hat{A} y \hat{B} dos operadores hermíticos y sean

$$\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_{a_n} \quad \hat{B} = \sum_m b_m \hat{P}_{b_m}$$

sus formas espectrales. Entonces \hat{A} y \hat{B} conmutan si y sólo si todo proyector espectral \hat{P}_a de \hat{A} conmuta con todo proyector espectral \hat{P}_b de \hat{B} . (La demostración es sencilla y queda para el alumno).

Debe notarse que el hecho de que haya una base formada por autovectores de \hat{A} y \hat{B} no quiere decir que todo autovector de \hat{A} sea necesariamente autovector de \hat{B} . Lo que sí es cierto es que si definimos \mathcal{E}_{a_n, b_k} como el subespacio formado por los autovectores simultáneos de \hat{A} y \hat{B} , el espacio de Hilbert puede escribirse como suma directa de todos estos subespacios \mathcal{E}_{a_n, b_k} .

Puede ocurrir que cada subespacio \mathcal{E}_{a_n, b_k} tenga dimensión unidad. Esto quiere decir que, salvo constantes multiplicativas, sólo hay un autovector simultáneo de \hat{A} y \hat{B} con autovalores a_n y b_k . Como consecuencia (excepto cambios triviales en el orden y multiplicaciones por constantes de módulo unidad) la base ortonormal de autovectores comunes de \hat{A} y \hat{B} es única, y cada vector de la misma está determinado unívocamente por los autovectores correspondientes a a_n y b_k .

Ahora bien, también puede suceder que haya subespacios \mathcal{E}_{a_n, b_k} con dimensión mayor que uno. Entonces, el par de valores a_n, b_k no basta para caracterizar un vector común de \hat{A} y \hat{B} . Para discriminar una de las posibles bases ortonormales de \mathcal{E}_{a_n, b_k} (y, por consiguiente, de todo \mathcal{H}) necesitaríamos un tercer operador hermítico \hat{C} que conmute tanto con \hat{A} como con \hat{B} . Con este tercer operador podremos construir subespacios $\mathcal{E}_{a_n, b_k, c_j}$ formados por autovectores simultáneos de \hat{A}, \hat{B} y \hat{C} con autovalores a_n, b_k, c_j . Si todos los $\mathcal{E}_{a_n, b_k, c_j}$ tienen dimensión unidad existe una única base ortonormal del Hilbert caracterizada por los autovalores de sus vectores referidos a un conjunto de operadores que conmutan entre sí. Si existe algún $\mathcal{E}_{a_n, b_k, c_j}$ con dimensión mayor que uno, habrá que añadir un cuarto operador, y así sucesivamente. Esta discusión puede resumirse como sigue:

Definición: Un conjunto de operadores $\{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots\}$ es un conjunto compatible si todos ellos conmutan entre sí.

Teorema: Un conjunto de operadores $\{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots\}$ es compatible si y sólo si existe una base de Fourier de \mathcal{H} formada por autovectores de $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$ simultáneamente.

Definición: Un conjunto de operadores compatibles $\{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots\}$ es completo (CCOC) si la base ortonormal formada por autovectores simultáneos de todos los operadores es única. Cada uno de los vectores de dicha base queda unívocamente determinado por el conjunto de los autovalores $\{a, b, c, \dots\}$ que cada uno de los operadores del conjunto asocia a dicho autovector común.

2.17 Producto tensorial de espacios de Hilbert.*

Imaginemos el conjunto formado por los pares ordenados de funciones de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$

$$[\phi(x)] = \begin{pmatrix} \phi_1(x) \\ \phi_2(x) \end{pmatrix},$$

en el que la suma y el producto por un escalar complejo se definen como

$$[\phi(x)] + [\eta(x)] = \begin{pmatrix} \phi_1(x) + \eta_1(x) \\ \phi_2(x) + \eta_2(x) \end{pmatrix}$$

$$\alpha [\phi(x)] = \begin{pmatrix} \alpha \phi_1(x) \\ \alpha \phi_2(x) \end{pmatrix}.$$

En ese conjunto se puede introducir el producto escalar definiéndolo como

$$\begin{aligned} ([\phi(x)], [\eta(x)]) &= \int_{\mathbb{R}} (\phi_1(x)^* \quad \phi_2(x)^*) \begin{pmatrix} \eta_1(x) \\ \eta_2(x) \end{pmatrix} dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} [\phi_1(x)^* \eta_1(x) + \phi_2(x)^* \eta_2(x)] dx. \end{aligned}$$

Puede entonces demostrarse que tenemos una estructura de espacio de Hilbert, llamada *producto tensorial* de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ y \mathbb{C}^2 , simbolizándose esta nueva estructura por $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \otimes \mathbb{C}^2$. Nótese que cualquier elemento de este espacio de Hilbert que acabamos de construir puede escribirse como

$$[\phi(x)] = \phi_1(x) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \phi_2(x) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

esto es, como *suma de productos directos* de una función de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ y de un vector de \mathbb{C}^2 . En este caso existe un cierto paralelismo entre el producto $\phi_1(x) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ y el producto de un vector de \mathbb{C}^2 por un escalar; sin embargo, desde un punto de vista matemático, dicho paralelismo no equivale a una definición de producto directo y es mejor escribir

$$[\phi(x)] = \phi_1(x) \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \phi_2(x) \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Esta es una definición y el producto directo $\phi_1(x) \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ debe entenderse como un objeto matemático en sí mismo. Tras el ejemplo anterior ya es más fácil entender la siguiente definición más general de producto directo.

Definición Sean \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 dos espacios vectoriales. Simbolicemos por $\vec{\phi}^{[1]}$ los vectores de \mathcal{H}_1 y por $\vec{\phi}^{[2]}$ los de \mathcal{H}_2 . El espacio vectorial $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ se denomina **producto directo o tensorial** de \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 si a cada par de vectores $\vec{\phi}^{[1]} \in \mathcal{H}_1$, $\vec{\phi}^{[2]} \in \mathcal{H}_2$ le asociamos un vector $\vec{\phi}^{[1]} \otimes \vec{\phi}^{[2]} \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, asociación con las siguientes propiedades:

(i) es lineal respecto a la multiplicación por un número complejo:

$$\alpha \left(\vec{\phi}^{[1]} \otimes \vec{\phi}^{[2]} \right) = \alpha \vec{\phi}^{[1]} \otimes \vec{\phi}^{[2]} = \vec{\phi}^{[1]} \otimes \alpha \vec{\phi}^{[2]}.$$

(ii) es distributiva respecto a la suma de vectores:

$$\vec{\phi}^{[1]} \otimes \vec{\phi}^{[2]} + \vec{\phi}^{[1]} \otimes \vec{\eta}^{[2]} = \vec{\phi}^{[1]} \otimes \left(\vec{\phi}^{[2]} + \vec{\eta}^{[2]} \right).$$

Al objeto matemático $\vec{\phi}^{[1]} \otimes \vec{\phi}^{[2]}$, perteneciente al espacio vectorial $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, se le denomina *producto tensorial* de $\vec{\phi}^{[1]}$ y $\vec{\phi}^{[2]}$.

Nota: Evidentemente, para asegurarnos de que $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ sea un espacio vectorial hay que definir una suma y un producto por un escalar. Si estas dos operaciones se definen de forma que verifiquen las propiedades (i) e (ii), entonces tendremos la seguridad de que $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ “hereda” la estructura de espacio vectorial de \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 .

Al igual que con dos espacios vectoriales hemos construido un tercero (llamado producto tensorial de los dos primeros), podemos dotar a éste de estructura de espacio de Hilbert si tanto \mathcal{H}_1 como \mathcal{H}_2 son espacios de Hilbert:

Teorema Sean \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 dos espacios de Hilbert y $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ su producto tensorial. Entonces, definiendo el producto escalar en $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ en la forma

$$\left(\vec{\phi}^{[1]} \otimes \vec{\phi}^{[2]}, \vec{\eta}^{[1]} \otimes \vec{\eta}^{[2]} \right) = \left(\vec{\phi}^{[1]}, \vec{\eta}^{[1]} \right) \cdot \left(\vec{\phi}^{[2]}, \vec{\eta}^{[2]} \right),$$

supuesto para el mismo las propiedades de linealidad del producto escalar, entonces $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ es un espacio de Hilbert.

Dos comentarios. En primer lugar seguimos la costumbre de no simbolizar de manera distinta el producto escalar, la suma o el producto por un escalar de cada uno de los distintos espacios; sólo hemos incluido explícitamente el signo “.” para indicar el producto de dos números complejos. En segundo lugar la frase “supuesto

para el mismo las propiedades de linealidad del producto escalar” permite definir el producto escalar de vectores de $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ que no sean productos directos, sino una combinación lineal de éstos.

La construcción de una base ortonormal de $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ es sencilla a partir de sendas bases ortonormales \mathcal{B}_1 y \mathcal{B}_2 de los espacios de Hilbert \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 . En concreto:

Teorema Sean \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 dos espacios de Hilbert, $\mathcal{B}_1 = \{f_1^{[1]}, f_2^{[1]}, \dots\}$ una base ortonormal de \mathcal{H}_1 y $\mathcal{B}_2 = \{f_1^{[2]}, f_2^{[2]}, \dots\}$ una base ortonormal de \mathcal{H}_2 . Entonces

$$\mathcal{B}_{1 \otimes 2} = \{f_j^{[1]} \otimes f_i^{[2]} \quad ; \quad j = 1, 2, \dots \quad i = 1, 2, \dots\}$$

es una base ortonormal de $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$.

Definición Los operadores lineales de \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 de cada uno de los espacios de Hilbert se incorporan directamente a $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. En efecto, sea $\hat{A}^{[1]}$ un operador de \mathcal{H}_1 ; entonces $\hat{A}^{[1]}$ opera sobre los vectores de $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ de la manera siguiente:

$$\hat{A}^{[1]} (\vec{\phi}^{[1]} \otimes \vec{\phi}^{[2]}) = (\hat{A}^{[1]} \vec{\phi}^{[1]}) \otimes \vec{\phi}^{[2]}.$$

Los operadores $\hat{A}^{[2]}$ de \mathcal{H}_2 operan como:

$$\hat{A}^{[2]} (\vec{\phi}^{[1]} \otimes \vec{\phi}^{[2]}) = \vec{\phi}^{[1]} \otimes (\hat{A}^{[2]} \vec{\phi}^{[2]}).$$

Nota: A partir de la definición anterior podemos construir sumas, productos por un escalar y composiciones de operadores de \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 , por ejemplo

$$\begin{aligned} \hat{A}^{[1]} \hat{A}^{[2]} (\vec{\phi}^{[1]} \otimes \vec{\phi}^{[2]}) &= (\hat{A}^{[1]} \vec{\phi}^{[1]}) \otimes (\hat{A}^{[2]} \vec{\phi}^{[2]}) \\ \hat{A}^{[1]} \hat{B}^{[1]} (\vec{\phi}^{[1]} \otimes \vec{\phi}^{[2]}) &= (\hat{A}^{[1]} \hat{B}^{[1]} \vec{\phi}^{[1]}) \otimes \vec{\phi}^{[2]} \\ (\hat{A}^{[1]} + \hat{B}^{[1]}) (\vec{\phi}^{[1]} \otimes \vec{\phi}^{[2]}) &= (\hat{A}^{[1]} \vec{\phi}^{[1]}) \otimes \vec{\phi}^{[2]} + (\hat{B}^{[1]} \vec{\phi}^{[1]}) \otimes \vec{\phi}^{[2]} \\ (\hat{A}^{[1]} + \hat{B}^{[2]}) (\vec{\phi}^{[1]} \otimes \vec{\phi}^{[2]}) &= (\hat{A}^{[1]} \vec{\phi}^{[1]}) \otimes \vec{\phi}^{[2]} + \vec{\phi}^{[1]} \otimes (\hat{B}^{[2]} \vec{\phi}^{[2]}), \end{aligned}$$

etc. (Debe darse cuenta que las igualdades son evidentes).

Ejercicio: Demuestre que:

i) el conmutador $[\hat{A}^{[1]}, \hat{B}^{[2]}] = 0$ para cualesquiera dos operadores $\hat{A}^{[1]}$ y $\hat{B}^{[2]}$.

ii) que, si $\vec{\phi}^{[1]}$ es autovector de $\hat{A}^{[1]}$ con autovalor a , se cumple que

$$\hat{A}^{[1]} (\vec{\phi}^{[1]} \otimes \vec{\phi}^{[2]}) = a (\vec{\phi}^{[1]} \otimes \vec{\phi}^{[2]}),$$

esto es, $\vec{\phi}^{[1]} \otimes \vec{\phi}^{[2]}$ es autovector de $\hat{A}^{[1]}$ con igual autovalor a (pero ahora $\vec{\phi}^{[1]} \otimes \vec{\phi}^{[2]}$ es un vector de $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$). Naturalmente lo mismo ocurre con los operadores del espacio de Hilbert \mathcal{H}_2 .

2.18 La notación de Dirac.

Veamos en primer lugar un concepto importante que nos ayudará a comprender la llamada notación de Dirac. A cada elemento \vec{u} de un espacio de Hilbert \mathcal{H} se le puede asociar una **forma lineal** $L_{\vec{u}} : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ (es decir, una aplicación de \mathcal{H} en \mathbb{C}) definida por

$$L_{\vec{u}}(\vec{v}) = (\vec{u}, \vec{v}) \quad \text{para todo } \vec{v} \in \mathcal{H}. \quad (2.1)$$

En otras palabras, la forma lineal $L_{\vec{u}}$ hace corresponder a cada vector $\vec{v} \in \mathcal{H}$ un escalar complejo, que es precisamente el valor del producto escalar (\vec{u}, \vec{v}) . El conjunto de esas aplicaciones lineales definidas sobre \mathcal{H} , asociadas cada una a un vector $\vec{u} \in \mathcal{H}$, constituyen a su vez un espacio vectorial \mathcal{H}^* que se denomina **espacio dual** de \mathcal{H} .

Dirac llamó vectores **ket** a los elementos de \mathcal{H} , y los representaba en la forma $|v\rangle$, y llamó vectores **bra**, representados como $\langle u|$, a los elementos del espacio dual \mathcal{H}^* .⁵ Es decir, en la notación de Dirac $\vec{v} \equiv |v\rangle$ y $L_{\vec{u}} \equiv \langle u|$. Entonces, la expresión anterior se escribiría en forma estricta

$$L_{\vec{u}}(\vec{v}) \equiv \langle u| (|v\rangle) = (\vec{u}, \vec{v}).$$

Hablamos, pues, del bra $\langle u|$, asociado al ket $|u\rangle$ a través de la forma lineal $L_{\vec{u}}$. Es habitual suprimir el paréntesis central y escribir directamente $\langle u|v\rangle$. Podemos definir entonces el **producto escalar** $\langle u|v\rangle$ de los kets $|u\rangle$ y $|v\rangle$ como la actuación del bra $\langle u|$ sobre el ket $|v\rangle$.

Con esta notación, el desarrollo de un ket de \mathcal{H} como combinación lineal de vectores ket de una base $|e_i\rangle$ es

$$|v\rangle = \sum_i |e_i\rangle \langle e_i|v\rangle,$$

⁵Téngase en cuenta que el término inglés *bracket* significa paréntesis o corchete.

lo que sugiere escribir directamente la *descomposición de la identidad*⁶

$$1 = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i|.$$

El *producto escalar* de dos kets $|u\rangle$ y $|v\rangle$ se escribe

$$\langle u|v\rangle = \sum_i \langle u|e_i\rangle\langle e_i|v\rangle = \sum_i \langle e_i|u\rangle^* \langle e_i|v\rangle.$$

Asimismo, en notación de Dirac el elemento de matriz de un operador es

$$(\vec{u}, \hat{A}\vec{v}) \equiv \langle u|\hat{A}|v\rangle,$$

y para el operador adjunto

$$\langle u|\hat{A}|v\rangle = \langle v|\hat{A}^\dagger|u\rangle^*.$$

Por otro lado, por definición de adjunto,

$$\langle u|\hat{A}|v\rangle = (\vec{u}, \hat{A}\vec{v}) = (\hat{A}^\dagger\vec{u}, \vec{v}).$$

Así, en el elemento de matriz $\langle u|\hat{A}|v\rangle$, al igual que se lee que \hat{A} actúa sobre $|v\rangle$ para dar el nuevo ket $\hat{A}|v\rangle$, puede también interpretarse que \hat{A} actúa sobre el bra $\langle u|$ para dar el bra asociado al ket $\hat{A}^\dagger|u\rangle$. A efectos prácticos, supongamos que $|a\rangle$ es un autovector de \hat{A} con autovalor (no necesariamente real) a . Así, para cualquier $\vec{u} \in \mathcal{H}$ se cumple que

$$\langle u|\hat{A}|a\rangle = (\vec{u}, \hat{A}\vec{a}) = a(\vec{u}, \vec{a}) \Rightarrow \hat{A}|a\rangle = a|a\rangle,$$

mientras que

$$\langle a|\hat{A}|u\rangle = (\hat{A}^\dagger\vec{a}, \vec{u}) = (a^*\vec{a}, \vec{u}) = a(\vec{a}, \vec{u}) \Rightarrow \langle a|\hat{A} = a\langle a|.$$

Análogamente

$$\begin{aligned}\hat{A}^\dagger|a\rangle &= a^*|a\rangle \\ \langle a|\hat{A}^\dagger &= a^*\langle a|.\end{aligned}$$

Nótese que usando la descomposición de la identidad se llega a la conocida expresión

$$\langle u|\hat{A}|v\rangle = \langle u|\hat{I}\hat{A}\hat{I}|v\rangle = \sum_{i,k} \langle u|e_i\rangle\langle e_i|\hat{A}|e_k\rangle\langle e_k|v\rangle = \sum_{i,k} u_i^* A_{ik} v_k$$

⁶Véase el apartado 2.8 para recordar el uso de escalares como operadores.

para los elementos de matriz de un operador \hat{A} .

Como ya hemos comentado, en Mecánica Cuántica serán particularmente importantes las bases ortonormales constituidas por autovectores de un operador hermítico. Dichos vectores quedan unívocamente determinados por el autovalor a_n y un índice adicional que da cuenta de la posible degeneración. Así, la forma usual de escribir la ecuación de autovalores en notación de Dirac es

$$\hat{A}|a_n, i\rangle = a_n|a_n, i\rangle.$$

Con esta notación, la descomposición de un vector cualquiera $|v\rangle$ en dicha base es

$$|v\rangle = \sum_{n,i} \langle a_n, i|v\rangle |a_n, i\rangle = \sum_{n,i} |a_n, i\rangle \langle a_n, i|v\rangle,$$

que se traduce en la relación entre proyectores

$$\hat{1} = \sum_n \sum_i |a_n, i\rangle \langle a_n, i| = \sum_n \hat{P}_n,$$

siendo $\hat{P}_n = \sum_i |a_n, i\rangle \langle a_n, i|$ el proyector espectral sobre el subespacio asociado a a_n .

Análogamente

$$\hat{A}|v\rangle = \sum_n a_n \sum_i |a_n, i\rangle \langle a_n, i|v\rangle,$$

de modo que la forma espectral de \hat{A} se escribe ahora

$$\hat{A} = \sum_n a_n \sum_i |a_n, i\rangle \langle a_n, i|.$$

Una vez más, nos hemos restringido al caso de que el operador que estamos tratando tenga un espectro puramente puntual.

2.19 Apéndice: La delta de Dirac.

La denominada “función” **delta de Dirac** $\delta(x)$ fue introducida por Dirac para resolver los problemas que planteaba en la Mecánica Cuántica la aparición de funciones que no eran normalizables. Inicialmente este artificio matemático tenía una justificación dudosa, pero años más tarde el matemático francés

Laurent Schwartz lo justificó rigurosamente con el desarrollo de la llamada *teoría de distribuciones*, de las que la delta de Dirac es un ejemplo.⁷

En realidad, la delta de Dirac no es una función en sentido ordinario ya que no tiene un valor perfectamente definido en todos los puntos. Sin embargo, las integrales en cuyo integrando aparece la función $\delta(x)$ sí están perfectamente definidas. En este sentido, la propiedad más importante (que prácticamente podríamos considerar una definición) es que, para cualquier función continua $f(x)$, se tiene

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x) dx = f(0) \quad \text{y} \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x-a) dx = f(a). \quad (2.2)$$

A partir de esta definición es fácil demostrar (hágase) las **propiedades**

$$\delta(x) = \delta(-x) \quad \delta(kx) = \frac{1}{k} \delta(x), \quad k \in \mathbb{R}$$

Aunque $\delta(x)$ no sea propiamente una función, puede representarse como el límite de una sucesión infinita de funciones. Consideremos, por ejemplo, una función $g_a(x)$ definida de la forma

$$g_a(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| \geq a/2 \\ 1/a & \text{si } |x| < a/2 \end{cases} \quad (2.3)$$

Esta función es simplemente un rectángulo de base a y altura $1/a$ simétrico respecto al origen. Evidentemente su área es la unidad

$$\int_{-\infty}^{\infty} g_a(x) dx = \int_{-a/2}^{a/2} (1/a) dx = 1.$$

Por otra parte, dada una función $f(x)$ continua, se cumple que

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) g_a(x) dx = \frac{1}{a} \int_{-a/2}^{a/2} f(x) dx = \frac{1}{a} a f(\eta), \quad \text{con } \eta \in [-a/2, a/2],$$

donde el último paso se sigue del teorema del valor medio para funciones continuas. Entonces, cuando $a \rightarrow 0$

$$\lim_{a \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) g_a(x) dx = f(0).$$

⁷Véase el libro de Schwartz en la bibliografía.

De este modo podemos decir que $\delta(x)$ es el límite de la función $g_a(x)$ definida en (2.3) cuando $a \rightarrow 0$. Es decir, podemos representar la delta de Dirac como el límite de un rectángulo cuya base tiende a cero, pero cuya área total se conserva.

Análogamente puede demostrarse que la función definida en la forma

$$q_n(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-n}^n e^{ixy} dy$$

satisface en el límite $n \rightarrow \infty$ las propiedades que se exigen a la delta de Dirac. Puede escribirse entonces

$$\delta(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} q_n(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixy} dy.$$

Otras expresiones útiles para $\delta(x)$ son

$$\delta(x) = \lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{1}{(2\pi)^{1/2}\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right),$$

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{\pi} \frac{\sin^2 ax}{ax^2} \right),$$

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow \infty} \left(\frac{\sin ax}{\pi x} \right)$$

y

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{\pi} \frac{a}{a^2 x^2 + 1} \right) = \lim_{r \rightarrow 0} \left(\frac{1}{\pi} \frac{r}{x^2 + r^2} \right).$$

2.20 Apéndice: La transformada de Fourier

Dada una función $f(x) \in \mathcal{L}(\mathbb{R})$, donde $\mathcal{L}(\mathbb{R})$ designa a las funciones complejas de variable real cuyo módulo es integrable (funciones absolutamente integrables), siempre podemos construir la función

$$\tilde{g}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f(x) \exp(-ikx) dx. \quad (2.4)$$

Entonces $f(x)$ puede escribirse en la forma

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{g}(k) \exp(ikx) dk \quad (2.5)$$

La función $\tilde{g}(k)$ se denomina *transformada de Fourier* de $f(x)$, y se suele representar por $\tilde{g}(k) \equiv \mathcal{F}\{f(x)\}$.

A pesar de la aparente similitud de las expresiones (2.4) y (2.5), hay diferencias esenciales entre ambas:

- la primera ecuación es, simplemente, la definición de $\tilde{g}(k)$; está perfectamente definida para cualquier valor de k puesto que la función $f(x)$ es, por hipótesis, integrable (no obstante, $\tilde{g}(k)$ ni siquiera tiene por qué pertenecer a $\mathcal{L}(\mathbb{R})$).
- por el contrario, la expresión (2.5) debe entenderse en el sentido de que la integral del segundo miembro converge a $f(x)$ para casi todos los puntos, salvo en un conjunto de medida nula.

De una forma intuitiva, aunque no muy rigurosa, la transformada de Fourier puede entenderse como un paso al límite del desarrollo en serie de Fourier. Es sabido que una función $f(x)$, definida en un intervalo finito $[-L/2, L/2]$, puede desarrollarse en serie de funciones trigonométricas discretas $\{\cos(\frac{n\pi x}{L}), \sin(\frac{n\pi x}{L})\}$. Bajo ciertas condiciones muy generales, el desarrollo converge a la función $f(x)$, para casi todos los puntos del intervalo. Cuando $L \rightarrow \infty$ la suma de la serie se transforma en la denominada integral de Fourier. La transformada de Fourier es una forma compleja de la integral de Fourier, y puede interpretarse en cierto modo como el desarrollo de una función como una combinación lineal infinita de ondas planas de la forma $\exp(ikx)$.

- Cuando la función $f(x)$ no sólo es integrable sino que es de cuadrado integrable, es decir $f(x) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, puede demostrarse además el siguiente resultado (teorema de Plancherel)

$$\int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}} |\tilde{g}(k)|^2 dk. \quad (2.6)$$

Este resultado es especialmente importante para la Mecánica Cuántica pues sabemos que el espacio de Hilbert apropiado en muchas situaciones es precisamente $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ y, así, el operador $\hat{\mathcal{F}}$ definido en la forma

$$\hat{\mathcal{F}}\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\phi}(k) \exp(-ikx) dk$$

es un operador unitario. (Véase uno de los problemas de este capítulo).

- Algunas **propiedades importantes de la transformada de Fourier** son:

1. Si $f' \in \mathcal{L}(\mathbb{R})$, entonces $\mathcal{F}\{df(x)/dx\} = ik\mathcal{F}\{f(x)\}$

En efecto, integrando por partes, tenemos

$$\begin{aligned}\mathcal{F}\left\{\frac{df(x)}{dx}\right\} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{df(x)}{dx} e^{-ikx} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{ f(x)e^{-ikx} \right\}_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} f(x)(ik)e^{-ikx} dx \\ &= (ik)\mathcal{F}\{f(x)\}.\end{aligned}$$

Si la función $f(x)$ y sus $n-1$ primeras derivadas son continuas y $f, f', \dots, f^{(n)} \in \mathcal{L}(\mathbb{R})$, el resultado anterior puede generalizarse en la forma

$$\mathcal{F}\left\{\frac{d^n f(x)}{dx^n}\right\} = (ik)^n \mathcal{F}\left\{\frac{d^{n-1} f(x)}{dx^{n-1}}\right\} = (ik)^n \mathcal{F}\{f(x)\}.$$

2. Si tanto $f(x)$ como $xf(x)$ pertenecen al espacio $\mathcal{L}(\mathbb{R})$, entonces se cumple que $\mathcal{F}\{-ixf(x)\} = d\tilde{g}(k)/dk = d\mathcal{F}\{f(x)\}/dk$.

En efecto

$$\begin{aligned}\mathcal{F}\{-ixf(x)\} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} -ixf(x) \exp(-ikx) dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dk} [f(x) \exp(ikx)] dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{d}{dk} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp(ikx) dk = \frac{d}{dk} \mathcal{F}\{f(x)\}.\end{aligned}$$

De forma análoga a la propiedad anterior, si $xf(x), x^2f(x), \dots, x^p f(x) \in \mathcal{L}(\mathbb{R})$, el resultado se generaliza a

$$\mathcal{F}\{(-ix)^n f(x)\} = \frac{d^n}{dk^n} \mathcal{F}\{f(x)\} \quad (n = 0, 1, 2, \dots, p).$$

3. Dadas dos funciones $g(x), h(x) \in \mathcal{L}(\mathbb{R})$ se denomina *producto de convolución* ($g * h$) a la función

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(s) h(x-s) ds \equiv g * h(x).$$

Entonces se cumple que

$$\mathcal{F}\{g * h\} = \mathcal{F}\{g\} \cdot \mathcal{F}\{h\},$$

es decir, la transformada de Fourier de un producto de convolución de dos funciones es el producto ordinario de las transformadas de Fourier de las dos funciones.

Demostración:

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{-ikx} dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} g(s)h(x-s)ds \right\} e^{-ikx} dx \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} g(s) \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} h(x-s)e^{-ikx} dx \right\} ds \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} g(s) \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} h(t)e^{-ikt}e^{-iks}dt \right\} ds \\
 &= \left(\int_{-\infty}^{+\infty} h(t)e^{-ikt}dt \right) \cdot \left(\int_{-\infty}^{+\infty} g(s)e^{-iks}ds \right)
 \end{aligned}$$

• Veamos, por último, algunos **casos especiales de transformadas de Fourier**.

1. Si hacemos la transformada de Fourier de la unidad tenemos

$$\mathcal{F}\{1\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} dx = \sqrt{2\pi}\delta(k).$$

Por tanto, la transformada de Fourier de una constante es proporcional a una delta de Dirac centrada en el origen. Este resultado se puede extender a una onda plana compleja cualquiera,

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F}\{e^{ik'x}\} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik'x} e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(k-k')x} dx \\
 &= \sqrt{2\pi}\delta(k-k').
 \end{aligned}$$

2. De igual manera, si queremos transformar una delta de Dirac

$$\mathcal{F}\{\delta(x-x')\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-x')e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx'}$$

y si $x' = 0$, entonces $\mathcal{F}\{\delta(x)\} = 1/\sqrt{2\pi}$. Por tanto, la transformada de Fourier de una delta de Dirac es una onda plana.

3. La transformada de una gaussiana es

$$\mathcal{F}\left\{e^{-x^2/a^2}\right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/a^2} e^{-ikx} dx = \frac{a}{\sqrt{2}} e^{-\frac{a^2 k^2}{4}}.$$

Es decir, la transformada de Fourier de una gaussiana de anchura a es una gaussiana de anchura $2/a$.

Estos ejemplos muestran que cuanto más localizada está una función $f(x)$, menos localizada está su transformada $\tilde{g}(k)$.

2.21 Problemas resueltos.

Problema 2.1 .- Demostrar la desigualdad de Schwarz:

$$|(\vec{u}, \vec{v})| \leq \|\vec{u}\| \cdot \|\vec{v}\|.$$

Construyamos el vector $\vec{w} = \vec{u} + \lambda \vec{v}$, donde λ es un escalar complejo. Entonces

$$\begin{aligned} (\vec{w}, \vec{w}) &= (\vec{u} + \lambda \vec{v}, \vec{u} + \lambda \vec{v}) \\ &= (\vec{u}, \vec{u}) + \lambda (\vec{u}, \vec{v}) + \lambda^* (\vec{u}, \vec{v})^* + \lambda \lambda^* (\vec{v}, \vec{v}) \geq 0 \quad \forall \lambda. \end{aligned}$$

Tomemos ahora $\lambda = -(\vec{u}, \vec{v})^* / (\vec{v}, \vec{v})$. Sustituyendo este valor en la desigualdad anterior, tenemos

$$\begin{aligned} (\vec{w}, \vec{w}) &= (\vec{u}, \vec{u}) - \frac{(\vec{u}, \vec{v}) (\vec{u}, \vec{v})^*}{(\vec{v}, \vec{v})} - \frac{(\vec{u}, \vec{v}) (\vec{u}, \vec{v})^*}{(\vec{v}, \vec{v})} + \frac{(\vec{u}, \vec{v}) (\vec{u}, \vec{v})^*}{(\vec{v}, \vec{v})} \\ &= (\vec{u}, \vec{u}) - \frac{(\vec{u}, \vec{v}) (\vec{u}, \vec{v})^*}{(\vec{v}, \vec{v})} \geq 0 \end{aligned}$$

y, multiplicando por (\vec{v}, \vec{v}) (siempre que $\vec{v} \neq \vec{0}$),

$$(\vec{u}, \vec{u}) (\vec{v}, \vec{v}) \geq (\vec{u}, \vec{v}) (\vec{u}, \vec{v})^* \Rightarrow \|\vec{u}\|^2 \cdot \|\vec{v}\|^2 \geq |(\vec{u}, \vec{v})|^2,$$

que es esencialmente la expresión que queríamos demostrar. (Nótese que para $\vec{v} = \vec{0}$ la relación de Schwarz se reduce a la igualdad trivial $0 = 0$).

Problema 2.2 .- Demostrar la relación $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$.

Por definición

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

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

y, sumando y restando $\widehat{A}\widehat{C}\widehat{B}$, resulta

$$[\widehat{A}\widehat{B}, \widehat{C}] \equiv \widehat{A}\widehat{B}\widehat{C} - \widehat{A}\widehat{C}\widehat{B} + \widehat{A}\widehat{C}\widehat{B} - \widehat{C}\widehat{A}\widehat{B} = \widehat{A}[\widehat{B}, \widehat{C}] + [\widehat{A}, \widehat{C}]\widehat{B}.$$

De modo análogo se puede demostrar $[\widehat{A}, \widehat{B}\widehat{C}] = [\widehat{A}, \widehat{B}]\widehat{C} + \widehat{B}[\widehat{A}, \widehat{C}]$.

Problema 2.3 .- Demostrar que, dado un conjunto cualquiera de operadores lineales $\widehat{A}_i, \widehat{B}_k$, sus conmutadores satisfacen la propiedad distributiva; es decir:

$$\left[\sum_i \widehat{A}_i, \sum_k \widehat{B}_k \right] = \sum_{i,k} [\widehat{A}_i, \widehat{B}_k].$$

La demostración es inmediata aplicando la propiedad distributiva de los propios operadores lineales

$$\begin{aligned} \left[\sum_i \widehat{A}_i, \sum_k \widehat{B}_k \right] &= \left(\sum_i \widehat{A}_i \right) \left(\sum_k \widehat{B}_k \right) - \left(\sum_k \widehat{B}_k \right) \left(\sum_i \widehat{A}_i \right) \\ &= \sum_{i,k} \widehat{A}_i \widehat{B}_k - \sum_{i,k} \widehat{B}_k \widehat{A}_i = \sum_{i,k} (\widehat{A}_i \widehat{B}_k - \widehat{B}_k \widehat{A}_i) \\ &= \sum_{i,k} [\widehat{A}_i, \widehat{B}_k]. \end{aligned}$$

Problema 2.4 .- Sean \widehat{A} y \widehat{B} dos operadores lineales. Demostrar que, en general, $e^{\widehat{A}}e^{\widehat{B}} \neq e^{\widehat{A}+\widehat{B}}$. ¿Cuándo será cierta la igualdad?

Formalmente

$$e^{\widehat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \widehat{A}^n,$$

donde $\widehat{A}^0 = 1$. Así

$$e^{\widehat{A}}e^{\widehat{B}} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{1}{m!} \widehat{A}^n \widehat{B}^m.$$

Haciendo un cambio en los índices

$$e^{\widehat{A}}e^{\widehat{B}} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{m=0}^N \frac{1}{(N-m)!} \frac{1}{m!} \widehat{A}^{N-m} \widehat{B}^m = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{m=0}^N \binom{N}{m} \widehat{A}^{N-m} \widehat{B}^m,$$

$$\binom{n}{m} = \frac{n(n-1)(n-2)\dots(n-m+1)}{m!}$$

donde aparece explícitamente la fórmula del binomio de Newton. Por otro lado

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} (\hat{A} + \hat{B})^N.$$

Sin embargo, en general \hat{A} y \hat{B} no conmutan, por lo que por ejemplo

$$(\hat{A} + \hat{B})^3 = \hat{A}^3 + \hat{A}^2\hat{B} + \hat{A}\hat{B}\hat{A} + \hat{B}\hat{A}^2 + \hat{B}^2\hat{A} + \hat{B}\hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{B}^2 + \hat{B}^3,$$

que no es igual a

$$\hat{A}^3 + 3\hat{A}^2\hat{B} + 3\hat{A}\hat{B}^2 + \hat{B}^3.$$

En consecuencia, $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$ será igual a $e^{\hat{A}+\hat{B}}$ si $(\hat{A} + \hat{B})^N$ se puede desarrollar usando la expresión general del binomio de Newton, lo cual es sólo posible si \hat{A} y \hat{B} conmutan (ya que entonces podemos reordenar los términos que aparecen en la expansión directa de $(\hat{A} + \hat{B})^N$).

Problema 2.5 .- Dado un operador $\hat{A}(\lambda)$ que depende de un parámetro λ , se define la derivada con respecto al parámetro en la forma

$$\frac{d\hat{A}(\lambda)}{d\lambda} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\hat{A}(\lambda + \varepsilon) - \hat{A}(\lambda)}{\varepsilon}.$$

Demostrar entonces las dos relaciones

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda} (\hat{A}\hat{B}) &= \frac{d\hat{A}}{d\lambda} \hat{B} + \hat{A} \frac{d\hat{B}}{d\lambda} \\ \frac{d}{d\lambda} (\hat{A}^{-1}) &= -\hat{A}^{-1} \frac{d\hat{A}}{d\lambda} \hat{A}^{-1}. \end{aligned}$$

Para demostrar la primera relación partimos de

$$\begin{aligned} & \frac{\hat{A}(\lambda + \varepsilon)\hat{B}(\lambda + \varepsilon) - \hat{A}(\lambda)\hat{B}(\lambda)}{\varepsilon} = \\ &= \frac{\hat{A}(\lambda + \varepsilon)\hat{B}(\lambda + \varepsilon) - \hat{A}(\lambda + \varepsilon)\hat{B}(\lambda) + \hat{A}(\lambda + \varepsilon)\hat{B}(\lambda) - \hat{A}(\lambda)\hat{B}(\lambda)}{\varepsilon} \\ &= \frac{\hat{A}(\lambda + \varepsilon) [\hat{B}(\lambda + \varepsilon) - \hat{B}(\lambda)]}{\varepsilon} + \frac{[\hat{A}(\lambda + \varepsilon) - \hat{A}(\lambda)] \hat{B}(\lambda)}{\varepsilon} \end{aligned}$$

y tomando el límite $\varepsilon \rightarrow 0$ obtenemos la relación pedida.

Para la segunda relación, consideremos ahora la identidad $\hat{A}(\lambda)\hat{A}^{-1}(\lambda) = \hat{I}$ y apliquemos la fórmula anterior. Puesto que el operador identidad no depende evidentemente de ningún parámetro, resulta

$$\frac{d}{d\lambda} (\hat{A}(\lambda)\hat{A}^{-1}(\lambda)) = \frac{d\hat{A}(\lambda)}{d\lambda} \hat{A}^{-1}(\lambda) + \hat{A}(\lambda) \frac{d\hat{A}^{-1}(\lambda)}{d\lambda} = 0,$$

de donde, actuando por la izquierda con \hat{A}^{-1} ,

$$\frac{d\hat{A}^{-1}(\lambda)}{d\lambda} = -\hat{A}^{-1}(\lambda) \frac{d\hat{A}(\lambda)}{d\lambda} \hat{A}^{-1}(\lambda).$$

Nótese que no podemos escribir el resultado en la forma

$$-\left[\hat{A}^{-1}(\lambda)\right]^2 \left(d\hat{A}(\lambda)/d\lambda\right)$$

pues, en general, no está garantizado que $\hat{A}(\lambda)$ conmute con $(d\hat{A}(\lambda)/d\lambda)$.⁸

Problema 2.6 .- Calcular las derivadas con respecto a λ de los operadores $e^{\lambda\hat{A}}$ y $e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}}$.

El operador $e^{\lambda\hat{A}}$ se puede desarrollar formalmente en serie de potencias como

$$\exp(\lambda\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n \hat{A}^n}{n!}$$

y, derivando término a término, tenemos

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda} \exp(\lambda\hat{A}) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n\lambda^{n-1} \hat{A}^n}{n!} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^{n-1} \hat{A}^{n-1}}{(n-1)!} \hat{A} = \hat{A} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n \hat{A}^n}{n!} \right) \\ &= \hat{A} \exp(\lambda\hat{A}). \end{aligned}$$

Aplicando ahora la regla de la derivada del producto, que hemos visto en el problema anterior,

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda} (\exp(\lambda\hat{A}) \exp(\lambda\hat{B})) &= \frac{d(e^{\lambda\hat{A}})}{d\lambda} \exp(\lambda\hat{B}) + \exp(\lambda\hat{A}) \frac{d(e^{\lambda\hat{B}})}{d\lambda} \\ &= \hat{A} \exp(\lambda\hat{A}) e^{\lambda\hat{B}} + \exp(\lambda\hat{A}) \hat{B} e^{\lambda\hat{B}} \\ &= \exp(\lambda\hat{A}) \cdot (\hat{A} + \hat{B}) \cdot \exp(\lambda\hat{B}). \end{aligned}$$

⁸ Pensemos por ejemplo, en un operador de la forma $\hat{A}(\lambda) = \hat{B} + \lambda^2 \hat{C}$, con $[\hat{B}, \hat{C}] \neq 0$. Entonces $d\hat{A}(\lambda)/d\lambda = 2\lambda\hat{C}$, que evidentemente no conmuta con \hat{A} , pues hemos dicho que \hat{C} no conmuta con \hat{B} .

En el último paso, para obtener una expresión en forma más compacta, hemos tenido en cuenta que \hat{A} conmuta con $\exp(\lambda\hat{A})$ y \hat{B} conmuta con $\exp(\lambda\hat{B})$. Sin embargo, hemos de tener siempre en cuenta que, en general, \hat{A} no conmutará con \hat{B} ni con $\exp(\lambda\hat{B})$.

Problema 2.7 .- Suponiendo que \hat{A}^{-1} existe, encontrar una expresión en serie de potencias de λ para el operador $(\hat{A} - \lambda\hat{B})^{-1}$.

Escribamos

$$(\hat{A} - \lambda\hat{B})^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \hat{C}_n,$$

donde \hat{C}_n son operadores a determinar. Para ello, multiplicamos a la izquierda por $(\hat{A} - \lambda\hat{B})$, de modo que

$$\hat{I} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n (\hat{A} - \lambda\hat{B}) \hat{C}_n = \hat{A}\hat{C}_0 + \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n (\hat{A}\hat{C}_n - \hat{B}\hat{C}_{n-1}).$$

Igualando ahora los coeficientes de las sucesivas potencias de λ obtenemos

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{C}_0 &= \hat{I} \Rightarrow \hat{C}_0 = \hat{A}^{-1} \\ \hat{A}\hat{C}_n - \hat{B}\hat{C}_{n-1} &= 0 \Rightarrow \hat{C}_n = \hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{C}_{n-1}, \end{aligned}$$

de modo que

$$\begin{aligned} (\hat{A} - \lambda\hat{B})^{-1} &= \hat{A}^{-1} + \lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1} + \lambda^2(\hat{A}^{-1}\hat{B})(\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}) \\ &\quad + \lambda^3(\hat{A}^{-1}\hat{B})(\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}) + \dots \end{aligned}$$

Es importante tener en cuenta el orden en el que aparecen los operadores \hat{A}^{-1} y \hat{B} en cada término del desarrollo, pues en general \hat{A}^{-1} y \hat{B} no conmutan. En el caso particular en que $[\hat{A}^{-1}, \hat{B}] = 0$ podemos reordenar los operadores y entonces

$$(\hat{A} - \lambda\hat{B})^{-1} = \hat{A}^{-1} + \lambda\hat{B}\hat{A}^{-2} + \lambda^2\hat{B}^2\hat{A}^{-3} + \lambda^3\hat{B}^3\hat{A}^{-4} + \dots$$

Problema 2.8 .- Sean A_{ij} los coeficientes de la representación matricial de un operador \hat{A} .

- a) Demostrar que si \hat{A} es hermítico, entonces $A_{ij} = A_{ji}^*$.
 b) Demostrar que para un operador unitario \hat{U} se tiene $\sum_l |U_{li}|^2 = 1$ para todo i .

a) Para un operador cualquiera, y una base $\{\vec{e}_i\}$, se tiene

$$A_{ij} = (\vec{e}_i, \hat{A}\vec{e}_j) = (\hat{A}^\dagger \vec{e}_i, \vec{e}_j) = (\vec{e}_j, \hat{A}^\dagger \vec{e}_i)^* = (\hat{A}^\dagger)_{ji}^*.$$

Si \hat{A} es hermítico $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ y así $A_{ij} = A_{ji}^*$. Esta condición es precisamente la que define a una matriz hermítica.

b) Puesto que $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{I}$ se tiene

$$\begin{aligned} \sum_l |U_{li}|^2 &= \sum_l (\vec{e}_l, \hat{U}\vec{e}_i)^* (\vec{e}_l, \hat{U}\vec{e}_i) = \sum_l (\hat{U}\vec{e}_i, \vec{e}_l) (\vec{e}_l, \hat{U}\vec{e}_i) \\ &= (\hat{U}\vec{e}_i, \hat{U}\vec{e}_i) = (\vec{e}_i, \hat{U}^\dagger \hat{U}\vec{e}_i) = 1. \end{aligned}$$

De esta manera, la suma de los cuadrados de los elementos de una fila de la representación matricial de un operador unitario es la unidad.

Problema 2.9 .- Demuéstrese que si \hat{A} es hermítico, entonces el operador $e^{i\hat{A}}$ es unitario.

En primer lugar tengamos en cuenta que

$$e^{i\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} \hat{A}^n.$$

Así,

$$(e^{i\hat{A}})^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} (\hat{A}^n)^\dagger.$$

Pero como \hat{A} es hermítico, \hat{A}^n también lo es. Por tanto

$$(e^{i\hat{A}})^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \hat{A}^n = e^{-i\hat{A}}.$$

Ahora necesitamos evaluar $e^{i\hat{A}}e^{-i\hat{A}}$. Evidentemente $i\hat{A}$ y $-i\hat{A}$ conmutan. Usando el resultado derivado en un problema anterior

$$\begin{aligned} e^{i\hat{A}}e^{-i\hat{A}} &= e^{i\hat{A}-i\hat{A}} = e^0 = 1 \\ e^{-i\hat{A}}e^{i\hat{A}} &= e^{-i\hat{A}+i\hat{A}} = e^0 = 1 \end{aligned}$$

y, como consecuencia, $e^{i\hat{A}}$ es unitario.

Problema 2.10 . Sea el conjunto de vectores $\{\vec{e}_i\}_{i=1}^{\infty}$ una base ortonormal de un espacio de Hilbert \mathcal{H} y sea $\{\vec{f}_i\}_{i=1}^{\infty}$ el transformado del conjunto anterior mediante un operador \hat{U} , es decir $\vec{f}_i = \hat{U}\vec{e}_i$. Demostrar que la condición necesaria y suficiente para que $\{\vec{f}_i\}_{i=1}^{\infty}$ sea también una base ortonormal de \mathcal{U} es que el operador \hat{U} sea unitario.

Supongamos inicialmente que \hat{U} es unitario. Entonces

$$(\vec{f}_i, \vec{f}_j) = (\hat{U}\vec{e}_i, \hat{U}\vec{e}_j) = (\vec{e}_i, \hat{U}^\dagger \hat{U}\vec{e}_j) = (\vec{e}_i, \vec{e}_j) = \delta_{ij},$$

de modo que el conjunto $\{\vec{f}_i\}_{i=1}^{\infty}$ es ortonormal. Veamos ahora que es una base de Fourier. Para ello consideremos un vector cualquiera $\vec{v} \in \mathcal{H}$; entonces $\hat{U}^\dagger \vec{v} \in \mathcal{H}$ y podemos desarrollarlo en la base $\{\vec{e}_i\}_{i=1}^{\infty}$ de la forma

$$\hat{U}^\dagger \vec{v} = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \vec{e}_i.$$

Aplicando ahora \hat{U} a esta ecuación, resulta

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger \vec{v} = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \hat{U}\vec{e}_i \Rightarrow \vec{v} = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \vec{f}_i$$

ya que, por hipótesis, \hat{U} era unitario. Por consiguiente, cualquier vector $\vec{v} \in \mathcal{H}$ puede expresarse como desarrollo de Fourier de los \vec{f}_i . Esto completa la demostración de que si \hat{U} es unitario, entonces $\{\vec{f}_i\}_{i=1}^{\infty}$ es una base ortonormal.

Veamos ahora la recíproca, es decir, que si $\{\vec{f}_i\}_{i=1}^{\infty}$ es una base ortonormal, entonces \hat{U} debe ser necesariamente unitario. Para ello, calculemos

$$\begin{aligned} \hat{U}^\dagger \hat{U} \vec{e}_i &= \hat{U}^\dagger \vec{f}_i = \sum_{j=1}^{\infty} (\vec{e}_j, \hat{U}^\dagger \vec{f}_i) \vec{e}_j = \sum_{j=1}^{\infty} (\hat{U} \vec{e}_j, \vec{f}_i) \vec{e}_j = \sum_{j=1}^{\infty} (\vec{f}_j, \vec{f}_i) \vec{e}_j \\ &= \delta_{ij} \vec{e}_j = \vec{e}_i, \end{aligned}$$

de modo que necesariamente $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{I}$. Análogamente,

$$\begin{aligned} \hat{U} \hat{U}^\dagger \vec{e}_i &= \hat{U} \sum_{j=1}^{\infty} (\vec{e}_j, \hat{U}^\dagger \vec{e}_i) \vec{e}_j = \hat{U} \sum_{j=1}^{\infty} (\hat{U} \vec{e}_j, \vec{e}_i) \vec{e}_j = \hat{U} \sum_{j=1}^{\infty} (\vec{f}_j, \vec{e}_i) \vec{e}_j \\ &= \sum_{j=1}^n (\vec{f}_j, \vec{e}_i) \hat{U} \vec{e}_j = \sum_{j=1}^n (\vec{f}_j, \vec{e}_i) \vec{f}_j = \vec{e}_i \end{aligned}$$

y así $\widehat{U}\widehat{U}^\dagger = \widehat{I} = \widehat{U}^\dagger\widehat{U}$, lo que completa la demostración.

Problema 2.11 .- Sean A_{ij} los coeficientes de la representación matricial de un operador \widehat{A} en la base $\{\vec{e}_i\}$. Obtener los coeficientes de la representación matricial de dicho operador en una base $\{\vec{f}_i\}$ relacionada con la anterior mediante el operador unitario \widehat{U} (es decir $\vec{f}_i = \widehat{U}\vec{e}_i$).

Los coeficientes de la representación matricial en la nueva base son

$$A'_{ij} \equiv (\vec{f}_i, \widehat{A}\vec{f}_j) = (\widehat{U}\vec{e}_i, \widehat{A}\widehat{U}\vec{e}_j) = (\vec{e}_i, \widehat{U}^\dagger\widehat{A}\widehat{U}\vec{e}_j) = (\widehat{U}^\dagger\widehat{A}\widehat{U})_{ij},$$

es decir

$$A'_{ij} = \sum_{m,n} U_{im}^\dagger A_{mn} U_{nj} = \sum_{m,n} U_{mi}^* A_{mn} U_{nj},$$

siendo $U_{nj} \equiv (\vec{e}_n, \widehat{U}\vec{e}_j) = (\vec{e}_n, \vec{f}_j)$ los productos escalares entre los vectores de ambas bases.

Problema 2.12 .-⁹ Consideremos el espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ y la siguiente sucesión de vectores $\{g_n(x)\}_{n=1}^{n=\infty}$ cuyo término general es $g_n(x) = \exp(-n^2 x^2/2)$. Calcule la norma del n -ésimo elemento de la sucesión. ¿Cuál es el límite de dicha sucesión?

Es evidente que

$$\|g_n\| = \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(nx)^2} dx} = \sqrt{\frac{1}{n} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} du} = \frac{\pi^{1/4}}{\sqrt{n}}.$$

De esta manera, puesto que $\lim_{n \rightarrow \infty} \|g_n\| = 0$, el límite de la sucesión es la función nula. Ahora bien, si nos fijamos en los valores que toma $g_n(x)$ para cada x , vemos que $g_n(0) = 1$ cualquiera que sea el valor de n . Así, si ahora calculamos el límite a partir de los valores que toman las funciones de la sucesión en cada punto, el resultado sería

$$\lim_{n \rightarrow \infty} g_n(x) = g(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \neq 0 \\ 1 & \text{si } x = 0, \end{cases}$$

que, en principio, *no* es la función nula. Esta paradoja no es tal. Al definir un norma estamos también definiendo cuál es nuestro concepto de límite y,

⁹Los asteriscos denotan problemas que tratan de puntos sutiles del formalismo de la teoría de los espacios de Hilbert. Aunque en la práctica se suelen obviar esos puntos, es conveniente leer estas explicaciones porque en algún caso las sutilezas pueden dar lugar a paradojas.

en concreto, la convergencia de una sucesión se entiende siempre como convergencia bajo la norma en cuestión. El segundo cálculo no ha sido entonces correcto, ya que hemos tomado como criterio de convergencia la “convergencia puntual” y no la convergencia asociada a la norma.

Aun así, la respuesta no es totalmente satisfactoria, puesto que parece que hay una diferencia entre la convergencia puntual (aquella que parece ser más intuitiva) y la convergencia asociada a la norma. Esta aparente contradicción se soluciona acudiendo a la teoría de la medida (desarrollada, entre otros, por Borel y Lebesgue) y redefiniendo el concepto de integral definida. Sin entrar en detalles, la norma de la función $g(x) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ puede evaluarse como sigue:

$$\|u\| = \sqrt{\lim_{\delta \rightarrow 0} \left(\int_{-\infty}^{-\delta} |g(x)|^2 + \int_{+\delta}^{+\infty} |g(x)|^2 \right)},$$

límite que, evidentemente, es cero. Luego la función $g(x)$ es la función nula puesto que su norma es igual a cero. En rigor, cuando consideramos el espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, dos funciones serán iguales si los valores que toman son iguales *excepto para un conjunto de valores discreto de la variable* (técnicamente, si son iguales salvo en un *conjunto de medida nula*). Así, un vector de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ no es realmente una función sino una *clase* (un conjunto) de funciones. No hay que preocuparse mucho por este detalle, ya que la información física contenida en una función no dependerá de los valores que toma en puntos aislados, sino de las cantidades integradas.

Problema 2.13 .- Definamos el operador hermítico $\hat{X} = x$ de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ que multiplica una función $g(x)$ por la variable x . Calcule su espectro y sus autofunciones.

Escribamos la ecuación de autovalores

$$\hat{X} \eta(x) = x \eta(x) = a \eta(x).$$

Tenemos entonces que

$$(x - a) \eta(x) = 0,$$

por lo que la única solución posible es una función $\eta(x)$ que sea nula para todo valor de x excepto para $x = a$. Ahora bien, si $\eta(a)$ es finito, entonces dicha función es la función nula (recuerde la discusión sobre la convergencia puntual). Por lo tanto, \hat{X} carece de espectro puntual.

Ahora bien, si tratamos la delta de Dirac como una función normal, la ecuación de autovalores admite la solución

$$\eta(x) = \delta(x - a),$$

con a cualquier valor real. Por tanto, el espectro de \hat{X} es continuo y las autofunciones correspondientes son las deltas de Dirac. Fíjese, por otro lado, que dado un vector $g(x)$ de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, su coordenada a -ésima en la base de deltas de Dirac es simplemente el valor que toma $g(x)$ en el punto a , ya que

$$g(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) \delta(x-a) dx.$$

Problema 2.14 .- Sea \hat{A} un operador hermítico en un espacio de Hilbert \mathcal{H} . Demuestre que si existe una base ortonormal de \mathcal{H} formada por vectores propios de \hat{A} , entonces \hat{A} carece de espectro continuo.

Sean $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots$ los vectores propios de \hat{A} con autovalores a_1, a_2, \dots que forman una base ortonormal del espacio de Hilbert. Consideremos un número real α tal que $\alpha \neq a_j \forall j$. Dado un vector genérico $\vec{u} = \sum_j u_j \vec{e}_j$ normalizado, se tiene que

$$\hat{A}\vec{u} = \sum_j a_j u_j \vec{e}_j$$

y, entonces,

$$\hat{A}\vec{u} - \alpha\vec{u} = \sum_j (a_j - \alpha) u_j \vec{e}_j.$$

La norma de $\hat{A}\vec{u} - \alpha\vec{u}$ es, entonces,

$$\|\hat{A}\vec{u} - \alpha\vec{u}\| = \sqrt{\sum_j (a_j - \alpha)^2 |u_j|^2}.$$

Para probar el teorema, basta comprobar que $\|\hat{A}\vec{u} - \alpha\vec{u}\|$ no puede ser arbitrariamente pequeño. Para ello, definamos Δ como el menor valor que toma la diferencia $|a_j - \alpha|$, que por hipótesis es estrictamente finito. Así:

$$\|\hat{A}\vec{u} - \alpha\vec{u}\| \geq \sqrt{\sum_j \Delta^2 |u_j|^2} = \Delta \sqrt{\sum_j |u_j|^2} = \Delta,$$

donde hemos usado la condición de normalización de \vec{u} . Como conclusión, ya que la norma $\|\hat{A}\vec{u} - \alpha\vec{u}\|$ no puede hacerse arbitrariamente pequeña, no hay valores espectrales aparte de los valores propios de σ_p .

Problema 2.15* .- Sea el espacio $\mathcal{L}^2[0, 1]$ y consideremos el operador $\hat{P}_x = -i \frac{d}{dx}$ que actúa sobre el conjunto de las funciones de derivada continua $C_1[0, 1]$.

- Demuestre que \hat{P}_x no es hermítico.
- Calcule la representación matricial de \hat{P}_x en la base de senos $\mathcal{B}_F = \{\chi_1, \chi_2, \dots\}$ con $\chi_n(x) = \sqrt{2} \sin(n\pi x)$.
- Sea $u(x) = 1$, calcule $\hat{P}_x u(x)$ directamente y usando la representación matricial obtenida en el apartado (b).
- Calcule el espectro del operador.
- Resuelva las cuestiones anteriores pero considerando ahora que el dominio del operador se restringe a funciones tales que $\phi(0) = \phi(1)$.

a) Sean $\phi(x)$ y $\eta(x)$ dos funciones del dominio de \hat{P}_x . Se tiene que

$$(\phi, \hat{P}_x \eta) = \int_0^1 \phi(x)^* \left(-i \frac{d\eta(x)}{dx} \right) dx = -i \int_0^1 \phi(x)^* \frac{d\eta(x)}{dx} dx$$

e, integrando por partes,

$$\begin{aligned} (\phi, \hat{P}_x \eta) &= -i [\phi^*(1) \eta(1) - \phi^*(0) \eta(0)] + i \int_0^1 \frac{d\phi(x)^*}{dx} \eta(x) dx \\ &= -i [\phi^*(1) \eta(1) - \phi^*(0) \eta(0)] + \int_0^1 \left(-i \frac{d\phi(x)}{dx} \right)^* \eta(x) dx \\ &= -i [\phi^*(1) \eta(1) - \phi^*(0) \eta(0)] + (\hat{P}_x \phi, \eta). \end{aligned}$$

Como, en general, $[\phi^*(1) \eta(1) - \phi^*(0) \eta(0)] \neq 0$, entonces $(\phi, \hat{P}_x \eta) \neq (\hat{P}_x \phi, \eta)$ y concluimos que el operador \hat{P}_x definido en el dominio indicado $C_1[0, 1]$ no es hermítico.

b) Los elementos de matriz de \hat{P}_x en la base de senos son

$$\begin{aligned} P_{mn} &= (\chi_m, \hat{P}_x \chi_n) = -2in\pi \int_0^1 \sin(m\pi x) \cos(n\pi x) dx = \\ &= \begin{cases} -\frac{2imn}{m^2 - n^2} & \text{si } n + m \text{ es impar} \\ 0 & \text{si } n + m \text{ es par,} \end{cases} \end{aligned}$$

y así la “matriz” infinita que representa a \hat{P}_x en la base \mathcal{B}_F es:

$$(\hat{P}_x) = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} & P_{13} & P_{14} & \dots \\ P_{21} & P_{22} & P_{23} & P_{24} & \dots \\ P_{31} & P_{32} & P_{33} & P_{34} & \dots \\ P_{41} & P_{42} & P_{43} & P_{44} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{4}{3}i & 0 & \frac{8}{15}i & \dots \\ -\frac{4}{3}i & 0 & \frac{12}{5}i & 0 & \dots \\ 0 & -\frac{12}{5}i & 0 & \frac{24}{7}i & \dots \\ -\frac{8}{15}i & 0 & -\frac{24}{7}i & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Nótese que la representación matricial es una matriz hermítica (esto es, que coincide con su traspuesta conjugada) aunque el operador no sea hermítico. Fíjese que en espacios de Hilbert de dimensión infinita la representación matricial no define unívocamente al operador. En efecto, si cambiamos el dominio del operador de manera que \mathcal{B}_F sigue perteneciendo al mismo, la matriz representativa en esa base seguirá siendo la misma.

Conviene que reflexionemos un poco más sobre este hecho, ya que podría “demostrarse” que \hat{P}_x con el dominio indicado es hermítico. Si $\{\phi_n\}$ y $\{\eta_n\}$ son las coordenadas de $\phi(x)$ y $\eta(x)$ en la base de senos, usando la representación matricial y el hecho de que la matriz (\hat{P}_x) es hermítica

$$\begin{aligned} (\eta, \hat{P}_x \phi) &= \sum_{n,k} \eta_k^* P_{kn} \phi_n = \left(\sum_{n,k} \eta_k P_{kn}^* \phi_n^* \right)^* = \left(\sum_{n,k} \phi_n^* P_{nk} \eta_k \right)^* \\ &= (\phi, \hat{P}_x \eta)^* = (\hat{P}_x \phi, \eta) \end{aligned}$$

¡que es la condición de hermiticidad de un operador! Como señalamos en el texto, el cálculo de los elementos de matriz usando la representación matricial sólo debe emplearse si las funciones *también* pertenecen al dominio del adjunto. Puede probarse que el adjunto de \hat{P}_x es el operador $-id/dx$ con dominio las funciones de $C_1[0, 1]$ que se anulan en los extremos. Pero precisamente hemos probado en el apartado (a) que el presente operador \hat{P}_x no es hermítico ya que la condición de hermiticidad falla para las funciones de su dominio que *no* se anulan tanto en 0 como en 1. Precisamente es para estas funciones para las que este último desarrollo no es válido y éste es el motivo de la aparente paradoja. En Mecánica Cuántica usaremos habitualmente operadores que son a la vez hermíticos y autoadjuntos, y este problema concreto no aparecerá, pero conviene insistir de nuevo en la precaución que siempre ha de tenerse al manipular expresiones en las que se tengan sumas infinitas.

c) Evidentemente, si $u(x) = 1$, $\hat{P}_x u(x) = 0$. Para usar la representación matricial, primero hemos de calcular las coordenadas de $u(x)$ en la base de senos:

$$u_n = (\chi_n, u) = \int_0^1 \sqrt{2} \sin(n\pi x) dx = \sqrt{2} \frac{1 - \cos n\pi}{n\pi} = \begin{cases} 2^{3/2}/(n\pi) & n \text{ impar} \\ 0 & n \text{ par} \end{cases}$$

De esta manera, si llamamos $w(x) = \hat{P}_x u(x)$, sus componentes $w_k = (\chi_k, w)$ en esta base podrán escribirse en términos de la representación matricial de \hat{P}_x como $w_k = \sum_n P_{kn} u_n$, es decir

$$w_k = \begin{cases} 0 & \text{si } k \text{ es impar} \\ \sum_n^{\text{impar}} \left(-\frac{2ikn}{k^2 - n^2} \right) \frac{2^{3/2}}{n\pi} = -\frac{i}{\pi} \sum_n^{\text{impar}} \frac{4k}{k^2 - n^2} & \text{si } k \text{ es par.} \end{cases}$$

La última suma está dada por

$$\sum_n^{\text{impar}} \frac{4k}{k^2 - n^2} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{4k}{k^2 - (2m+1)^2} = -\pi \tan\left(\frac{\pi}{2}k\right)$$

y como k es par, tenemos que $w_k = 0$ en cualquier caso (como era de esperar, por otra parte), esto es, que w es el vector cero.

Veamos lo que pasaría si extendiésemos la linealidad de \hat{P}_x a una serie de Fourier conocidas las coordenadas de $u(x)$ en la base de senos $\chi_n(x)$. En ese caso, se cumpliría que

$$\hat{P}_x u(x) = \hat{P}_x \sum_{n=1}^{\infty} u_n \chi_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} u_n \hat{P}_x \chi_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} u_n n \pi \zeta_n(x),$$

donde $\zeta_n(x) = \sqrt{2} \cos(n\pi x)$ es el n -ésimo elemento de la base de cosenos de $\mathcal{L}^2[0, 1]$. Terminando de operar

$$\hat{P}_x u(x) = 2^{3/2} \sum_n^{\text{impar}} \zeta_n(x),$$

que define una serie divergente (no es una función de $\mathcal{L}^2[0, 1]$). Esto es contradictorio con el resultado anterior. El origen de esta contradicción está en el paso $\hat{P}_x \sum_{n=1}^{\infty} u_n \chi_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} u_n \hat{P}_x \chi_n(x)$, donde se introducido indebidamente el operador \hat{P}_x dentro de la suma infinita.

d) Para calcular el espectro del operador planteemos la ecuación de autovalores

$$\hat{P}_x \psi_p(x) = p \psi_p(x) \Rightarrow -i \frac{d}{dx} \psi_p(x) = p \psi_p(x),$$

cuya solución es

$$\psi_p(x) = A e^{ipx},$$

siendo A una constante arbitraria y p cualquier número complejo. Las funciones $\psi_p(x)$ así obtenidas son normalizables y pertenecen al dominio de \hat{P}_x , por lo que el espectro puntual $\sigma_P(\hat{P}_x)$ es el plano complejo \mathbb{C} . Naturalmente no puede tener espectro continuo diferenciado, ya que el espectro puntual $\sigma_P(\hat{P}_x)$ llena todo el conjunto de los números complejos. No ha de sorprendernos el resultado, ya que \hat{P}_x puede tener autovalores complejos al no ser hermítico.

e) Por lo que hemos dicho, al cambiar el dominio tanto la representación matricial como el resultado de la actuación de \hat{P}_x sobre la función unidad

seguirán siendo los mismos. En cuanto a la hermiticidad, procediendo de igual manera que en el apartado (a)

$$(\phi, \hat{P}_x \eta) = -i [\phi^*(1) \eta(1) - \phi^*(0) \eta(0)] + (\hat{P}_x \phi, \eta).$$

Pero ahora las funciones son iguales en 0 y 1, por lo que el término entre corchetes se anula y \hat{P}_x con el nuevo dominio sí es hermítico.

La ecuación de autovalores $\hat{P}_x \psi_p(x) = p \psi_p(x)$ tendrá como solución $\psi_p(x) = Ae^{ipx}$, pero ahora hemos de restringirnos al dominio del operador, esto es, hemos de imponer que

$$\psi_p(0) = \psi_p(1)$$

lo que implica que

$$1 = e^{ip}$$

y, entonces, los autovalores han de verificar $p = 2\pi n$, con n cualquier número entero. En consecuencia

$$\sigma_P(\hat{P}_x) = \{2\pi n ; n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots\}$$

y las autofunciones correspondientes son

$$\psi_n(x) \propto e^{2\pi n x i},$$

que son los elementos de la base exponencial de Fourier. Puesto que estas funciones propias forman una base ortonormal del Hilbert, el operador carece de espectro continuo.

Problema 2.16* .- Sea ahora el mismo operador \hat{P}_x de $\mathcal{L}^2[0,1]$ pero cuyo dominio son las funciones derivables de $C_1[0,1]$ tales que se anulan en $x = 0$ y $x = 1$.

- Demuestre que \hat{P}_x es hermítico.
- Obtenga el espectro del operador \hat{P}_x .
- Calcule la representación matricial de \hat{P}_x en la base de senos $\mathcal{B}_F = \{\chi_1, \chi_2, \dots\}$ con $\chi_n(x) = \sqrt{2} \sin(n\pi x)$.

a) Procediendo de forma similar a la del problema anterior, si $\phi(x)$ y $\eta(x)$ pertenecen al dominio de \hat{P}_x dichas funciones se anulan en los extremos de $[0,1]$ y se tiene que

$$(\phi, \hat{P}_x \eta) = (\hat{P}_x \phi, \eta) \quad \forall \phi(x), \eta(x) \in \mathcal{D}(\hat{P}_x),$$

por lo que \hat{P}_x es hermítico.

b) Para calcular el espectro de \hat{P}_x planteemos la ecuación de autovalores

$$\hat{P}_x \psi_p(x) = p \psi_p(x) \Rightarrow -i \frac{d}{dx} \psi_p(x) = p \psi_p(x),$$

cuya solución es

$$\psi_p(x) = A \exp(ipx).$$

Ya que $\psi_p(0) \neq 0$, $\psi_p(x)$ no pertenece al dominio de \hat{P}_x y, en consecuencia, $\sigma_p(\hat{P}_x) = \emptyset$.

Ahora bien, los vectores $\psi_p(x)$ son normalizables y, naturalmente, pertenecen al espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2[0, 1]$. A primera vista uno podría pensar que $\sigma_c(\hat{P}_x) = \mathbb{C}$, lo que contradice el hecho de que \hat{P}_x sea hermítico. Recuerde que para los operadores \hat{X} y \hat{P}_x de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, la solución de la ecuación de autovalores era una función no normalizable. Aquí la situación es diferente, ya que la “autofunción” sí pertenece al Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, pero no está dentro del dominio del operador. En cualquier caso, para caracterizar sin ambigüedad el espectro continuo hay que proceder de acuerdo con la definición. Esto es, si $p \in \sigma_c(\hat{P}_x)$, existe un vector normalizado $\psi(x) \in D(\hat{P}_x)$ tal que la norma $\left\| (\hat{P}_x - p) \psi(x) \right\|$ es arbitrariamente pequeña (pero no idénticamente nula). Sin embargo puede probarse que para cualquier $p \in \mathbb{C}$, tal función *no existe*. En efecto, dicha función ha de ser similar a $A \exp(ipx)$ en el interior del intervalo $[0, 1]$, pero también ha de anularse en 0 y en 1. De esta manera, $\psi(x)$ cambia muy deprisa en las cercanías de estos puntos y existe una fuerte contribución a la derivada que evita que la norma $\left\| (\hat{P}_x - p) \psi(x) \right\|$ sea arbitrariamente pequeña. Por tanto la respuesta correcta es $\sigma_c(\hat{P}_x) = \emptyset$ y \hat{P}_x no tiene espectro (ni puntual ni continuo).

Aparece entonces una contradicción con el texto, ya que en él hemos dicho que, dado un operador hermítico, existe siempre una base (puede que impropia) de autofunciones. En este caso, nuestro operador hermítico no tiene espectro y, evidentemente, tal base no puede existir. Como anunciamos, hemos estado suponiendo que los operadores hermíticos son *también* autoadjuntos y, en rigor, aunque teoremas como el carácter real del espectro y la ortogonalidad de autofunciones son válidos para operadores hermíticos, la existencia de una base (esto es, el teorema espectral) sólo se garantiza si el operador es autoadjunto. Pues bien, el operador \hat{P}_x que estamos aquí tratando *no es autoadjunto*, porque su adjunto es $-id/dx$ definido sobre *todas* las funciones $C_1[0, 1]$, esto es, el operador que vimos en primer lugar en el problema anterior.

Surge entonces una duda. Ya vimos en el capítulo anterior que, salvo constante multiplicativa, \hat{P}_x representará al operador de momento lineal. A su vez, $\mathcal{L}^2[0, 1]$ será el espacio de Hilbert asociado de los estados de una partícula que se mueve dentro del intervalo $[0, 1]$ (con las unidades físicas correspondientes). ¿Cuál de las tres realizaciones que hemos visto de \hat{P}_x representará al momento lineal? Como se comprobará en el próximo capítulo, los operadores que representan a magnitudes físicas han de ser hermíticos, pero esto no responde totalmente a la pregunta ya que todavía tenemos dos posibles respuestas. No vayamos más allá, es mucho mejor no restringirse a la pura matemática y razonar en términos físicos. Piense que la única manera de tener la seguridad de que una partícula no escape de una región es situando barreras de potencial infinitas en los límites de la misma, lo que físicamente no parece muy razonable pues deberíamos preguntarnos entonces sobre cómo construir físicamente una pared infinita. Por tanto parece muy forzado el suponer que $\mathcal{L}^2[0, 1]$ sea un espacio “físico”, y en todo caso describirá una situación ideal imposible de alcanzar físicamente. No es entonces extraño que el formalismo plantee algunas ambigüedades.

c) La representación matricial es la misma que se ha calculado en el problema anterior.

Problema 2.17 .- El espectro del operador $\hat{P}_x = -id/dx$ de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ es toda la recta real \mathbb{R} y sus autofunciones son las ondas planas $\eta_k(x) = \exp(ikx)/\sqrt{2\pi}$, donde el factor $1/\sqrt{2\pi}$ es una constante de normalización. Dada una función $g(x) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, halle sus “coordenadas” en la base de autoestados de \hat{P}_x .

Puesto que las $\eta_k(x)$ constituyen una base de Fourier, cualquier función $g(x)$ puede escribirse de la forma

$$g(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{g}(k) \eta_k(x) dk,$$

donde la *coordenada* $\tilde{g}(k)$ viene dada por el producto escalar en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$

$$\tilde{g}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \eta_k^*(x) g(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} g(x) dx.$$

Esto es, $\tilde{g}(k)$ no es más que la transformada de Fourier de $g(x)$. A su vez, conocida $\tilde{g}(k)$ conocemos

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

que es, lógicamente, la transformada inversa de Fourier. Nótese que en este caso el índice continuo es el propio autovalor k , y ello es debido a la relación existente entre la delta de Dirac y las ondas planas.

Problema 2.18 .- Sea el operador hermítico $\hat{K} = \hat{P}_x^2/2 = -(1/2) d^2/dx^2$ de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, cuyo dominio son todas las funciones derivables dos veces de cuadrado integrable.

a) Demuestre que \hat{K} es positivo.

b) Calcule su espectro y las autofunciones correspondientes.

a) Como \hat{K} es el cuadrado de un operador, inmediatamente se tiene que es positivo. Nótese que entonces sus valores espectrales han de ser mayores o iguales que cero (de lo contrario se llegaría a una contradicción con el carácter positivo de \hat{K}).

b) Para calcular el espectro de \hat{K} planteemos formalmente la ecuación de autovalores

$$\hat{K}\eta(x) = \kappa\eta(x) \Rightarrow -\frac{1}{2}\frac{d}{dx^2}\eta(x) = \kappa\eta(x),$$

con $\kappa > 0$. La solución general de dicha ecuación es

$$\eta(x) = Ae^{i\sqrt{2\kappa}x} + Be^{-i\sqrt{2\kappa}x},$$

donde A y B son constantes arbitrarias. Por tanto, el espectro de \hat{K} es igual a \mathbb{R}^+ , la degeneración de κ es igual a dos y dos autoestados ortonormales con autovalor κ son las ondas planas

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\sqrt{2\kappa}x}, \quad \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-i\sqrt{2\kappa}x}.$$

Note que, en general, la función

$$\eta(x) = A\frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} + B\frac{e^{-ikx}}{\sqrt{2\pi}},$$

con $|A|^2 + |B|^2 = 1$, será un autovector normalizado (en el sentido de Dirac) con valor espectral $k^2/2$.

Problema 2.19 .- Sea el mismo operador hermítico $\hat{K} = -(1/2) d^2/dx^2$ pero ahora en $\mathcal{L}^2[0, 1]$ y con dominio las funciones derivables dos veces que se anulan en 0 y 1.

a) Demuestre que es hermítico.

b) Calcule su espectro y las autofunciones correspondientes.

a) Para demostrar que es hermítico hay que comprobar que para dos funciones cualesquiera $g(x)$ y $h(x)$ pertenecientes a su dominio se cumple que

$$\int_0^1 g^*(x) \hat{K} h(x) dx = \int_0^1 (\hat{K} g^*(x)) h(x) dx$$

Sustituyendo \hat{K} por su expresión

$$\int_0^1 g^*(x) \hat{K} h(x) dx = -\frac{1}{2} \int_0^1 g^*(x) \frac{d^2}{dx^2} h(x) dx =$$

(integrando por partes)

$$= \frac{1}{2} \int_0^1 \frac{dg^*(x)}{dx} \frac{dh(x)}{dx} dx - \frac{1}{2} g^*(x) \frac{dh(x)}{dx} \Big|_0^1 =$$

($g(x)$ se anula, por hipótesis, en 0 y en 1)

$$= \frac{1}{2} \int_0^1 \frac{dg^*(x)}{dx} \frac{dh(x)}{dx} dx =$$

(integrando por partes una segunda vez y usando el hecho de que $h(x)$ también se anula en 0 y en 1)

$$= -\frac{1}{2} \int_0^1 \frac{d^2 g^*(x)}{dx^2} h(x) dx = \int_0^1 (\hat{K} g^*(x)) h(x) dx,$$

quedando demostrado el carácter hermítico de \hat{K} .

b) Para obtener su espectro planteemos la ecuación de autovalores

$$\hat{K} \eta(x) = \kappa \eta(x) \Rightarrow -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \eta(x) = \kappa \eta(x),$$

cuya solución general (en el intervalo $[0, 1]$) es

$$\eta(x) = Ae^{i\sqrt{2\kappa}x} + Be^{-i\sqrt{2\kappa}x}.$$

Ahora bien, $\eta(0) = \eta(1) = 0$, por lo que

$$\begin{aligned} A + B &= 0 \\ Ae^{i\sqrt{2\kappa}} + Be^{-i\sqrt{2\kappa}} &= 0. \end{aligned}$$

De esta manera, $A = -B$ y, por tanto

$$e^{i\sqrt{2\kappa}} = e^{-i\sqrt{2\kappa}}.$$

Esta última igualdad se cumple sólo si $\sqrt{2\kappa} = n\pi$, con n un número natural; como consecuencia, el espectro de \hat{K} es

$$\sigma(\hat{K}) = \left\{ \kappa = \frac{\pi^2}{2} n^2, \quad n = 1, 2, \dots \right\}$$

(nótese que $n \neq 0$, ya que si $n = 0$ la función $\eta(x)$ sería la función nula). Los correspondientes autovectores son

$$\eta_\kappa(x) = A [e^{in\pi x} - e^{-in\pi x}] = \alpha \sin(n\pi x)$$

y, tomando $\alpha = \sqrt{2}$, $\eta_k(x)$ está normalizada. Como los autovectores de \hat{K} constituyen la base ortonormal de senos de $\mathcal{L}^2[0, 1]$, \hat{K} no tiene espectro continuo.

Problema 2.20 .- Sean el operador $\hat{K} = -(1/2) d^2/dx^2$ y el operador paridad $\hat{\Pi}$, cuya actuación sobre una función $\phi(x)$ es $\hat{\Pi}\phi(x) = \phi(-x)$ definidos en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.

a) Demuestre que ambos operadores conmutan.

b) Obtenga una base ortonormal (impropia) de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ formada por autofunciones de \hat{K} y $\hat{\Pi}$.

a) Empecemos probando que \hat{K} y $\hat{\Pi}$ conmutan. Así, sea una función cualquiera $\phi(x) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Entonces

$$\begin{aligned} \hat{K}\hat{\Pi}\phi(x) &= -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \phi(-x) \\ \hat{\Pi}\hat{K}\phi(x) &= \hat{\Pi} \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) \right) = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{d(-x)^2} \phi(-x) = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \phi(-x). \end{aligned}$$

Como esto es cierto para cualquier función $\phi(x)$, entonces $\hat{K}\hat{\Pi} = \hat{\Pi}\hat{K} \Rightarrow [\hat{\Pi}, \hat{K}] = 0$.

b) Pasemos ahora a la construcción de la base ortonormal. Es fácil ver que para el operador \hat{K} una base ortonormal de autofunciones (en sentido generalizado) es

$$\mathcal{B}_{\hat{K}} = \left\{ \frac{\exp(iqx)}{\sqrt{2\pi}}, \frac{\exp(-iqx)}{\sqrt{2\pi}} \right\}_{q \geq 0},$$

siendo el autovalor correspondiente $q^2/2$. Estas funciones no son autofunciones de la paridad. Sin embargo, cualquier combinación lineal $\alpha \exp(iqx)/\sqrt{2\pi} +$

$\beta \exp(-iqx)/\sqrt{2\pi}$ también será autofunción de \hat{K} . Consideremos las funciones

$$\begin{aligned}\psi_{q,+1}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\exp(iqx)}{\sqrt{2\pi}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\exp(-iqx)}{\sqrt{2\pi}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos(qx) \\ \psi_{q,-1}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}i} \frac{\exp(iqx)}{\sqrt{2\pi}} - \frac{1}{\sqrt{2}i} \frac{\exp(-iqx)}{\sqrt{2\pi}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin(qx),\end{aligned}$$

que siguen siendo autofunciones de \hat{K} , pero que además cumplen que

$$\begin{aligned}\hat{\Pi}\psi_{q,+1}(x) &= \psi_{q,+1}(-x) = \psi_{q,+1}(x) \\ \hat{\Pi}\psi_{q,-1}(x) &= \psi_{q,-1}(-x) = -\psi_{q,-1}(x)\end{aligned}$$

(esto es, el coseno es una función par y el seno es impar). Por tanto, $\psi_{q,+1}(x)$ es autofunción de la paridad con autovalor $+1$, mientras que $\psi_{q,-1}(x)$ lo es con autovalor -1 . En definitiva,

$$\mathcal{B}_{\hat{K}, \hat{\Pi}} = \left\{ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos(qx), \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin(qx) \right\}_{q \geq 0}$$

es una base ortonormal de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ formada por autovectores de \hat{K} y $\hat{\Pi}$ simultáneamente.

Problema 2.21 .- Sea \hat{U} un operador unitario en un espacio de Hilbert. Pruébese que todo valor propio de \hat{U} tiene módulo unidad.

Sea \vec{v} un vector propio de \hat{U} con autovalor $\alpha \in \mathbb{C}$, esto es,

$$\hat{U} \vec{v} = \alpha \vec{v}.$$

Por otro lado, ya que \hat{U} es unitario debe cumplirse que

$$\|\vec{v}\| = \|\hat{U} \vec{v}\|$$

y entonces

$$\begin{aligned}\|\vec{v}\| &= \|\hat{U} \vec{v}\| = \|\alpha \vec{v}\| = \sqrt{(\alpha \vec{v}, \alpha \vec{v})} = \sqrt{\alpha (\alpha \vec{v}, \vec{v})} = \\ &= \sqrt{\alpha \alpha^* (\vec{v}, \vec{v})} = \sqrt{\alpha \alpha^*} \|\vec{v}\| = |\alpha| \|\vec{v}\|.\end{aligned}$$

Por tanto, ya que $\|\vec{v}\| \neq 0$, $|\alpha| = 1$. (Puede probarse que si $\alpha \in \sigma_c(\hat{U})$ el módulo de α es también igual a la unidad).

Problema 2.22 .- Sea $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ y definamos el operador $\hat{\mathcal{F}}$ transformada de Fourier de la forma

$$\hat{\mathcal{F}}\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(y) \exp(-ixy) dy$$

(su dominio es toda función $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ para la cual $\hat{\mathcal{F}}\phi(x) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$). Demostrar que

$$\hat{\mathcal{F}}^\dagger\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(y) \exp(ixy) dy$$

y, como consecuencia, probar que $\hat{\mathcal{F}}$ es unitario.

Por la definición de producto escalar en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$

$$\begin{aligned} (\varphi(x), \hat{\mathcal{F}}\phi(x)) &= \left(\varphi(x), \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(y) \exp(-ixy) dy \right) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(y) \exp(-ixy) dy \right) dx \end{aligned}$$

Reordenando el integrando dentro de la integral doble, tenemos que esto se puede escribir como

$$\begin{aligned} (\varphi(x), \hat{\mathcal{F}}\phi(x)) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) \exp(ixy) dx \right)^* \phi(y) dy \\ &= (\hat{\mathcal{F}}^\dagger\varphi(y), \phi(y)), \end{aligned}$$

donde

$$\hat{\mathcal{F}}^\dagger\varphi(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) \exp(ixy) dx.$$

Asimismo,

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{F}}^\dagger\hat{\mathcal{F}}\phi(x) &= \hat{\mathcal{F}}^\dagger \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(y) \exp(-ixy) dy \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(y) e^{-izy} dy \right) e^{ixz} dz \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(iz(x-y)) dz \right) \phi(y) dy \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-y) \phi(y) dy = \phi(x), \end{aligned}$$

de modo que $\widehat{\mathcal{F}}^\dagger \widehat{\mathcal{F}} \equiv \widehat{I}$, que es la definición de operador unitario.

Problema 2.23 .- Consideremos una función $\phi(x)$ de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ tal que todas sus derivadas se anulan en $\pm\infty$. Una forma alternativa de definir la derivada de $\phi(x)$ es la siguiente: la derivada de $\phi(x)$ es aquella función $d\phi(x)/dx$ tal que, para toda función continua $g(x) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$,

$$\left(g(x), \frac{d\phi(x)}{dx}\right) = - \left(\frac{dg(x)}{dx}, \phi(x)\right),$$

donde la derivada de $g(x)$ ha de entenderse en el sentido usual. Obviamente, esta “definición” es una simple consecuencia de la aplicación de la integración por partes.

Sin embargo, consideremos una función $\phi(x)$ que es discontinua en $x = a$. La derivada usual de $\phi(x)$ está siempre bien definida, salvo en el punto $x = a$ donde la función no es derivable; pero la “definición” dada anteriormente permite obtener el valor de la “derivada” de $\phi(x)$ ¡en el propio punto a ! Obtenga dicho valor (esta forma de derivar una función se denomina “derivación en sentido de distribuciones”).

Supongamos que $g(x)$ es real (no se pierde generalidad por ello). Partamos de la igualdad

$$\left(\frac{dg(x)}{dx}, \phi(x)\right) = \int_{\mathbb{R}} \frac{dg(x)}{dx} \phi(x) dx.$$

Puesto que el punto problemático es $x = a$, tenemos que

$$\left(\frac{dg(x)}{dx}, \phi(x)\right) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \left(\int_{-\infty}^{a-\delta} \frac{dg(x)}{dx} \phi(x) dx + \int_{a+\delta}^{+\infty} \frac{dg(x)}{dx} \phi(x) dx \right).$$

Integrando por partes cada una de las dos integrales, y recordando que $\phi(x)$ se anula en $\pm\infty$,

$$\begin{aligned} \left(\frac{dg(x)}{dx}, \phi(x)\right) &= [g(a) \phi(a^-) - g(a) \phi(a^+)] \\ &\quad - \lim_{\delta \rightarrow 0} \left(\int_{-\infty}^{a-\delta} g(x) \frac{d\phi(x)}{dx} dx + \int_{a+\delta}^{+\infty} g(x) \frac{d\phi(x)}{dx} dx \right), \end{aligned}$$

donde $\phi(a^+)$ es el límite de $\phi(x)$ cuando x tiende a a por la derecha, mientras que $\phi(a^-)$ es dicho límite cuando x tiende a a por la izquierda. Ahora bien,

recordando la definición de delta de Dirac

$$\begin{aligned} \left(\frac{dg(x)}{dx}, \phi(x) \right) &= - \int_{\mathbb{R}} g(x) [\phi(a^+) - \phi(a^-)] \delta(x-a) dx \\ &\quad - \lim_{\delta \rightarrow 0} \left(\int_{-\infty}^{a-\delta} g(x) \frac{d\phi(x)}{dx} dx + \int_{a+\delta}^{+\infty} g(x) \frac{d\phi(x)}{dx} dx \right) \end{aligned}$$

y, puesto que el punto a está dentro del intervalo $(a-\delta, a+\delta)$,

$$\begin{aligned} \left(\frac{dg(x)}{dx}, \phi(x) \right) &= - \lim_{\delta \rightarrow 0} \left(\int_{-\infty}^{a-\delta} g(x) \frac{d\phi(x)}{dx} dx \right. \\ &\quad \left. + \int_{a-\delta}^{a+\delta} g(x) [\phi(a^+) - \phi(a^-)] \delta(x-a) dx \right. \\ &\quad \left. + \int_{a+\delta}^{+\infty} g(x) \frac{d\phi(x)}{dx} dx \right). \end{aligned}$$

Entonces, usando la definición de derivada en sentido de distribuciones (dada en el enunciado) se obtiene

$$\frac{d\phi(x)}{dx} = \begin{cases} \frac{d}{dx} \phi(x) & \text{si } x \neq a \\ [\phi(a^+) - \phi(a^-)] \delta(x-a) & \text{si } x = a. \end{cases}$$

Esto es, la *derivada de una función* (no necesariamente continua) *en sentido de distribuciones* es, en efecto, igual a la derivada usual de la función en los puntos en los que ésta es continua; en aquellos puntos en los que la función es discontinua la derivada en sentido de distribuciones es igual a la magnitud de la discontinuidad multiplicada por la delta de Dirac centrada en el punto de discontinuidad.

Problema 2.24 .- Considérese la función normalizada

$$\phi(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| \geq 1 \\ \sqrt{\frac{3}{2}} (1 - |x|) & \text{si } |x| \leq 1, \end{cases}$$

perteneciente a $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.

a) Calcule las coordenadas $\tilde{\phi}(k)$ de la función $\phi(x)$ en la base de ondas planas $\eta_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$ de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.

b) Usando el resultado anterior, calcule el valor medio de $\langle \hat{K} \rangle_{\phi} = (\phi, \hat{K} \phi)$, siendo $\hat{K} = (-1/2) d^2/dx^2$.

c) Evalúe $\hat{K}\phi(x)$ y, usando ese resultado, calcule $\langle \hat{K} \rangle_\phi$.

a) La coordenada $\tilde{\phi}(k)$ está dada por

$$\tilde{\phi}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \eta_k^*(x) \phi(x) dx = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} \sqrt{\frac{3}{2}} (1 - |x|) dx.$$

Ya que $\phi(x)$ es una función par, la parte imaginaria de e^{-ikx} no contribuye a la integral. Por lo tanto,

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}(k) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \int_{-1}^1 \cos kx (1 - |x|) dx = \sqrt{\frac{3}{\pi}} \int_0^1 (1 - x) \cos kx dx \\ &= \sqrt{\frac{3}{\pi}} \frac{1 - \cos k}{k^2}. \end{aligned}$$

b) El operador \hat{K} es diagonal en la base de ondas planas, ya que

$$\hat{K}\eta_k(x) = \frac{1}{2}k^2\eta_k(x).$$

De esta forma,

$$\langle \hat{K} \rangle_\phi = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k^2}{2} |\tilde{\phi}(k)|^2 dk = \frac{3}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1 - \cos kx}{k} \right)^2 dk = \frac{3}{2}.$$

c) Podemos escribir

$$\hat{K} = -\frac{1}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} \right).$$

La primera derivada de $\phi(x)$ es

$$\frac{d\phi(x)}{dx} = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| \geq 1 \\ \sqrt{\frac{3}{2}} & \text{si } x \in (-1, 0) \\ -\sqrt{\frac{3}{2}} & \text{si } x \in (0, 1). \end{cases}$$

Por lo tanto, ya que $d\phi(x)/dx$ es una función discontinua, la segunda derivada ha de hacerse en el sentido de las distribuciones. Puesto que en $x = -1$ tenemos un salto $\sqrt{3/2}$, en $x = 0$ un salto $-2\sqrt{3/2}$ y, por último, en $x = 1$ un tercer salto $\sqrt{3/2}$, podemos escribir

$$\begin{aligned} \hat{K}\phi(x) &= -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) \\ &= -\frac{1}{2} \left[\sqrt{\frac{3}{2}} \delta(x+1) - 2\sqrt{\frac{3}{2}} \delta(x) + \sqrt{\frac{3}{2}} \delta(x-1) \right] \\ &= \sqrt{\frac{3}{2}} \left[-\frac{1}{2} \delta(x+1) + \delta(x) - \frac{1}{2} \delta(x-1) \right]. \end{aligned}$$

Como consecuencia, el valor medio de \widehat{K} es

$$\begin{aligned} (\phi, \widehat{K}\phi) &= \sqrt{\frac{3}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x) \left[-\frac{1}{2}\delta(x+1) + \delta(x) - \frac{1}{2}\delta(x-1) \right] dx \\ &= \sqrt{\frac{3}{2}} \left[-\frac{1}{2}\phi^*(-1) + \phi^*(0) - \frac{1}{2}\phi^*(1) \right] = \frac{3}{2}, \end{aligned}$$

que, naturalmente, coincide con el resultado obtenido en (b).

Problema 2.25 .- Considérese la delta de Dirac $\delta(x-a)$. Aunque no sea una función de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, evalúe su derivada en sentido de distribuciones e interprete el resultado.

Como hemos visto, la delta de Dirac $\delta_a(x) = \delta(x-a)$ sólo puede interpretarse cuando aparece dentro de un producto escalar:

$$(\delta_a(x), \phi(x)) = \phi(a).$$

De esta manera, δ_a debe interpretarse como la aplicación tal que a cada función $\phi(x)$ le hace corresponder el valor de la misma en $x=a$:

$$\delta_a\phi(x) = \phi(a).$$

Evidentemente tal aplicación es lineal y, en consecuencia, δ_a es una forma lineal del espacio dual de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Usando la notación de Dirac, δ_a es un “bra” y el “ket” asociado es la “función” $\delta(x-a)$.

Así, tras esta reflexión, ya tiene algo más de sentido el preguntarse por la derivada de la delta de Dirac, ya que siempre podremos interpretar el resultado usando los mismo términos. Así, si $\widehat{D}\delta_a$ es la derivada de la delta, donde \widehat{D} es la derivada en sentido de distribuciones, y si $\phi(x)$ es una función de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$

$$(\widehat{D}\delta_a(x), \phi(x)) = -(\delta_a(x), \widehat{D}\phi(x)) = -\widehat{D}\phi(x)\Big|_{x=a}.$$

Por tanto $\widehat{D}\delta_a$ es la forma lineal tal que al actuar sobre una función nos da el opuesto del valor de la derivada de la función en el punto a :

$$(\widehat{D}\delta_a)\phi(x) = -\phi'(a)$$

En otras palabras, la “función” $\delta'(x-a)$ está definida a partir de la regla de actuación

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta'(x-a)\phi(x)dx = -\phi'(a)$$

para toda función $\phi(x)$ de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ con derivada continua en $x=a$.

90

Capítulo 3

POSTULADOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

3.1 Introducción.

En el primer capítulo hemos tratado de justificar brevemente la necesidad de un nuevo formalismo físico y matemático para la formulación de la Mecánica Cuántica (M.C.). En el segundo capítulo hemos revisado someramente los conceptos matemáticos básicos que nos van a servir para establecer los postulados sobre los que se construirá la teoría formal. Estamos, pues, en disposición de formular la base postulacional de la M.C.

Presentaremos los postulados de la forma más general posible, pero que a la vez sea claramente asequible para un alumno del primer ciclo de licenciatura con unos conocimientos matemáticos básicos. A lo largo de la exposición ilustraremos dichos postulados mediante su aplicación a un sistema formado por una única partícula no relativista con un grado de libertad. Sólo en algunos pocos casos iremos más allá. Pero no nos gustaría que el lector se quedase con la impresión de que hay que reformular la base postulacional de la M.C. si queremos tratar otro tipo de sistemas físicos. *Estos postulados se suponen válidos para cualquier sistema tratable por la M.C. no relativista.*

3.2 Descripción de los sistemas físicos: Postulados 1 y 2.

- En la Física Clásica, el estado mecánico de una partícula en un instante t queda unívocamente determinado por los valores $x(t)$ y $p(t)$ de su posición y de su momento lineal. En el capítulo introductorio se ha visto que esto

ya no resulta posible para una partícula a escala microscópica, y lo máximo a que podemos aspirar es a conocer sendas distribuciones de probabilidad, $\rho(x)$ y $\rho_p(p)$, para los valores de x y p . También vimos que para obtener información relevante acerca de las distintas magnitudes físicas medibles (los observables) necesitamos operadores que las representen. Estas ideas son las que formalmente establecen los dos primeros postulados de la M.C.

POSTULADO 1.- Dado un sistema físico, cualquier estado de dicho sistema se representa por un vector normalizado ψ de un espacio de Hilbert \mathcal{H} . A dicho vector normalizado se le denomina *vector o función de estado*. Toda la información relativa al sistema físico en cuestión está contenida en el vector de estado. El espacio de Hilbert \mathcal{H} es, por tanto, el *espacio de los estados* del sistema físico.

La exigencia de que el vector esté normalizado se debe a que en postulados posteriores interpretaremos algunas cantidades que se obtienen a partir de dicho vector como probabilidades. Si queremos que estas probabilidades sean “absolutas”, es decir, que estén comprendidas entre 0 y 1, debemos exigir que el vector esté normalizado. Si el vector no estuviera normalizado, tampoco lo estarían las probabilidades, aunque las probabilidades relativas seguirían siendo correctas. Por ello, lo realmente importante es que el vector sea normalizable. En este caso, siempre podremos encontrar una constante de normalización adecuada tal que multiplicando el vector no normalizado por dicha constante obtengamos un vector normalizado. En este sentido amplio podemos decir que los vectores ψ , 13ψ o $(5i/7)\psi$ representan el mismo estado físico, pues todos ellos dan las mismas probabilidades relativas y pueden ser reducidos al mismo estado normalizado, salvo un factor de módulo unidad que no afecta a los resultados que puedan obtenerse.

¿Qué ocurre con un vector que no sea normalizable? (por ejemplo, el que representa a una onda plana $\exp(ipx/\hbar)$). Simplemente, que dichos vectores impropios no representan estados físicos del sistema sino, a lo sumo, situaciones ideales límite.

Una cuestión distinta es la de si es posible, y cómo, realizar físicamente un determinado estado cuántico, definido por un determinado vector de estado. Por el momento, no entraremos en esta cuestión.

Por otra parte, el postulado afirma que al representar el estado por un vector ψ , toda la información física de ese estado se puede obtener de dicho

vector de estado. Naturalmente, el objetivo del resto de los postulados será determinar cuál es esa información y cómo se obtiene.

El postulado no dice nada acerca de cuál es el espacio de Hilbert \mathcal{H} asociado a un sistema físico. Principios físicos más generales, junto con el resto de los postulados, nos dirán cuál es el espacio de Hilbert asociado a un sistema físico concreto (sin olvidar que, naturalmente, si un espacio \mathcal{H} sirve para estudiar un sistema físico concreto, también servirá para ello cualquier otro espacio \mathcal{H}' isomorfo al anterior). No obstante, la mayoría de los ejemplos con los que trabajaremos aquí se refieren a partículas que se mueven en una dimensión; en este caso, el espacio de Hilbert adecuado es el de las funciones complejas (de una variable real) de cuadrado integrable, $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.

Por último, es lógico presuponer que si el estado evoluciona en el tiempo, también lo haga el vector que lo representa. Así, diremos que en un instante t el estado estará descrito por ψ_t . Pero desde un punto de vista matemático, el tiempo es un mero parámetro. Por ejemplo: si nuestro espacio de Hilbert es $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, el estado cuántico en un instante t será una función de cuadrado integrable $\psi_t(x)$, que habitualmente se escribe $\psi(x, t)$. Esto no quiere decir que el espacio de Hilbert sea el de las funciones de dos variables reales x y t , sino el de las funciones con una única variable x , siendo t un parámetro.

Vale la pena aclarar algo más este punto. Volvamos por el momento a la descripción de un sistema clásico. Hemos dicho que el estado de una partícula clásica se representa en un espacio de fases cuyos ejes corresponden a las coordenadas de la posición y del momento lineal de la partícula. En dicho espacio de fases no hay ninguna coordenada que corresponda al tiempo. En un instante t_0 el sistema viene representado por un punto $\gamma_{t_0} = (x_0, p_0)$ de coordenadas $x_0 = x(t_0)$, $p_0 = p(t_0)$; y basta con conocer estos valores x_0 , p_0 para obtener todas las magnitudes físicas del sistema en dicho instante. En un instante posterior t_1 , el punto representativo del sistema es $\gamma_{t_1} = (x_1, p_1)$ de coordenadas $x_1 = x(t_1)$, $p_1 = p(t_1)$. La evolución dinámica del sistema se representa por una sucesión de puntos $\{\gamma_{t_0}, \gamma_{t_1}, \gamma_{t_2}, \dots, \gamma_{t_n}, \dots\}$ ordenados por un parámetro t continuo. Dicho de otra forma: de entre las infinitas sucesiones de puntos que podríamos escoger arbitrariamente en el espacio de fases, sólo una de ellas corresponde a la evolución real del sistema, y es aquella cuyos puntos sucesivos, caracterizados por los valores del parámetro t , satisfacen la ligadura impuesta por la ecuación dinámica que describe el sistema físico concreto.

Retornemos a la descripción cuántica. Ahora, el estado de una partícula viene representado por un vector ψ en un espacio de Hilbert. Tampoco el tiempo juega ningún papel en la estructura de este espacio. La evolución dinámica del sistema corresponde ahora a una sucesión de vectores normaliza-

dos $\{\psi_{t_0}, \psi_{t_1}, \psi_{t_2}, \dots, \psi_{t_n}, \dots\}$. Como en el caso anterior, de entre las infinitas sucesiones de vectores en el espacio de Hilbert, sólo una corresponderá a la evolución real del sistema. La condición de ligadura (esto es, la ecuación dinámica) que deben satisfacer los vectores de esta sucesión será objeto del postulado 5.

- Un **observable** es cualquier variable dinámica A susceptible de ser medida (la posición, el momento lineal, el momento cinético o angular, la energía mecánica, etc.). En este sentido, el tiempo t no es un observable, sino que es un parámetro que ordena los diferentes estados cuánticos por los que pasa el sistema en su evolución dinámica. En un capítulo anterior ya hemos dado razones por las que cabría esperar que los observables deberían venir representados por operadores hermíticos. Esto es precisamente el contenido del segundo postulado.

POSTULADO 2.- Sea un sistema físico cualquiera y sea \mathcal{H} el espacio de Hilbert de los estados correspondiente. Cada observable A de dicho sistema físico se representa mediante un operador lineal hermítico \hat{A} que actúa en el espacio \mathcal{H} .

Puesto que el observable \hat{A} es un operador hermítico, existe una base ortonormal del espacio de Hilbert formada por autovectores de \hat{A} . En esa base pueden haber, como vimos en el capítulo anterior, autovectores impropios. La existencia de esta base es fundamental para que la formulación de los siguientes postulados sea consistente.

Nota: A veces, por abuso del lenguaje, diremos simplemente “sea el observable \hat{A} ”, en lugar de la expresión más correcta “sea el operador \hat{A} asociado al observable A ”.

Es muy conveniente evitar la influencia de expresiones típicas de la mecánica clásica del tipo “la posición de la partícula evoluciona en el tiempo”. En M.C. la posición no evoluciona, en el sentido de que la posición es un operador cuya forma matemática no cambiará sea cual sea el instante considerado. Lo que sí evolucionará en el tiempo será el conjunto de posibles medidas de la posición o, dicho de otra forma, la distribución de probabilidad $\rho(x)$ que vimos en el primer capítulo.

La presentación que estamos haciendo aquí es la denominada *imagen de Schrödinger*, en la que los vectores de estado evolucionan en el tiempo

mientras que los operadores que representan a observables físicos no dependen explícitamente del tiempo. Existe una formulación alternativa (la llamada *imagen de Heisenberg*) en la que los vectores de estado no cambian con el tiempo mientras que sí lo hacen los operadores. En cualquier caso, los resultados físicos que se obtienen son los mismos ya que dichos resultados surgen, como veremos, de la aplicación de operadores a vectores de estado.

3.3 Valores en las medidas de un observable: Postulado 3.

• El alumno ya debe saber que los valores de algunos observables (la energía de un electrón ligado en un átomo, el momento cinético de dicho electrón, etc.) están discretizados (cuantizados). El postulado 3 de la M.C. señala qué valores se pueden obtener al hacer una medida de un observable en un sistema descrito por un estado cuántico ψ y con qué probabilidad se pueden obtener esos valores.

POSTULADO 3.- Consideremos un observable A representado por el operador hermítico \hat{A} que actúa en el espacio de Hilbert de los estados.

- Al realizar una medida del observable A en el estado cuántico ψ , los únicos resultados posibles son los autovalores (ya sean discretos o continuos) del operador \hat{A} .
- La probabilidad de obtener en dicha medida el valor a está dada por

$$\text{Prob}_{\psi}(a) = \|\hat{P}_a \psi\|^2, \quad (3.1)$$

donde \hat{P}_a es el proyector ortogonal sobre el subespacio de autovectores de \hat{A} con autovalor a , esto es, el operador que proyecta el estado ψ sobre el subespacio asociado al autovalor a .

Evidentemente, si el autovalor es no degenerado, el subespacio asociado será simplemente el subespacio de una dimensión generado por el vector propio φ_a tal que $\hat{A}\varphi_a = a\varphi_a$ y entonces

$$a \text{ no degenerado} \Rightarrow \hat{P}_a \psi = (\varphi_a, \psi) \varphi_a \Rightarrow \text{Prob}_{\psi}(a) = |(\varphi_a, \psi)|^2 \|\varphi_a\|^2 = |(\varphi_a, \psi)|^2.$$

En el caso en que el autovalor a sea degenerado (con degeneración g), utilizando una base φ_i ($i = 1, 2, \dots, g$) para el subespacio de dimensión g asociado al autovalor a , tendremos

$$a \text{ degenerado} \Rightarrow \hat{P}_a \psi = \sum_{i=1}^g (\varphi_{a,i}, \psi) \varphi_{a,i} \Rightarrow \text{Prob}_\psi(a) = \sum_{i=1}^g |(\varphi_{a,i}, \psi)|^2.$$

En primer lugar el postulado 3 afirma que al medir A sólo se puede obtener un autovalor del operador \hat{A} (bien del espectro discreto o bien del espectro continuo). La segunda parte establece el carácter netamente probabilístico del proceso de medida: aunque el estado cuántico esté bien definido, no podemos afirmar *a priori* cuál es el resultado de una medida; a lo sumo podemos establecer cuál es su probabilidad de ocurrencia. Por último, el postulado cuantifica cuál es esta probabilidad: la norma de la proyección ortogonal del estado ψ sobre el subespacio de autovectores con autovalor igual al resultado buscado de la medida.

Hay que insistir en que el postulado sólo habla de resultados de medidas realizadas en un sistema cuántico. El hecho de que el resultado de una medida sea a no quiere decir, en general, que *inmediatamente antes de la medida* el observable A tuviera un valor a . No hay ninguna razón para poder decir que un observable tiene un valor determinado antes de medirlo. Atribuir valores al sistema anteriores e independientemente de la medida es una extrapolación y un nuevo abuso de lenguaje que conduce a paradojas, como veremos más adelante. (Un caso particular, no obstante, es el caso de medidas sucesivas inmediatamente próximas que se discute en el próximo postulado).

Ejemplo: Sea \hat{A} un observable y sea ψ el estado cuántico dado por

$$\psi = \frac{1}{2} \phi_{a_1,1} + \frac{3}{2} \phi_{a_1,2} + 2i \phi_{a_2},$$

donde $\phi_{a_1,1}$ y $\phi_{a_1,2}$ son dos autoestados de \hat{A} con autovalor a_1 degenerado y ϕ_{a_2} es el único autoestado asociado al autovalor a_2 . Al medir \hat{A} en el estado ψ , ¿qué valores pueden obtenerse? ¿con qué probabilidad?

En primer lugar, nótese que ψ es una combinación lineal de autoestados normalizados de \hat{A} y que, según el enunciado, estos autoestados son mutuamente ortogonales. De hecho, la notación recuerda a la que usamos para definir una base ortonormal de autovectores. En segundo lugar es

inmediato comprobar que el estado ψ no está normalizado, por lo que hubiese sido más correcto escribir

$$\psi = N \times \left(\frac{1}{2} \phi_{a_1,1} + \frac{3}{2} \phi_{a_1,2} + 2i \phi_{a_2} \right),$$

siendo N una constante de normalización. En consecuencia, lo primero que hemos de hacer es normalizar el estado o, dicho de otra forma, hallar esa constante N . Teniendo en cuenta la ortonormalidad de los estados propios, es inmediato comprobar que

$$\|\psi\|^2 = |N|^2 \times \left(\left| \frac{1}{2} \right|^2 + \left| \frac{3}{2} \right|^2 + |2i|^2 \right) = \frac{13}{2} |N|^2$$

por lo que

$$|N| = \sqrt{\frac{2}{13}} \Rightarrow N = \sqrt{\frac{2}{13}} \exp(is),$$

donde s es un número real cualquiera. Según la discusión posterior al primer postulado, una constante multiplicativa de módulo unidad no tiene trascendencia física, por tanto escogemos $N = \sqrt{2/13}$ y nuestro estado normalizado será

$$\psi = \sqrt{\frac{1}{26}} \phi_{a_1,1} + \sqrt{\frac{9}{26}} \phi_{a_1,2} + \sqrt{\frac{16}{26}} i \phi_{a_2}.$$

Al medir \hat{A} sobre ψ sólo podremos obtener los valores a_1 y a_2 , puesto que al escribir ψ como combinación lineal de autoestados de \hat{A} sólo aparecen autoestados correspondientes a estos dos valores. De esta manera

$$\hat{P}_{a_1} \psi = \sqrt{\frac{1}{26}} \phi_{a_1,1} + \sqrt{\frac{9}{26}} \phi_{a_1,2} \Rightarrow \text{Prob}_\psi(a_1) = \|\hat{P}_{a_1} \psi\|^2 = \frac{10}{26} = \frac{5}{13}$$

y

$$\hat{P}_{a_2} \psi = \sqrt{\frac{16}{26}} i \phi_{a_2} \Rightarrow \text{Prob}_\psi(a_2) = \|\hat{P}_{a_2} \psi\|^2 = \frac{16}{26} = \frac{8}{13}.$$

Evidentemente, $\text{Prob}_\psi(a_1) + \text{Prob}_\psi(a_2) = 1$.

• Indudablemente (demuéstrese) si ψ fuera autoestado de \hat{A} con autovalor a , éste sería el único resultado posible de la medida del observable A . A los autoestados de un operador \hat{A} se les suele llamar *estados con el observable \hat{A} bien definido*. Éste sería el único caso en el que sería aceptable decir que el observable A tiene un valor concreto.

• Puesto que la medida de A sigue una ley probabilística, la distribución de probabilidad de obtener los diferentes autovalores de la magnitud A nos permite calcular el valor medio A , así como la desviación típica de dicha distribución.

El valor medio o valor esperado de \hat{A} en el estado ψ será igual a la media de un gran número de medidas del observable sobre dicho estado. Bien entendido que cada una de estas medidas se realiza en un sistema físico cuyo estado es ψ y no son medidas sucesivas en el mismo sistema puesto que, como veremos en la próxima sección, la medida afecta al estado. De esta forma, y dado que hemos dicho que $\text{Prob}_\psi(a)$ es la probabilidad de obtener el valor a , el valor medio será (siempre consideramos, recuerde, estados normalizados)

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \sum_a a \text{Prob}_\psi(a). \quad (3.2)$$

Si ahora usamos (3.1)

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \sum_a a \|\hat{P}_a \psi\|^2 = \sum_a a (\hat{P}_a \psi, \hat{P}_a \psi).$$

Ahora bien, \hat{P}_a es un operador hermítico, luego en el producto escalar lo podemos cambiar de lado:

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \sum_a a (\psi, \hat{P}_a \hat{P}_a \psi) = \sum_a a (\psi, \hat{P}_a^2 \psi) = \sum_a a (\psi, \hat{P}_a \psi),$$

donde hemos hecho uso de la propiedad de idempotencia $\hat{P}^2 = \hat{P}$ de un proyector ortogonal. Si ahora consideramos que el producto escalar es lineal

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \left(\psi, \sum_a a \hat{P}_a \psi \right),$$

y recordamos el teorema espectral, $\sum_a a \hat{P}_a = \hat{A}$, la igualdad (3.2) es completamente análoga a

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = (\psi, \hat{A} \psi). \quad (3.3)$$

Nota: evidentemente, si nuestro estado ψ está escrito como combinación lineal de autoestados de \hat{A} es mucho más cómodo usar la expresión (3.2) para el valor medio o esperado del operador \hat{A} .

Esta demostración está particularizada, por comodidad, al caso de un espectro puramente discreto o puntual, pero es fácil comprobar su validez general.

Ejercicio: Calcular el valor medio de \hat{A} para el estado dado en el ejemplo anterior.

La **desviación típica** de la distribución de probabilidad (de obtener los diferentes autovalores de la magnitud A) nos da información acerca de la dispersión de los posibles resultados de la medida del observable \hat{A} en un estado ψ . Estadísticamente, la desviación típica es la raíz cuadrada de la varianza:

$$(\Delta\hat{A})_\psi = \sqrt{\sum_a a^2 \text{Prob}_\psi(a) - \left(\sum_a a \text{Prob}_\psi(a)\right)^2}. \quad (3.4)$$

Ahora bien, (3.4) puede también escribirse como

$$(\Delta\hat{A})_\psi = \sqrt{\langle\hat{A}^2\rangle_\psi - \langle\hat{A}\rangle_\psi^2} = \sqrt{\left\langle\left(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle_\psi\right)^2\right\rangle_\psi}, \quad (3.5)$$

donde \hat{A}^2 es el cuadrado del operador \hat{A} y que, lógicamente, representa al observable A^2 .

A la desviación típica $(\Delta\hat{A})_\psi$ se le llama también **incertidumbre** del observable A .

Ejercicio: Demuestre la equivalencia de las igualdades (3.4) y (3.5).

Ejercicio: Demuestre que un observable A está bien definido en el estado ϕ si y sólo si $(\Delta\hat{A})_\phi = 0$. Sugerencia: use la definición directa (3.4).

Ejercicio: Sea el observable $f(A)$, donde f es una función real. Este observable vendrá representado por el operador hermítico $f(\hat{A})$. Demuéstrese que la probabilidad de que al medir $f(A)$ obtengamos un valor b es igual a la probabilidad de que al medir \hat{A} obtengamos un valor a tal que $f(a) = b$. (Fíjese que puede haber distintos valores a_1, a_2, \dots tales que $f(a_1) = f(a_2) = \dots = b$. Entonces la probabilidad pedida será igual a la suma de cada una de las probabilidades asociadas a los a_j). Sin embargo, demuéstrese que en general $\langle f(\hat{A}) \rangle \neq f(\langle \hat{A} \rangle)$.

Ejercicio: Sea un observable A y ϕ un autoestado de \hat{A} con autovalor a . Demuestre que ϕ también es autoestado de $f(\hat{A})$ siendo el autovalor asociado $f(a)$.

Ejercicio: Calcular la incertidumbre de \hat{A} en el estado del ejemplo anterior.

• En el enunciado del postulado 3 hemos afirmado que al medir \hat{A} se puede obtener cualquier valor espectral, discreto o continuo. Sin embargo, la igualdad (3.1) presupone que a pertenece al espectro discreto. Esto no tiene que preocuparnos. Si al medir \hat{A} pueden obtenerse valores $a(s)$ del espectro continuo

(recuerde que s era el índice que caracterizaba a los autovalores del espectro continuo), no tiene mucho sentido el preguntarse por un valor determinado, sino por un intervalo de los mismos. Así, la probabilidad de obtener un determinado valor espectral del continuo cuando se hace una medida del observable A , que está dada por (3.1), debe entenderse como

$$\text{Prob}_\psi(a(s)) ds = \|\hat{P}_{a(s)}\psi\|^2 ds, \quad (3.6)$$

donde $\text{Prob}_\psi(a(s)) ds$ es la probabilidad de obtener un valor de \hat{A} en el intervalo $[a(s), a(s + ds)]$; esto es, $\|\hat{P}_{a(s)}\psi\|^2$ es una probabilidad por unidad de intervalo o *densidad de probabilidad*. Como consecuencia (pruébese)

$$\text{Prob}_\psi([a(s_1), a(s_2)]) = \int_{s_1}^{s_2} \|\hat{P}_{a(s)}\psi\|^2 ds \quad (3.7)$$

resulta ser la probabilidad de que al medir \hat{A} se tenga algún valor en el intervalo $[a(s_1), a(s_2)]$.

Físicamente es razonable que al medir una magnitud que “pueda tomar” valores continuos sea imposible obtener un valor aislado concreto. Esto no debe confundirse con ningún tipo de limitación experimental: suponemos que el proceso de medida al que se refiere el postulado 3 es una medida *ideal* en el sentido de que no tiene error experimental alguno. Este carácter ideal implica que, en principio, nuestro aparato de medida puede discernir intervalos $[a(s), a(s + \Delta s)]$ con un valor Δs tan pequeño como se quiera. Sin embargo, el carácter continuo de los posibles resultados de la medida nos obliga a definir dicho intervalo Δs , aunque si Δs es lo bastante pequeño entonces

$$\text{Prob}_\psi[a(s), a(s + \Delta s)] \simeq \|\hat{P}_{a(s)}\psi\|^2 \Delta s$$

Ligado con este comentario surge la pregunta de si es posible calcular las probabilidades de medida en un vector no normalizable. En principio esta cuestión carecería de sentido, puesto que un vector no normalizable no representa un estado físico real. Ahora bien, ya hemos dicho que estos vectores representan en muchos casos situaciones límite y resultará posible muchas veces, aunque sea sólo de una manera formal, calcular dichas probabilidades de medida. Por poner un ejemplo, sea ψ un estado no normalizable y a un autovalor no degenerado de \hat{A} siendo ϕ_a el autoestado correspondiente. Entonces la expresión

$$\text{Prob}_\psi(a) = \frac{|\langle \phi_a, \psi \rangle|^2}{|\langle \psi, \psi \rangle|^2}, \quad (3.8)$$

puede tomar un valor finito, aunque cada uno de los factores diverja. Nótese que (3.8) es una expresión general que sirve también para estados

no normalizados; aunque conviene insistir que el no normalizar un vector únicamente complica la aplicación del formalismo.

Ejercicio: Generalizar (3.3) para un estado que no esté normalizado.

3.4 Reducción del estado cuántico: Postulado 4.

• En el postulado 3 se ha establecido que los resultados de las medidas no se pueden predecir con absoluta certeza sino que sólo se pueden predecir sus probabilidades. Sin embargo, parece lógico suponer que dos medidas consecutivas (separadas por un intervalo infinitesimal de tiempo) de una misma magnitud realizadas en el mismo sistema han de dar el mismo resultado. Si no fuese así, deberíamos renunciar a cualquier tipo de teoría predictiva en física.

A la luz del postulado anterior, la única forma de que esto ocurra es que si al medir \hat{A} obtenemos a , entonces el estado cuántico ψ cambie bruscamente de manera que inmediatamente después de la medida sea el autoestado de \hat{A} correspondiente al autovalor a . Como ya se ha comentado, ahora a es el único resultado posible de la medida del observable \hat{A} , y así se garantiza que si volvemos a medir \hat{A} transcurrido un tiempo infinitesimal volvamos a obtener a . Lógicamente, esto no tiene que ser cierto tras un intervalo finito de tiempo, puesto que el estado cuántico puede evolucionar mientras tanto. Lo anterior justifica el siguiente postulado, que establece que la medida de un observable \hat{A} origina una alteración drástica, incontrolable e irreversible del estado del sistema.

POSTULADO 4.- Si inmediatamente antes de la medida de un observable A el estado cuántico es $\psi(\tau^-)$ y el resultado de la medida es el autovalor a de \hat{A} , el estado cuántico del sistema justamente después de la medida será un autoestado de \hat{A} ; en particular será la proyección ortogonal **normalizada** del estado sobre el subespacio de autovectores con autovalor a :

$$\psi(\tau^-) = \phi \rightarrow \left(\begin{array}{l} \text{Medida de } A \\ \text{en el instante } \tau \\ \text{da el valor } a \end{array} \right) \rightarrow \psi(\tau^+) = \frac{1}{\|\hat{P}_a \phi\|} \hat{P}_a \phi. \quad (3.9)$$

Nótese que si ϕ estaba normalizado antes de la medida, la proyección $\hat{P}_a \phi$ ya no lo estará. Por esta razón, al proceso se le llama **reducción** o **colapso del estado cuántico**. Una vez realizada la medida hay que normalizar de nuevo

el estado dividiendo por la norma del nuevo estado proyectado, $\|\hat{P}_a\phi\|$. Así, pues, cada proceso de medida implica, en general, una renormalización. En esto difiere el proceso de medida, que aquí se postula, de la evolución dinámica del estado Ψ determinada por el hamiltoniano \hat{H} , que como se verá en el postulado 5, conserva la norma del estado en el tiempo.

Ejemplo: Consideremos el estado normalizado del ejemplo anterior

$$\psi = \sqrt{\frac{1}{26}}\phi_{a_1,1} + \sqrt{\frac{9}{26}}\phi_{a_1,2} + \sqrt{\frac{16}{26}}i\phi_{a_2}.$$

Si al medir \hat{A} hubiésemos obtenido el valor a_1 , el estado cuántico del sistema tras la medición sería

$$\psi(\tau^+) = \sqrt{\frac{1}{10}}\phi_{a_1,1} + \sqrt{\frac{9}{10}}\phi_{a_1,2}.$$

Sin embargo, si el resultado hubiese sido a_2 , el estado cuántico sería

$$\psi(\tau^+) = i\phi_{a_2}$$

(note que podemos eliminar el prefactor i , que es una constante multiplicativa físicamente irrelevante).

- El postulado 3 presupone que al medir el observable, nuestro aparato de medida nos da un valor concreto. Sin embargo este no es el único tipo de medida posible. Imaginemos que el observable \hat{A} tiene autovalores positivos y negativos y que nuestro aparato de medida sólo es capaz de medir el signo de \hat{A} . Ello no quiere decir que la medida sea imperfecta, sino solamente que es otro tipo de medida igualmente ideal, en la que el resultado es un valor indeterminado dentro de un intervalo. Entonces, se puede generalizar el postulado 4 de la siguiente forma:

POSTULADO 4 BIS.- Consideremos una medida de \hat{A} cuyo resultado es un valor dentro del conjunto $\{a_1, a_2, \dots, a_N\}$ pero de tal manera que la medida es incapaz de discernir un valor concreto del mismo. Entonces, si $\phi = \psi(\tau^-)$ es el estado cuántico inmediatamente antes de la medida, el estado inmediatamente posterior a ésta será

$$\psi(\tau^+) = \frac{1}{\left\| \sum_{j=1}^N \hat{P}_{a_j} \phi \right\|} \sum_{j=1}^N \hat{P}_{a_j} \phi. \quad (3.10)$$

Ejercicio: A la vista del anterior postulado, extender la formulación del cuarto postulado para valores del espectro continuo del operador \hat{A} .

Ejemplo: Consideremos el estado cuántico normalizado

$$\Psi_0 = \frac{1}{2} \phi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \phi_2 + \frac{\exp(i\pi/6)}{2} \phi_3,$$

donde ϕ_j es un autoestado normalizado del observable \hat{A} con autovalores $-a$ para ϕ_1 , a para ϕ_2 y $2a$ para ϕ_3 .

- Al medir \hat{A} en el estado Ψ_0 ¿qué valores pueden obtenerse y con qué probabilidad?
- ¿Cuál es el valor esperado de \hat{A} y su incertidumbre en el estado Ψ_0 ?
- Si al medir \hat{A} se tiene el resultado a ¿cuál es el estado cuántico justo después de la medición?
- Sin embargo, si al medir \hat{A} en el estado Ψ_0 se tiene el resultado “un valor positivo”, ¿cuál es el estado cuántico justo después de la medida?, ¿cuál es el valor esperado de \hat{A} en este nuevo estado?

a) De manera directa

$$\text{Prob}_{\Psi_0}(-a) = \frac{1}{4}; \text{Prob}_{\Psi_0}(a) = \frac{1}{2}; \text{Prob}_{\Psi_0}(2a) = \frac{1}{4}.$$

b) También de manera inmediata

$$\langle \hat{A} \rangle_{\Psi_0} = \frac{1}{4} \times (-a) + \frac{1}{2} \times (a) + \frac{1}{4} \times (2a) = \frac{3}{4}a,$$

mientras que

$$\langle \hat{A}^2 \rangle_{\Psi_0} = \frac{1}{4} \times (-a)^2 + \frac{1}{2} \times (a)^2 + \frac{1}{4} \times (2a)^2 = \frac{7}{4}a^2.$$

Por lo tanto

$$(\Delta \hat{A})_{\Psi_0} = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle_{\Psi_0} - \langle \hat{A} \rangle_{\Psi_0}^2} = \sqrt{\frac{7}{4}a^2 - \left(\frac{3}{4}a\right)^2} = \frac{\sqrt{19}}{4}a.$$

- Por aplicación directa del postulado 4 de la M.C., el estado después de la medida es ϕ_2 .

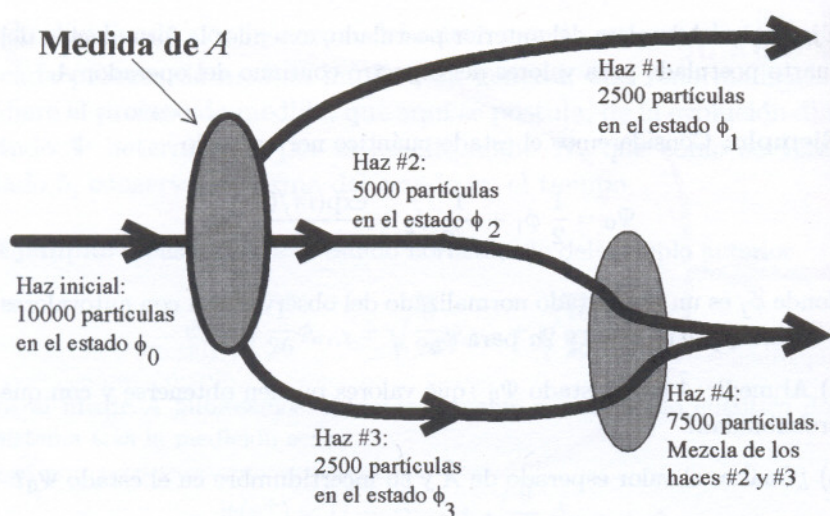


Fig. 3.1. El dispositivo de medida desvía cada partícula en función del resultado $-a$, a o $2a$ de la medida de \hat{A} . El segundo dispositivo mezcla las partículas para las que la medida de \hat{A} había dado resultado positivo (>0).

d) En este caso, el estado es

$$\begin{aligned}\Psi_F &= \frac{1}{\left\| \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2 + \frac{\exp(i\pi/6)}{2}\phi_3 \right\|} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2 + \frac{\exp(i\pi/6)}{2}\phi_3 \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\left| \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 + \left| \frac{\exp(i\pi/6)}{2} \right|^2}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2 + \frac{\exp(i\pi/6)}{2}\phi_3 \right) \\ &= \sqrt{\frac{2}{3}}\phi_2 + \frac{\exp(i\pi/6)}{\sqrt{3}}\phi_3\end{aligned}$$

y entonces

$$\langle \hat{A} \rangle_{\Psi_F} = \frac{2}{3} \times (a) + \frac{1}{3} \times (2a) = \frac{4}{3}a.$$

• Imaginemos ahora un haz de partículas independientes, todas ellas en el mismo estado normalizado

$$\Psi_0 = \frac{1}{2}\phi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2 + \frac{\exp(i\pi/6)}{2}\phi_3,$$

donde la interpretación de los estados ϕ_j es la del ejemplo anterior. Supongamos que este haz atraviesa un dispositivo que efectúa sobre cada partícula una

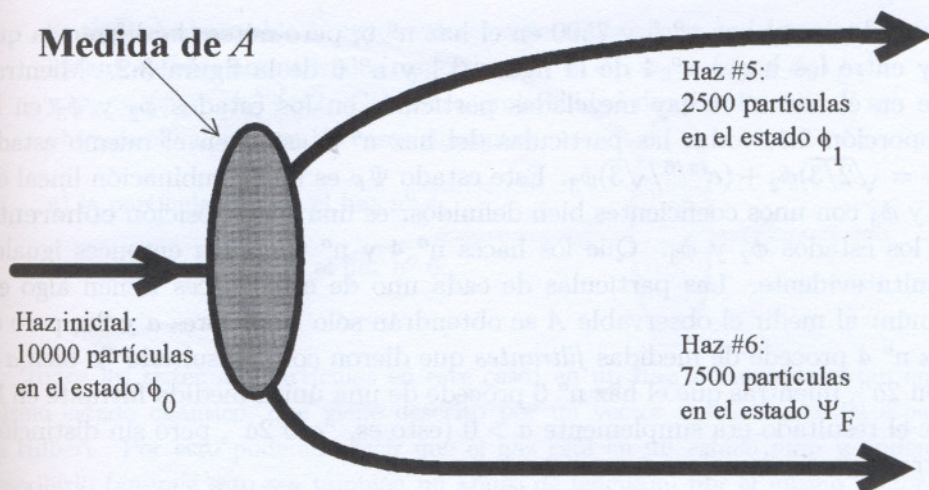


Fig. 3.2. El dispositivo de medida desvía ahora cada partícula en función del signo de la medida de \hat{A} , pero dicho dispositivo no es capaz de discernir valores concretos de \hat{A} .

medida de \hat{A} (véase la figura 3.1). El dispositivo es tal que cada partícula sale en un haz distinto según haya sido el resultado de la medida. De este modo, el único haz entrante se separa en 3 haces: el primero (nº 1) contiene partículas en el estado cuántico ϕ_1 ; el segundo (nº 2) está formado por partículas en el estado ϕ_2 ; por último, el tercer haz (nº 3) contiene partículas en el estado ϕ_3 . Si el haz primitivo está formado por 10000 partículas, como $N = 10000$ es un número grande, podemos afirmar que aproximadamente en el haz nº 1 hay $N \times 1/4 = 2500$ partículas, en el nº 2 hay $N \times 1/2 = 5000$ partículas y en el nº 3 hay $N \times 1/4 = 2500$ partículas. Para terminar este experimento, mediante un segundo dispositivo **nos limitamos a reunir las partículas**, sin modificar sus estados cuánticos, de los haces nº 2 y nº 3. En este nuevo haz (nº 4) habrá 7500 partículas, de las cuales 2500 estarán en el estado ϕ_3 y las otras 5000 en el estado ϕ_2 . Diremos que este último haz está formado por una superposición **incoherente** de partículas en los estados ϕ_2 y ϕ_3 en la proporción 2:1.

Analicemos ahora un segundo experimento. De nuevo tenemos 10000 partículas en el estado Ψ_0 que atraviesan un dispositivo que mide el signo del observable \hat{A} (figura 3.2); si es negativo, desvía la partícula hacia arriba y si es positivo, hacia abajo. De esta manera, el haz primitivo se rompe en dos haces: las partículas del haz nº 5 estarán en el estado ϕ_1 , mientras que las partículas del haz nº 6 están en el estado Ψ_F . Naturalmente, hay 2500

partículas en el haz n° 5 y 7500 en el haz n° 6; pero nótese la diferencia que hay entre los haces n° 4 de la figura 3.1 y n° 6 de la figura 3.2. Mientras que en el haz n° 4 hay mezcladas partículas en los estados ϕ_2 y ϕ_3 en la proporción 2:1, todas las partículas del haz n° 6 están en el mismo estado $\Psi_F = \sqrt{2/3}\phi_2 + (e^{i\pi/6}/\sqrt{3})\phi_3$. Este estado Ψ_F es una combinación lineal de ϕ_2 y ϕ_3 con unos coeficientes bien definidos: es una superposición **coherente** de los estados ϕ_2 y ϕ_3 . Que los haces n° 4 y n° 6 no son entonces iguales resulta evidente. Las partículas de cada uno de estos haces tienen algo en común: al medir el observable A se obtendrán sólo los valores a y $2a$; pero el haz n° 4 procede de medidas *filtrantes* que dieron como resultado “o bien a o bien $2a$ ”, mientras que el haz n° 6 procede de una única medida filtrante en la que el resultado era simplemente $a > 0$ (esto es, “ a o $2a$ ”, pero sin distinción entre ambos valores).

Para terminar, consideremos un segundo observable \hat{B} tal que $\hat{B}\Psi_F = b\Psi_F$ siendo Ψ_F el único autoestado de \hat{B} con autovalor b (esto es, b es un autovalor no degenerado). Por tanto, al medir \hat{B} sobre una partícula del haz n° 6 obtendremos siempre el resultado b . Sin embargo, si medimos este observable sobre las partículas del haz n° 4 existe una probabilidad no nula de que el resultado de la medida no sea b . En efecto, hemos visto que en el haz n° 4 hay partículas con estados bien definidos ϕ_2 y ϕ_3 en proporción 2:1. Es decir, hay una probabilidad $\text{Prob}_{cl}(\phi_2) = 2/3$ de que la partícula que llega al detector que mide \hat{B} esté en el estado ϕ_2 , y una probabilidad $\text{Prob}_{cl}(\phi_3) = 1/3$ de que la partícula llegue en el estado ϕ_3 . Las hemos denominado Prob_{cl} ya que estas probabilidades son totalmente clásicas: hasta ahora se trata de un caso semejante a sacar una bola negra (o una bola blanca) de un saco en el que hay bolas blancas y bolas negras en proporción 2:1. Ahora bien, si resulta que la partícula que llega al detector es una partícula en el estado ϕ_2 , la probabilidad *cuántica* de obtener el resultado b en la medida de \hat{B} es $\text{Prob}_{\phi_2}^{(B)}(b) = |(\Psi_F, \phi_2)|^2 = 2/3$. Por otra parte, si la partícula que llega al detector está en el estado ϕ_3 , la probabilidad de obtener b es $\text{Prob}_{\phi_3}^{(B)}(b) = |(\Psi_F, \phi_3)|^2 = 1/3$. Combinando estos resultados tenemos que la probabilidad global de obtener el resultado b en medidas realizadas sobre el haz n° 4 será

$$\begin{aligned} \text{Prob}_{n^{\circ}4}(b) &= \left(\text{Prob}_{cl}(\phi_2) \times \text{Prob}_{\phi_2}^{(B)}(b) \right) + \left(\text{Prob}_{cl}(\phi_3) \times \text{Prob}_{\phi_3}^{(B)}(b) \right) \\ &= \left(\frac{2}{3} \times \frac{2}{3} \right) + \left(\frac{1}{3} \times \frac{1}{3} \right) = \frac{5}{9}. \end{aligned}$$

Ejercicio: Consideremos los haces n° 4 y n° 6 de la discusión anterior.

Se tiene el observable \hat{C} cuyos valores espectrales son c_1, c_2 y c_3 siendo los autoestados normalizados respectivos $\varphi_1 = \phi_1$, $\varphi_2 = (\phi_2 + \phi_3)/\sqrt{2}$ y $\varphi_3 = (\phi_2 - \phi_3)/\sqrt{2}$. Calcule la probabilidad de que al medir \hat{C} se obtenga el valor c_3 en los casos siguientes:

a) la partícula está en el haz n° 4

b) la partícula está en el haz n° 6.

Todos los sistemas (partículas en este caso) en un **haz coherente** están en el mismo estado cuántico, que viene descrito por un vector normalizado del espacio de Hilbert. Por esto podemos decir que el haz está en un *estado puro* y podemos describirlo (aunque esto sea también un abuso de lenguaje) por el mismo vector de estado que describe a cada una de sus partículas. Las probabilidades de obtener resultados de medidas de cualquier observable para cualquier partícula del haz se calculan de acuerdo con las reglas ya vistas.

Por el contrario, las partículas en un **haz incoherente** están en estados cuánticos distintos.¹ Por lo tanto, el haz no está en un estado puro y no pueden describirse por un vector del espacio de Hilbert. Se dice entonces el haz está en un *estado mezcla*, ya que es imposible discernir a priori cuál es el estado de una partícula del haz escogida aleatoriamente. Para obtener en este caso las probabilidades de resultados de medidas sobre una partícula del haz debemos considerar primero las probabilidades de obtener dicho valor en cada uno de los estados cuánticos de la mezcla y multiplicarlas por el peso estadístico de cada uno de dichos estados en la mezcla. La situación de un estado mezcla es muy similar a la que ocurre en mecánica estadística para un colectivo en equilibrio térmico. En este colectivo tendremos N partículas, cada una de ellas está en un estado bien definido; pero la física estadística sólo nos informa del porcentaje de partículas que se encuentran en cada estado. En este sentido, las partículas del haz n°4 son una mezcla estadística de partículas en los estados ϕ_2 y ϕ_3 . Naturalmente nada impide que, a diferencia del presente ejemplo, dicha mezcla estadística esté formada por estados no ortogonales entre sí. Por ejemplo, podríamos reunir dos haces procedentes de aparatos que miden observables distintos y, en consecuencia, los estados de la mezcla no tendrían por qué ser ortogonales.

Existe un formalismo que permite un tratamiento unificado de los estados puros y los estados mezcla. Este formalismo, basado en el llamado *operador o matriz densidad*, será estudiado en un curso posterior.

¹Una discusión complementaria sobre la diferencia entre superposición coherente y superposición incoherente de sistemas puede verse en las secciones 6.20 a 6.40 del libro de Wichmann, volumen 4 del Curso de Física de Berkeley (editorial Reverté).

3.5 Compatibilidad. Relación de incertidumbre generalizada

• En esta sección analizaremos uno de los temas más importantes del formalismo cuántico: el problema de la medición simultánea de dos observables, que dará lugar a las relaciones de incertidumbre de Heisenberg. Antes de seguir adelante, le recomendamos que repase en el capítulo anterior el apartado dedicado a la conmutabilidad de operadores.

Sean dos observables \hat{A} y \hat{B} y un estado cuántico ϕ . En el instante τ^- medimos el observable \hat{A} , obteniendo el autovalor a . Inmediatamente después, en el instante τ , medimos el observable \hat{B} y el resultado es el valor b . Por último, en el instante τ^+ volvemos a medir \hat{A} . Diremos que \hat{A} y \hat{B} son **medibles simultáneamente** si tenemos la seguridad de que, **sea cual sea el estado cuántico primitivo** ϕ , el resultado de esta segunda medida de \hat{A} será el valor a que se obtuvo en la primera medida de \hat{A} . Dicho de otra forma, una medida de \hat{B} no interfiere en el resultado de una medida de \hat{A} inmediatamente posterior.

Analicemos este proceso de medidas sucesivas usando los dos postulados anteriores. Tras la primera medida de \hat{A} , el estado cuántico ϕ se ha *colapsado* convirtiéndose en un autoestado $\psi_{a,1}$ de \hat{A} con autovalor a (etiquetamos este autoestado con “ $a, 1$ ” porque, en principio, a puede ser no degenerado). Por lo tanto

$$\psi_{a,1} \propto \hat{P}_a^{(\hat{A})} \phi \quad \text{tal que} \quad \hat{A} \psi_{a,1} = a \psi_{a,1}. \quad (3.11)$$

Inmediatamente después, medimos \hat{B} y tras esta medida el estado $\psi_{a,1}$ se ha reducido a un autoestado $\varphi_{b,1}$ de \hat{B} con autovalor b . Este nuevo estado está dado por

$$\varphi_{b,1} \propto \hat{P}_b^{(\hat{B})} \psi_{a,1} \propto \hat{P}_b^{(\hat{B})} \hat{P}_a^{(\hat{A})} \phi \quad \text{tal que} \quad \hat{B} \varphi_{b,1} = b \varphi_{b,1}. \quad (3.12)$$

Entonces, según la definición, \hat{A} y \hat{B} serán medibles simultáneamente si al medir \hat{A} en el estado $\varphi_{b,1}$ obtenemos con completa seguridad el valor a , esto es, si $\varphi_{b,1}$ es autoestado de \hat{A} con autovalor a . Por el contrario, si \hat{A} y \hat{B} no fuesen medibles simultáneamente, entonces $\varphi_{b,1}$ no tendría por qué ser autoestado de \hat{A} con autovalor a .

En otras palabras, si los observables \hat{A} y \hat{B} son compatibles entonces $\varphi_{b,1} \propto \hat{P}_b^{(\hat{B})} \psi_{a,1}$ pertenece al subespacio $\mathcal{E}_a \subset \mathcal{H}$ que corresponde al valor propio a del operador \hat{A} . Podemos generalizar esto en la siguiente

DEFINICIÓN: Dos observables \hat{A} y \hat{B} son medibles simultáneamente si dado cualquier autoestado ψ_a de \hat{A} , con autovalor a , su proyección sobre cualquier subespacio de autoestados de \hat{B} sigue siendo autoestado de \hat{A} con igual autovalor.

Puesto que $\varphi_{b,1} \in \mathcal{E}_a$ se tiene $\hat{P}_a^{(\hat{A})} \varphi_{b,1} = \varphi_{b,1}$, es decir,

$$\hat{P}_a^{(\hat{A})} (\hat{P}_b^{(\hat{B})} \hat{P}_a^{(\hat{A})} \phi) = (\hat{P}_b^{(\hat{B})} \hat{P}_a^{(\hat{A})} \phi) \Rightarrow \hat{P}_a^{(\hat{A})} \hat{P}_b^{(\hat{B})} \hat{P}_a^{(\hat{A})} = \hat{P}_b^{(\hat{B})} \hat{P}_a^{(\hat{A})}. \quad (3.13)$$

Dado que todos los proyectores son operadores hermíticos, el producto $\hat{P}_b^{(\hat{B})} \hat{P}_a^{(\hat{A})}$ es hermítico ya que es igual a un producto cíclico de operadores hermíticos. Por tanto

$$\hat{P}_b^{(\hat{B})} \hat{P}_a^{(\hat{A})} = (\hat{P}_b^{(\hat{B})} \hat{P}_a^{(\hat{A})})^\dagger = (\hat{P}_a^{(\hat{A})})^\dagger (\hat{P}_b^{(\hat{B})})^\dagger = \hat{P}_a^{(\hat{A})} \hat{P}_b^{(\hat{B})},$$

esto es, cualquier proyector espectral de \hat{B} conmuta con cualquier proyector espectral de \hat{A} . Igualmente

$$\hat{P}_a^{(\hat{A})} \hat{P}_b^{(\hat{B})} = \hat{P}_b^{(\hat{B})} \hat{P}_a^{(\hat{A})} \Rightarrow \hat{P}_a^{(\hat{A})} \hat{P}_b^{(\hat{B})} \hat{P}_a^{(\hat{A})} = \hat{P}_b^{(\hat{B})} \hat{P}_a^{(\hat{A})} \hat{P}_a^{(\hat{A})} = \hat{P}_b^{(\hat{B})} \hat{P}_a^{(\hat{A})},$$

donde hemos usado la propiedad de idempotencia de un proyector. Pero la anterior es precisamente la igualdad (3.13). En consecuencia:

TEOREMA: Sean \hat{A} y \hat{B} dos observables. Las dos siguientes afirmaciones son equivalentes:

- \hat{A} y \hat{B} son dos observables medibles simultáneamente.
- Cualquier proyector espectral de \hat{A} conmuta con cualquier proyector espectral de \hat{B} .

Si ahora recordamos (véase el apartado 2.16) que si cualquier proyector espectral de \hat{A} conmuta con cualquiera de \hat{B} entonces \hat{A} y \hat{B} son compatibles (y recíprocamente), obtenemos el importantísimo

TEOREMA (de compatibilidad): Sean \hat{A} y \hat{B} dos observables. Todas las afirmaciones siguientes son equivalentes:

- \hat{A} y \hat{B} son dos observables medibles simultáneamente.

- b) Cualquier proyector espectral de \hat{A} conmuta con cualquier proyector espectral de \hat{B} .
- c) Existe una base ortonormal de autoestados simultáneos de \hat{A} y \hat{B} .
- d) \hat{A} y \hat{B} son compatibles, esto es, conmutan: $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

• Visto este último teorema, que nos permite caracterizar matemáticamente dos observables medibles simultáneamente, analicemos ahora con más detalle el concepto de simultaneidad que hemos introducido. Sean \hat{A} y \hat{B} dos observables compatibles. Hemos de tener en cuenta que \hat{A} y \hat{B} no se pueden medir “a la vez” (excepto en el caso de que $\hat{A} = f(\hat{B})$), puesto que la medición de \hat{A} implica la interacción del sistema cuántico con un dispositivo que, en general, será distinto del dispositivo requerido para medir \hat{B} . En consecuencia, por medida simultánea de \hat{A} y \hat{B} entendemos que medimos primero un observable e, **inmediatamente después** de que se haya producido el colapso cuántico correspondiente, medimos el otro. Supongamos que, en el estado cuántico ϕ , primero medimos \hat{A} , obteniendo a , y a continuación medimos \hat{B} siendo el resultado b . El estado cuántico final será

$$\psi_{a,b} \propto \hat{P}_b \hat{P}_a \phi.$$

Si hubiésemos cambiado el orden de las medidas, pero con iguales resultados b y a

$$\psi_{b,a} \propto \hat{P}_a \hat{P}_b \phi,$$

pero como \hat{P}_a y \hat{P}_b conmutan, en cualquiera de los dos casos el estado final es el mismo. Nuestro concepto de simultaneidad implica que no importa el orden en el que se midan estos dos observables. Dicho de otra forma, si los resultados de las medidas son a y b , el estado final es autoestado común de \hat{A} y \hat{B} aunque no podemos inferir cuál fue el observable que se midió en primer lugar.

Según el espíritu del postulado 3, medir un observable \hat{B} *con total precisión* significa reducir un estado cuántico a otro que sea autoestado de \hat{B} . Por tanto, si \hat{A} y \hat{B} son compatibles, los podremos medir simultáneamente con total precisión, puesto que siempre podremos obtener un autoestado simultáneo de \hat{A} y de \hat{B} .

Por otra parte, si \hat{A} y \hat{B} no son compatibles, no siempre los podremos medir simultáneamente (con total precisión, que en este contexto es una redundancia). Peor aún, si medimos \hat{B} en un autoestado ψ_a de \hat{A} , ni siquiera

tendremos la seguridad de que el valor esperado de \hat{A} tras esta medida siga siendo a (lo veremos en un próximo ejemplo). En general, esta medida de \hat{B} hará que “se pierda” toda la información de la medida previa de \hat{A} .

- El concepto de compatibilidad que hemos analizado está directamente relacionado con el de *preparación* de un estado. Supongamos que tenemos un conjunto de partículas independientes, cada una de ellas en un estado cuántico distinto. Sobre estas partículas realizamos una *medida filtrante* de un observable \hat{A} que selecciona sólo aquellas partículas para las que el resultado de esa medida haya sido un valor concreto a . Sabemos que todas estas partículas “filtradas” están en un estado cuyo autovalor a puede ser degenerado, por lo que no podemos afirmar que todas las partículas estén en el *mismo estado*, sino en el subespacio de Hilbert asociado a dicho autovalor. Para romper esta ambigüedad, efectuamos justamente a continuación una segunda medida filtrante de un observable \hat{B} , compatible con \hat{A} , con valor b . Las partículas seleccionadas tras las dos medidas están en un estado que es autoestado simultáneo de \hat{A} y de \hat{B} . Podemos seguir con el proceso hasta completar un conjunto de medidas de observables cuyos operadores constituyen un *conjunto completo de observables compatibles* (CCOC). Así, si a, b, c, \dots son los resultados de las distintas medidas filtrantes de los observables $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$ del CCOC, el estado final tras el proceso está unívocamente definido: es el único autoestado común de $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$ con autovalores a, b, c, \dots . De esta forma, tras esta *medida maximal* hemos preparado un estado cuántico: *todas* las partículas que hayan “sobrevivido” a todos los filtros están en el *mismo estado*. Nótese que, por una afortunada casualidad, CCOC significa igualmente “conjunto completo de observables compatibles” y “conjunto completo de operadores compatibles”, conceptos que en nuestro formalismo son equivalentes.

- Dados dos observables \hat{A} y \hat{B} consideremos un tercer observable construido a partir de ellos: $\hat{C} = -i[\hat{A}, \hat{B}]$, (\hat{C} es hermítico, como vimos en el capítulo anterior). Sea entonces un estado normalizado cualquiera ψ . Se tiene otro teorema fundamental:

TEOREMA (relación de incertidumbre generalizada): Sean \hat{A} y \hat{B} dos observables. Si $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$, entonces para cualquier estado ψ se cumple que

$$(\Delta\hat{A})_\psi \cdot (\Delta\hat{B})_\psi \geq \frac{1}{2} \left| \langle \hat{C} \rangle_\psi \right| \quad (3.14)$$

o, equivalentemente, puesto que el módulo de i es la unidad

$$(\Delta \hat{A})_{\psi} \cdot (\Delta \hat{B})_{\psi} \geq \frac{1}{2} \left| (\psi, [\hat{A}, \hat{B}] \psi) \right|. \quad (3.15)$$

La demostración, es la siguiente. Dado el estado ψ definamos los operadores hermíticos

$$\hat{A}' = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_{\psi} \quad ; \quad \hat{B}' = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle_{\psi}.$$

Sabemos de la ecuación (3.5) que

$$(\Delta \hat{A})_{\psi} = \|\hat{A}'\psi\| \quad ; \quad (\Delta \hat{B})_{\psi} = \|\hat{B}'\psi\| \quad (3.16)$$

mientras que, como todo operador conmuta con un escalar (y $\langle \hat{B} \rangle_{\psi}$, $\langle \hat{A} \rangle_{\psi}$ lo son)

$$[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}', \hat{B}']. \quad (3.17)$$

De esta forma

$$\begin{aligned} \left| (\psi, [\hat{A}, \hat{B}] \psi) \right| &= \left| (\psi, [\hat{A}', \hat{B}'] \psi) \right| = \left| (\psi, \hat{A}'\hat{B}'\psi) - (\psi, \hat{B}'\hat{A}'\psi) \right| = \\ &= \left| (\psi, \hat{A}'\hat{B}'\psi) - (\psi, \hat{A}'\hat{B}'\psi)^* \right| = \left| (\hat{A}'\psi, \hat{B}'\psi) - (\hat{A}'\psi, \hat{B}'\psi)^* \right| = \\ &= 2 \left| \text{Im} (\hat{A}'\psi, \hat{B}'\psi) \right|. \end{aligned}$$

Ahora bien, para cualquier número complejo z se cumple la desigualdad $|z| \geq |\text{Im} z|$. Por tanto

$$\left| (\psi, [\hat{A}, \hat{B}] \psi) \right| \leq 2 \left| (\hat{A}'\psi, \hat{B}'\psi) \right|.$$

Utilizando la desigualdad de Schwarz

$$\left| (\hat{A}'\psi, \hat{B}'\psi) \right| \leq \|\hat{A}'\psi\| \cdot \|\hat{B}'\psi\|,$$

y usando (3.16)

$$\left| (\hat{A}'\psi, \hat{B}'\psi) \right| \leq (\Delta \hat{A})_{\psi} \cdot (\Delta \hat{B})_{\psi}.$$

Llegamos finalmente a que

$$\left| (\psi, [\hat{A}, \hat{B}] \psi) \right| \leq 2 (\Delta \hat{A})_{\psi} \cdot (\Delta \hat{B})_{\psi},$$

que es la desigualdad (3.15).

La relación de incertidumbre generalizada (3.15) nos informa sobre las propiedades de las dos distribuciones de probabilidad asociadas a las medidas de los dos observables \hat{A} y \hat{B} en un estado. Ello quiere decir que si conocemos la incertidumbre de un observable \hat{A} en un estado, entonces la incertidumbre de \hat{B} está acotada inferiormente.

Un caso muy importante será aquel en el que $[\hat{A}, \hat{B}] = ic$, siendo c un escalar real. En este caso puede demostrarse que \hat{A} y \hat{B} tendrán espectro puramente continuo (se demostrará en el apartado 3.10, después de enunciarse el postulado 6, y es muy importante porque es el caso de los operadores de posición y de momento lineal). La relación de incertidumbre generalizada nos dice entonces que el producto de las incertidumbres de \hat{A} y de \hat{B} estará acotado inferiormente para cualquier estado, siendo $|c|/2$ dicha cota inferior. Como consecuencia, si ψ_a es un autoestado (no normalizable) de \hat{A} , no quedará más remedio que la incertidumbre de \hat{B} en dicho estado sea infinita. Diremos entonces que el valor de \hat{B} está completamente indefinido en el estado ψ_a .

Es importante el detalle técnico referente a la no normalización de ψ_a .

En caso contrario podríamos hacer el siguiente desarrollo:

$$\begin{aligned} (\psi_a, [\hat{A}, \hat{B}] \psi_a) &= (\psi_a, \hat{A}\hat{B}\psi_a) - (\psi_a, \hat{B}\hat{A}\psi_a) \\ &= (\hat{A}\psi_a, \hat{B}\psi_a) - (\psi_a, \hat{B}\hat{A}\psi_a), \end{aligned}$$

donde hemos utilizado el hecho de que \hat{A} es hermítico. Pero como $\hat{A}\psi_a = a\psi_a$

$$(\psi_a, [\hat{A}, \hat{B}] \psi_a) = a(\psi_a, \hat{B}\psi_a) - a(\psi_a, \hat{B}\psi_a) = 0,$$

en contradicción con $[\hat{A}, \hat{B}] = ic$. La solución a esta contradicción está en que, puesto que ψ_a no es un vector del espacio de Hilbert, no podemos tratar \hat{A} actuando sobre dicho vector como si fuese un operador hermítico. Recordemos que la igualdad

$$(\phi, \hat{A}\varphi) = (\hat{A}\phi, \varphi)$$

sólo es válida para vectores del dominio de \hat{A} , que son los estados normalizables de \mathcal{H} .

3.6 El espacio de los estados de una partícula con espín.*

Los espectros de átomos sometidos a un campo magnético muestran ciertas características especiales. Esto se explica por la existencia de un momento

magnético asociado a los átomos, que interacciona con el campo magnético externo. El momento magnético es la suma de dos contribuciones: la primera es la debida a una carga eléctrica (el electrón, en este caso) que describe una órbita, y es así proporcional al momento angular orbital; la segunda es un momento magnético *intrínseco* del electrón. Este momento magnético intrínseco se escribe como

$$\vec{\mu}_e = -\frac{g_e \mu_B}{\hbar} \vec{s}, \quad (3.18)$$

donde $g_e \simeq 2$ es un factor adimensional, denominado *factor giromagnético del electrón*, \vec{s} es el momento angular intrínseco o *espín* del electrón, y

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} \simeq 6 \times 10^{-9} \text{ eV/Gauss} \quad (3.19)$$

es el llamado *magnetón de Bohr* del electrón (se ha dado su valor en el sistema Gaussiano de unidades). El signo menos de (3.18) proviene del hecho de que la carga del electrón es $-e$. Puesto que el electrón posee un momento magnético $\vec{\mu}_e$, la energía de interacción con un campo magnético \vec{B} será

$$E = -\vec{\mu}_e \cdot \vec{B} = g_e \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{s} \cdot \vec{B}. \quad (3.20)$$

Nota: El protón también tiene este momento magnético intrínseco, pero en su caso el magnetón de Bohr es de signo opuesto y unas 2000 veces menor ya que la masa del protón es aproximadamente 2000 veces mayor. El neutrón, a pesar de ser una partícula neutra, también tiene un momento magnético proporcional a su momento de espín \vec{s} . La explicación de este momento magnético "anómalo" es que el neutrón no es una partícula elemental en sentido estricto, al estar compuesto de *quarks*, cada uno de ellos con espín y carga neta. Admitamos, pues, en general que las partículas tienen un momento magnético intrínseco que es proporcional a su vector de espín, dependiendo la constante de proporcionalidad de las propiedades de la partícula. Esto también será cierto para sistemas formados por varias partículas, como un núcleo o un átomo.

Imaginemos ahora que un haz lineal muy poco intenso de electrones se hace pasar por un dispositivo en el que existe un campo magnético no uniforme orientado en una dirección, que vamos a suponer es el eje Z (este tipo de dispositivos reciben el nombre general de Stern-Gerlach²). La energía de

²Téngase en cuenta que, estrictamente hablando, un campo no uniforme no puede tener una única componente, debido a la relación de Maxwell $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$. Sin embargo, sí podemos hacer que una de las componentes del campo sea mucho mayor que las otras dos.

interacción del electrón con el campo será

$$E = -\vec{\mu}_e \cdot \vec{B} = g_e \frac{\mu_B}{\hbar} s_z B(z),$$

donde s_z es la componente z del vector de espín. Si el campo magnético no es uniforme, sino que varía a lo largo de la dirección z , aparecerá una fuerza en dicha dirección de intensidad

$$F(z) = g_e \frac{\mu_B}{\hbar} s_z \frac{\partial B(z)}{\partial z}.$$

Desde un punto de vista clásico la componente s_z del espín, es decir, la proyección del vector \vec{s} sobre el eje vertical, podría tomar cualquier valor continuo entre $+\lvert\vec{s}\rvert$ y $-\lvert\vec{s}\rvert$, y el haz de electrones se abriría en un abanico continuo al atravesar el campo. Sin embargo, el experimento muestra que el haz inicial se desdobra tan sólo en dos haces bien definidos. El análisis de los resultados muestra que dichos haces corresponden a valores de s_z iguales a $+\hbar/2$ y $-\hbar/2$.

Nota: en realidad, la descripción que estamos dando es una descripción ideal. En la práctica, es imposible hacer un experimento de Stern-Gerlach con electrones porque la fuerza de Lorentz sobre una partícula cargada enmascararía la fuerza debida al momento magnético. El experimento de Stern-Gerlach original (1921) se llevó a cabo con átomos de plata neutros en su estado de menor energía, para los que la situación es completamente similar a la que aquí estamos tratando.

A la luz de los postulados de la M.C. podemos analizar el experimento como sigue. Al hacer pasar un haz de electrones por un dispositivo de Stern-Gerlach *estamos midiendo una componente de su espín*. En función del resultado de la medida, el electrón se desvía de una forma u otra. Por tanto, debemos concluir que si \hat{s}_z es el operador asociado al observable s_z , éste sólo tiene dos autovalores: $\pm\hbar/2$. Por simetría, podemos decir lo mismo de cualquier otra componente del espín \vec{s} .

Estos resultados nos sugieren que el *espacio de los estados del espín* (esto es, dejando de lado cualquier consideración referida al estado mecánico de la partícula) de un electrón ha ser un espacio de Hilbert de dimensión 2. Podemos, pues, usar el espacio $\mathbb{C} \times \mathbb{C}$, formado por el conjunto de pares de números complejos (véase el apartado 2.7 sobre isomorfismos entre espacios de

Hilbert). Si tomamos como base de dicho espacio de Hilbert la de autoestados de s_z tendremos que el estado

$$\psi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ representa el estado de espín con } s_z = \frac{\hbar}{2} \text{ bien definido}$$

mientras que el estado

$$\psi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ representa el estado de espín con } s_z = -\frac{\hbar}{2} \text{ bien definido,}$$

ya que estamos usando pares de números complejos para describir el espín. En esta base, el operador asociado a s_z será

$$\hat{s}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.21)$$

como se puede verificar de manera directa, esto es, que $\hat{s}_z \psi_{\pm} = \pm (\hbar/2) \psi_{\pm}$.

Supongamos ahora que uno de los dos haces salientes de un Stern-Gerlach orientado en la dirección Z (por ejemplo, el que está formado por electrones en el estado de espín ψ_+) atraviesa otro dispositivo, pero orientado en la dirección X . Se observa entonces que cada uno de los dos haces salientes tiene igual intensidad. Lo mismo sucede para el otro haz. Ello quiere decir que el valor esperado de \hat{s}_x es nulo para un autoestado de s_z :

$$(\psi_+, \hat{s}_x \psi_+) = (\psi_-, \hat{s}_x \psi_-) = 0.$$

Idéntico resultado se tiene para un Stern-Gerlach orientado en el eje Y o en cualquier otra dirección perpendicular a Z . En general, si ψ es autoestado de una componente del espín, el valor esperado de cualquier otra componente perpendicular del espín es nulo. La asignación (debida a Pauli) de los operadores $\hat{s}_{x,y}$ asociados a los observables $s_{x,y}$

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

cumple todas estas propiedades (además de otras más generales que se estudiarán en cursos más avanzados).

El espacio de Hilbert de una partícula en una dimensión espacial es el de las funciones $\phi(x)$ de cuadrado integrable. Si dicha partícula tiene espín $s = 1/2$ (en referencia a los valores que toma una cualquiera de las componentes de \vec{s}) y queremos incluirlo en nuestra

descripción, tendremos que usar el producto tensorial de los espacios $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ y $\mathbb{C}^2 = \mathbb{C} \times \mathbb{C}$ (véase el apartado 2.17 sobre el producto tensorial de espacios de Hilbert). Por tanto, el estado cuántico de un electrón estará dado por un objeto que es una función de dos componentes

$$[\Psi](x) = \begin{pmatrix} \phi_+(x) \\ \phi_-(x) \end{pmatrix} = \phi_+(x) \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \phi_-(x) \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Este objeto se denomina función espinorial o *espinor*. Nótese que si el estado está normalizado, entonces

$$\text{Prob}_\Psi \left(s_z = \pm \frac{\hbar}{2} \right) = \int_{\mathbb{R}} |\phi_{\pm}(x)|^2 dx$$

y

$$\langle \hat{s}_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \int_{\mathbb{R}} (|\phi_+(x)|^2 - |\phi_-(x)|^2) dx.$$

3.7 Evolución temporal de los estados cuánticos: Postulado 5.

• Los postulados 1 a 4 establecen las bases de la descripción de los sistemas cuánticos. No hemos dicho nada, sin embargo, de la evolución de dichos sistemas entre dos procesos de medida separados temporalmente. Necesitamos, por tanto, un nuevo postulado que nos indique cómo es la *dinámica* en la M.C.

Recordemos en primer lugar lo que dijimos acerca del tiempo como parámetro tras el postulado 1. Para ser consistentes con la notación allí establecida deberíamos escribir los estados en la forma ψ_t . No obstante, en esta sección escribiremos también $\psi_t \equiv \psi(t)$ sin peligro de confusión, pues sólo tratamos de establecer la relación entre los diferentes estados o vectores ψ_{t_n} que constituyen la evolución temporal del sistema.

POSTULADO 5.- Para todo sistema físico cerrado existe un operador lineal hermítico \hat{H} , llamado operador hamiltoniano, tal que:

- Es el operador asociado al observable energía total del sistema.
- Determina la evolución temporal del estado $\psi_t \equiv \psi(t)$ del sistema a través de la ecuación:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = \hat{H} \psi(t), \quad (3.23)$$

siempre que el sistema no sea perturbado por una medida. La ecuación (3.23) es la **ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo** en su forma más general.

La constante universal \hbar es, como ya se indicó en el capítulo 1, la constante de Planck racionalizada, $h/(2\pi)$. Hay que señalar que el operador \hat{H} puede incluir operadores diferenciales de las coordenadas espaciales o del momento lineal, de modo que la ecuación (3.23) puede ser una ecuación en derivadas parciales. La forma explícita de \hat{H} dependerá de cuál sea el sistema físico a estudiar, que a su vez “sugiere” cuál va a ser el espacio de Hilbert conveniente y la representación (en definitiva, la base de vectores) que utilicemos en dicho espacio. No obstante, independientemente de cuál sea esta forma explícita, la ecuación (3.23) es totalmente general, y por sí sola nos va a permitir obtener una serie de resultados fundamentales que deben satisfacerse en la evolución temporal de un sistema.

Al decir que el sistema es cerrado estamos señalando que sobre él no actúan fuentes exteriores. Naturalmente, no hemos de confundir sistema cerrado con sistema libre: si sobre una partícula actúa el potencial $V(x)$, nuestro sistema físico cerrado estará constituido por la partícula y la fuente de dicho potencial que, en primera aproximación, supondremos imperturbable por la presencia de la partícula.

Puede ocurrir, por el contrario, que el sistema esté afectado por fuentes externas cuya evolución temporal sea conocida. Un ejemplo sencillo sería el de una partícula sometida a la acción de un potencial $V(x, t)$ dependiente explícitamente del tiempo. En este caso se puede extender el postulado 5 considerando la existencia de un operador hamiltoniano $\hat{H}(t)$ que contenga esta dependencia temporal de las fuentes externas. La ecuación de Schrödinger (3.23) sigue siendo válida, pero ya no podremos decir que $\hat{H}(t)$ es el operador asociado a la energía total del sistema (entendida la energía total como aquella magnitud que se conserva en un sistema físico debido a su invariancia bajo traslaciones temporales).

Al igual que puede ocurrir que el observable hamiltoniano dependa del tiempo, existen observables con similar dependencia temporal. Por ejemplo, como ya dijimos, el momento lineal o la posición son observables sin dependencia explícita en el tiempo pero el impulso lineal, definido para una partícula sometida a una fuerza conservativa como $I(t) = -(t - t_0) \times dV(x)/dx$ siendo t_0 un tiempo de referencia, es un sencillo ejemplo de observable con dependencia explícita temporal. En los planteamientos formales más abstractos de la M.C., los observables con

dependencia temporal son aquellos asociados a aparatos de medida que evolucionan en el tiempo. Sin embargo, el registro final de la medida implica un salto discontinuo que no es describible mediante la ecuación de Schrödinger (ver las secciones que posteriormente se dedican al problema de la medida). Resulta ocioso volver a insistir en que, bajo un punto de vista matemático, el tiempo es un parámetro que no tiene nada que ver con la estructura del espacio de Hilbert de los estados.

El postulado 5 no nos da recetas de cómo es \hat{H} para un sistema físico concreto. De nuevo tendremos que acudir a principios físicos más generales (y al postulado 6) para determinarlo. De hecho, eso es lo que se hace cuando en los textos de Mecánica Clásica se “deduce” el lagrangiano de una partícula libre basándose únicamente en requerimientos de simetría y de invariancia respecto de una traslación temporal.³ Son ese tipo de argumentos muy generales los que permiten establecer la forma del hamiltoniano \hat{H} para un sistema físico cualquiera.

• La ecuación diferencial de Schrödinger es de primer orden en el tiempo. Por tanto, si conocemos el estado en el instante inicial $\psi(t=0)$ (por ejemplo, como resultado de una preparación a través de una medida maximal), la resolución de la ecuación de Schrödinger nos permite obtener el estado para cualquier instante posterior (siempre, claro está, que no actúe entre medias una perturbación exterior no englobada en \hat{H}). Una forma elegante de expresar esta evolución es mediante el llamado *operador de evolución temporal*, que explicaremos a continuación para el caso más sencillo de un hamiltoniano independiente del tiempo (característica que siempre supondremos salvo indicación expresa de lo contrario). Este operador tendrá una importancia crucial en formulaciones más avanzadas de la M.C.

Definimos el **operador de evolución temporal** $\hat{U}(t)$ como aquel operador que actúa en el espacio de los estados de manera que, dado un estado cuántico en el instante $t=0$, su actuación sobre éste nos da el estado cuántico en el instante t :

$$\hat{U}(t)\psi(0) = \psi(t). \quad (3.24)$$

Si introducimos (3.24) en la ecuación de Schrödinger (3.23) tenemos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\hat{U}(t)\psi(0)) = \hat{H} (\hat{U}(t)\psi(0)) \implies i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} \psi(0) = (\hat{H} \hat{U}(t)) \psi(0)$$

³Véase, por ejemplo, el libro de Landau y Lifshitz *Mecánica* (Editorial Reverté).

y como la anterior igualdad es válida para cualquier estado $\psi(0)$, tenemos la siguiente identidad entre operadores:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} = \hat{H} \hat{U}(t); \quad (3.25)$$

a la que debemos añadir la "condición inicial"

$$\hat{U}(0) = \hat{I}, \quad (3.26)$$

donde \hat{I} es el operador identidad. Las ecuaciones (3.25) y (3.26) constituyen *formalmente* una ecuación diferencial de primer orden cuya solución (para operadores) es

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{it}{\hbar} \hat{H}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{it}{\hbar}\right)^n \hat{H}^n. \quad (3.27)$$

Evidentemente, $\hat{U}(t)$ **no es un operador hermítico**, por lo que no representa magnitud observable alguna. Sin embargo supone una representación muy gráfica de la evolución temporal del estado cuántico dentro del contexto matemático de la teoría de espacios de Hilbert. A partir de la expresión anterior es fácil demostrar las siguientes propiedades del operador $\hat{U}(t)$ para un hamiltoniano \hat{H} independiente del tiempo:

1. $\psi(t) = \hat{U}(t - \tau) \psi(\tau)$.

Esta igualdad muestra la mencionada invariancia bajo traslaciones temporales de un sistema en el que la energía se conserva. La evolución entre dos instantes depende únicamente del intervalo de tiempo transcurrido: si $\phi(0) = \psi(\tau)$ entonces $\phi(t) = \psi(\tau + t)$.

2. $\hat{U}(t_1 + t_2) = \hat{U}(t_1) \hat{U}(t_2)$.

3. $\hat{U}^{-1}(t) = \hat{U}(-t)$, como consecuencia $\hat{U}(t) \hat{U}(-t) = \hat{U}(-t) \hat{U}(t) = 1$.

Por otra parte, $\hat{U}^\dagger(t) = \hat{U}(-t)$, por lo que se tiene que $\hat{U}(t) \hat{U}^\dagger(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t) = 1$, con lo que:

$\hat{U}(t)$ es un operador unitario y la norma del estado $\psi(t)$ se conserva en la evolución temporal.

Nota: El último resultado puede demostrarse directamente a partir de la propia ecuación de Schrödinger. En efecto, sea el estado cuántico $\psi(t)$. Su norma al cuadrado es

$$\|\psi(t)\|^2 = (\psi(t), \psi(t))$$

y, por tanto,

$$\frac{\partial}{\partial t} \|\psi(t)\|^2 = \left(\frac{\partial \psi(t)}{\partial t}, \psi(t) \right) + \left(\psi(t), \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} \right).$$

Recordando las propiedades fundamentales del producto escalar

$$\frac{\partial}{\partial t} \|\psi(t)\|^2 = \left(\psi(t), \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} \right) + \left(\psi(t), \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} \right)^* = 2\operatorname{Re} \left(\psi(t), \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} \right)$$

e introduciendo el operador hamiltoniano y la evolución temporal (3.23)

$$\frac{\partial}{\partial t} \|\psi(t)\|^2 = 2\operatorname{Re} \left(\psi(t), \frac{-i}{\hbar} \hat{H} \psi(t) \right) = 2\operatorname{Re} \left\{ \frac{-i}{\hbar} \left(\psi(t), \hat{H} \psi(t) \right) \right\}.$$

Pero, puesto que \hat{H} es hermítico, el valor esperado $\left(\psi(t), \hat{H} \psi(t) \right)$ es real (de hecho, es el valor esperado $\langle E \rangle_t$ de la energía mecánica en el estado $\psi(t)$ en el instante t). Como consecuencia, $-i \langle E \rangle_t / \hbar$ es un valor imaginario puro cuya parte real es nula. Así

$$\frac{\partial}{\partial t} \|\psi(t)\|^2 = 2\|\psi(t)\| \frac{\partial}{\partial t} \|\psi(t)\| = 0 \implies \frac{\partial}{\partial t} \|\psi(t)\| = 0 \quad (3.28)$$

(el mismo resultado se tiene si \hat{H} es un hamiltoniano dependiente del tiempo; trate de demostrarlo). Por lo tanto, si el estado $\psi(0)$ estaba normalizado $\psi(t)$ seguirá estándolo mientras el sistema siga su evolución dinámica determinada por el hamiltoniano. Este comportamiento contrasta abiertamente con lo que sucede en el proceso de medida (véase apartado 3.4).

- Al ser \hat{H} un operador hermítico, existe una base completa del espacio de Hilbert de los estados formada por autoestados de \hat{H} , que reciben el nombre de **autoestados de la energía**. Consideremos uno de estos autoestados $\varphi_{n,j}$, siendo el autovalor correspondiente la energía E_n . Entonces

TEOREMA: Sea $\varphi_{n,j}$ un autoestado de \hat{H} con autovalor la energía E_n . Supongamos que para $t = 0$ el estado cuántico es $\psi(0) = \varphi_{n,j}$. Entonces la evolución temporal de dicho autoestado es

$$\psi(t) = \exp \left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar} \right) \varphi_{n,j} = \exp \left(-\frac{iE_n t}{\hbar} \right) \psi(0). \quad (3.29)$$

Por tanto, si en un instante dado de tiempo el estado cuántico es autoestado de \hat{H} , la evolución temporal del mismo se reduce a un cambio en una constante multiplicativa de módulo unidad. Dicho de otra forma, los **autoestados de la energía son estados estacionarios** que no evolucionan físicamente en el tiempo.

Ejercicio: Demuestre el teorema anterior, usando tanto la ecuación de Schrödinger como el operador de evolución temporal.

De esta forma, para un autoestado de \hat{H} , ninguna de sus características físicas (valores esperados, probabilidades de medición, etc.) evoluciona en el tiempo. Obviamente, la ecuación que satisface un estado estacionario es la ecuación de autovalores asociada al observable \hat{H}

$$\hat{H}\varphi_{n,j} = E_n\varphi_{n,j}, \quad (3.30)$$

que es la llamada **ecuación de Schrödinger independiente del tiempo**.

• La expresión (3.29) es cierta sólo para estados estacionarios. Supongamos, ahora, que tenemos un estado cuántico cualquiera $\psi(0)$ en $t = 0$. Puesto que, como acabamos de decir, existe una base de estados estacionarios, podemos escribir el desarrollo de Fourier de $\psi(0)$ en esta base:

$$\psi(0) = \sum_n \sum_{j=1}^{g_n} (\varphi_{n,j}, \psi(0)) \varphi_{n,j} = \sum_n \sum_{j=1}^{g_n} c_{n,j}(0) \varphi_{n,j}, \quad (3.31)$$

donde $c_{n,j}(0)$ son las coordenadas de $\psi(0)$ en la base de autoestados de \hat{H} . En un instante cualquiera t , se ha de cumplir que

$$\psi(t) = \sum_n \sum_{j=1}^{g_n} (\varphi_{n,j}, \psi(t)) \varphi_{n,j} = \sum_n \sum_{j=1}^{g_n} c_{n,j}(t) \varphi_{n,j}. \quad (3.32)$$

Al aplicar la ecuación (3.23), por la linealidad de $\partial/\partial t$ y \hat{H} ,

$$\sum_n \sum_{j=1}^{g_n} \left(i\hbar \frac{\partial c_{n,j}(t)}{\partial t} \right) \varphi_{n,j} = \sum_n \sum_{j=1}^{g_n} c_{n,j}(t) \hat{H} \varphi_{n,j} = \sum_n \sum_{j=1}^{g_n} c_{n,j}(t) E_n \varphi_{n,j}.$$

Si dos estados son iguales, son iguales sus coordenadas en una misma base. De esta manera ha de cumplirse que

$$i\hbar \frac{\partial c_{n,j}(t)}{\partial t} = E_n c_{n,j}(t), \quad (3.33)$$

que tiene como solución

$$c_{n,j}(t) = c_{n,j}(0) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right). \quad (3.34)$$

Por tanto, la solución general a la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo es

$$\psi(t) = \sum_n \left[\sum_{j=1}^{g_n} c_{n,j}(0) \varphi_{n,j} \right] \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right). \quad (3.35)$$

Ejercicio: Obténgase la igualdad (3.35) utilizando el operador de evolución temporal $\hat{U}(t)$.

Ejercicio: Obténgase la igualdad (3.35) a partir de (3.29) y aplicando el principio de superposición: si $\phi(0) = a\psi(0) + b\varphi(0)$, entonces $\psi(t) = a\psi(t) + b\varphi(t)$ (esto es debido, naturalmente, a la linealidad de la ecuación de Schrödinger).

Ejemplo: Consideremos un cierto sistema físico en el que las energías permitidas (autovalores de \hat{H}) son ε_1 , ε_2 y ε_3 . Una base de autoestados de la energía es $\{\varphi_1, \varphi_{2,1}, \varphi_{2,2}, \varphi_3\}$ (nótese que el autovalor ε_2 es degenerado). En $t = 0$ el estado cuántico del sistema (ya normalizado) es

$$\psi(0) = \frac{1}{\sqrt{5}} \left\{ \varphi_1 + \sqrt{2}\varphi_{2,1} - i\varphi_{2,2} - \varphi_3 \right\}$$

Calcular el valor esperado de la energía en $t = 0$. ¿Cuál el estado del sistema a un tiempo t ? ¿Cuál es, para ese instante de tiempo, el valor esperado de la energía?

De manera directa

$$\langle E \rangle_0 = \left| \frac{1}{\sqrt{5}} \right|^2 \varepsilon_1 + \left| \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{5}} \right|^2 \varepsilon_2 + \left| \frac{-i}{\sqrt{5}} \right|^2 \varepsilon_2 + \left| \frac{-1}{\sqrt{5}} \right|^2 \varepsilon_3 = \frac{\varepsilon_1 + 3\varepsilon_2 + \varepsilon_3}{5}.$$

La evolución temporal de $\psi(t)$ se obtiene fácilmente a partir de (3.35):

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{5}} \left\{ e^{-i\omega_1 t} \varphi_1 + e^{-i\omega_2 t} \left(\sqrt{2}\varphi_{2,1} - i\varphi_{2,2} \right) - e^{-i\omega_3 t} \varphi_3 \right\},$$

donde $\omega_n = \varepsilon_n/\hbar$. De esta forma

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_t &= \left| \frac{e^{-i\omega_1 t}}{\sqrt{5}} \right|^2 \varepsilon_1 + \left| \frac{\sqrt{2}e^{-i\omega_2 t}}{\sqrt{5}} \right|^2 \varepsilon_2 + \left| \frac{-ie^{-i\omega_2 t}}{\sqrt{5}} \right|^2 \varepsilon_2 + \left| \frac{-e^{-i\omega_3 t}}{\sqrt{5}} \right|^2 \varepsilon_3 \\ &= \langle E \rangle_0, \end{aligned}$$

esto es, el valor esperado de \hat{H} no depende del tiempo. Lo mismo puede decirse de cualquier otra magnitud relativa a la energía (probabilidades de medición, incertidumbre, etc.) pero no necesariamente de otras magnitudes físicas.

3.8 Evolución temporal relativa a los observables.

• Consideremos un observable \hat{A} independiente del tiempo.⁴ Al igual que hemos postulado cuál es la ecuación de evolución temporal para un estado, podemos obtener una expresión que nos señale cuál es la evolución del valor esperado $\langle \hat{A} \rangle_t$. En efecto, a partir de la definición de valor esperado,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{A} \rangle_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi(t), \hat{A}\psi(t))$$

y como \hat{A} no depende explícitamente de t , esto es $\partial \hat{A} / \partial t = 0$, podemos escribir

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{A} \rangle_t = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t), \hat{A}\psi(t) \right) + \left(\psi(t), \hat{A} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) \right)$$

(nótese que hay que tratar los escalares imaginarios correctamente: por eso aparece $-i$ en el primer sumando). Utilizando una vez más el postulado 5,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{A} \rangle_t = \left(-\hat{H}\psi(t), \hat{A}\psi(t) \right) + \left(\psi(t), \hat{A}\hat{H}\psi(t) \right),$$

pero \hat{H} es hermítico, luego

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{A} \rangle_t = \left(\psi(t), (\hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A})\psi(t) \right).$$

De esta manera, introduciendo el conmutador, llegamos a la importante ecuación

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{A} \rangle_t = \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle_t, \quad (3.36)$$

⁴Esto no quiere decir, ni mucho menos, que los valores esperados, o las distribuciones de probabilidad, de las magnitudes físicas asociadas a \hat{A} no varían el tiempo, pues estas características se obtienen a partir de vectores de estado que sí evolucionan en el tiempo. Así, el valor medio de \hat{A} para el estado cuántico $\psi(t)$ normalizado vendrá dado por

$$\langle \hat{A} \rangle_t \equiv (\psi(t), \hat{A}\psi(t)),$$

que es una cantidad que, en general, cambia en el tiempo.

que nos relaciona la **variación temporal del valor medio de un observable con el valor medio del conmutador del observable con el hamiltoniano.**

• Dado un observable \hat{A} , decimos que \hat{A} es una **constante del movimiento** si el valor medio de dicho observable es constante en el tiempo **para cualquier estado (sea estacionario o no).** Como consecuencia inmediata de (3.36)

$$\hat{A} \text{ es constante del movimiento si y sólo si } [\hat{A}, \hat{H}] = 0. \quad (3.37)$$

Evidentemente, la propia energía es una constante del movimiento.

• Si \hat{A} es una constante del movimiento, entonces \hat{A} y \hat{H} son observables compatibles. Así podemos construir una base del espacio de los estados formada por autoestados simultáneos de \hat{A} y \hat{H} . Sea entonces $\varphi_{\varepsilon,a,j}$ esta base, donde ε indica el autovalor de la energía, a el del observable \hat{A} y j , como siempre, es un índice adicional que nos informa de las posibles multiplicidades. De esta forma, cualquier estado puede escribirse para $t = 0$ como

$$\psi(0) = \sum_{\varepsilon,a} \sum_j c_{\varepsilon,a,j} \varphi_{\varepsilon,a,j}$$

y, para un instante de tiempo dado,

$$\psi(t) = \sum_{\varepsilon,a} \sum_j \exp(-i\varepsilon t/\hbar) c_{\varepsilon,a,j} \varphi_{\varepsilon,a,j}.$$

Para este instante de tiempo, la probabilidad de que al medir \hat{A} se tenga el valor a será

$$\begin{aligned} \text{Prob}_\psi(a)|_t &= \sum_{\varepsilon} \sum_j |\exp(-i\varepsilon t/\hbar) c_{\varepsilon,a,j}|^2 \\ &= \sum_{\varepsilon} \sum_j |c_{\varepsilon,a,j}|^2 = \text{Prob}_\psi(a)|_0, \end{aligned}$$

donde el sumatorio se extiende sobre los índices correspondientes. Esto demuestra un importante resultado adicional: **si \hat{A} es una constante del movimiento, la probabilidad de que al medir \hat{A} se obtenga un determinado valor es constante en el tiempo para cualquier estado cuántico.** Obviamente, la recíproca también es cierta: si las probabilidades son constantes en el tiempo, los valores medios también lo son y, por tanto, el observable es constante del movimiento.

Nota: se debe recordar que si la medida se realiza y tiene lugar el colapso del estado, puede cambiar el valor esperado de una constante de movimiento (aunque el observable sea una constante del movimiento; véase el apartado 3.4, *Reducción del estado cuántico*).

La compatibilidad entre \hat{H} y cualquier constante del movimiento tiene otra importante conclusión. *Si queremos construir un CCOC que contenga al hamiltoniano, dicho CCOC estará formado por constantes del movimiento.* Por ejemplo (no incluimos el espín), en el átomo de hidrógeno un CCOC es el compuesto por la energía, el cuadrado del momento cinético y su componente z . Cualquier estado de la base asociada está unívocamente caracterizado por los autovalores ε_n , $\ell(\ell+1)\hbar^2$ y $m_\ell\hbar$ de estos tres observables.⁵ Los índices n, ℓ y m_ℓ son los números cuánticos característicos del átomo de hidrógeno en esta descripción. En general, puesto que por conveniencia siempre trabajamos en una base de estados estacionarios, los números cuánticos están asociados a los valores que toman las diferentes constantes del movimiento.

- Hay una confusión bastante extendida relativa a este punto, que debe evitarse. Si \hat{A} es una constante del movimiento, $\langle \hat{A} \rangle_t = \text{cte}$ para cualquier estado cuántico. Esto no tiene nada que ver con el hecho de que, para cualquier observable \hat{B} , su valor esperado es constante **en un estado estacionario** (autoestado de la energía). El hecho $\langle \hat{B} \rangle_t = \text{cte.}$ en un estado estacionario no nos aporta nada, puesto que esta invariancia temporal es debida al carácter estacionario del estado, no a ninguna peculiaridad especial de \hat{B} (que, por ejemplo, puede no conmutar con \hat{H}).

3.9 Relación de incertidumbre energía-tiempo.

- Consideremos un cierto observable \hat{A} y un estado cuántico $\psi(t)$. Definimos el tiempo propio de evolución del observable \hat{A} en dicho estado como la cantidad

$$\tau_{\hat{A}} \equiv \frac{(\Delta \hat{A})_t}{\left| \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{A} \rangle_t \right|}. \quad (3.38)$$

La interpretación física de $\tau_{\hat{A}}$ es sencilla. Nótese que en primera aproximación (siempre que $\partial^2 \langle \hat{A} \rangle / \partial t^2$ sea pequeña) podemos escribir

$$\langle \hat{A} \rangle_{t+\tau_{\hat{A}}} \simeq \langle \hat{A} \rangle_t + \tau_{\hat{A}} \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{A} \rangle_t,$$

⁵La deducción completa del espectro de los operadores del momento angular se hace en cursos superiores. Baste saber que los autovalores de L^2 y L_z tienen la forma indicada en el texto, con ℓ un entero no negativo y m_ℓ un entero.

esto es, por (3.38)

$$\left| \langle \hat{A} \rangle_{t+\tau_{\hat{A}}} - \langle \hat{A} \rangle_t \right| \simeq (\Delta \hat{A})_t.$$

Por tanto, el tiempo propio de evolución es, aproximadamente, el tiempo necesario para que el cambio en el valor esperado de un observable sea del orden de la incertidumbre del mismo. Figuradamente, el tiempo propio de evolución es el tiempo que es necesario que transcurra para que el valor medio de \hat{A} varíe de forma *apreciable* (variación del orden de la incertidumbre del observable en el estado). Si ahora introducimos en (3.38) la ecuación de evolución temporal (3.36) se tiene que

$$\tau_{\hat{A}} = \hbar \frac{(\Delta \hat{A})_t}{\left| \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle_t \right|}$$

pero, por la relación de incertidumbre generalizada (3.15),

$$(\Delta \hat{A})_t (\Delta \hat{H}) \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle_t \right| \quad (3.39)$$

de forma que, inmediatamente,

$$\tau_{\hat{A}} \geq \frac{\hbar}{2\Delta \hat{H}}. \quad (3.40)$$

Esta es la llamada *relación de incertidumbre energía/tiempo*. Nótese que hemos eliminado la dependencia temporal de $\Delta \hat{H}$ puesto que \hat{H} es una constante del movimiento. Nótese también que esta relación no se establece entre las incertidumbres de dos operadores determinados para un cierto estado cuántico, sino entre la incertidumbre de la energía $\Delta \hat{H}$ y el tiempo propio $\tau_{\hat{A}}$ de **cualquier** observable.

Físicamente, si un estado tiene una energía “bastante bien definida” (esto es, $\Delta \hat{H} \simeq 0$) el tiempo propio de evolución de cualquier observable será grande y, por tanto, el sistema evoluciona lentamente en el tiempo. Recíprocamente, si existe algún observable para el que $\tau_{\hat{A}} \simeq 0$ (evolución temporal rápida), necesariamente $\Delta \hat{H} \gg 0$ y la energía del estado está “mal definida” en el mismo. Por último, si el estado es autoestado de la energía, $\Delta \hat{H} = 0$, y el tiempo propio de cualquier observable (no sólo de las constantes del movimiento) es infinito: el estado no evoluciona de manera alguna y estamos hablando de un estado estacionario.

• Otro aspecto interesante de la evolución de los sistemas cuánticos, que ya hemos podido observar en algunos de los ejemplos anteriores, es el siguiente. Consideremos un estado que en $t = 0$ es combinación lineal de dos autoestados de la energía correspondientes a dos autoenergías distintas ε_1 y ε_2 :

$$\psi(0) = a\varphi_1 + b\varphi_2 \quad \text{con} \quad |a|^2 + |b|^2 = 1.$$

En este caso, la evolución temporal de ψ es inmediata:

$$\psi(t) = a \exp\left(-\frac{i\varepsilon_1 t}{\hbar}\right) \varphi_1 + b \exp\left(-\frac{i\varepsilon_2 t}{\hbar}\right) \varphi_2.$$

Sacando factor común la primera exponencial temporal

$$\psi(t) = \exp\left(-\frac{i\varepsilon_1 t}{\hbar}\right) \times \left\{ a\varphi_1 + b \exp\left(-\frac{i(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)t}{\hbar}\right) \varphi_2 \right\}.$$

Pero escrito el estado de esta forma, la primera exponencial temporal es un simple factor multiplicativo de módulo unidad que no tiene significación física. Es lícito entonces reescribir $\psi(t)$ como

$$\psi(t) = a\varphi_1 + b \exp(-i\omega_{12}t) \varphi_2, \quad (3.41)$$

donde $\omega_{12} = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/\hbar$. Observamos así que la evolución del estado es periódica en el tiempo con periodo $T = 2\pi/\omega_{12}$; concretamente

$$\psi(t) = \psi(t + nT) \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad ; \quad T = \frac{2\pi}{\omega_{12}} = \frac{h}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1} \quad (3.42)$$

y, naturalmente, todas las propiedades físicas del estado poseen similar evolución temporal.

Ejercicio: Considérese que el estado cuántico es una combinación lineal de N estados estacionarios de energías $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_N$. Demostrar que el estado evoluciona periódicamente en el tiempo si y solo si la razón entre las energías $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_N$ es *commensurable*, esto es si

$$\varepsilon_1 : \varepsilon_2 : \dots : \varepsilon_N = n_1 : n_2 : \dots : n_N$$

con todos los n_j números enteros. ¿Cuál será entonces el periodo T asociado a dicha evolución temporal?

Sugerencia: imponer la igualdad $\psi(t) = \psi(t + nT)$ y a partir de ella deducir que para que exista una solución T se tiene que cumplir la relación de commensurabilidad entre las energías.

Es interesante darse cuenta que la evolución del estado cuántico de un sistema es completamente determinista *siempre que no efectuemos una medida*, puesto que en el resultado de la misma y por ende, en el colapso o reducción cuántico correspondiente (véase el apartado 3.4), aparece una componente estocástica cuyo valor no es predecible exactamente a partir de la representación $\psi(t)$ del estado cuántico. Ahora bien, lo que realmente nos interesa de un sistema son sus propiedades físicas medibles y, por tanto, éstas no siguen una evolución completamente determinista si se realiza alguna medida. Naturalmente, esta conclusión presupone que la interpretación de los anteriores postulados es la que hemos dado aquí; pero bien pudiese ocurrir, como afirman otras teorías no ortodoxas pero no por ello menos consistentes, que el conocimiento máximo de un estado cuántico no lo dé el vector de estado $\psi(t)$. El carácter probabilista de las mediciones en M.C. no sería entonces una propiedad esencial de la naturaleza, sino que vendría dado por un conocimiento incompleto del estado físico. Existirían así una serie de *variables ocultas* cuyos valores no pueden inferirse a partir de la representación $\psi(t)$; pero si tuviésemos forma de conocer dichas variables ocultas podríamos determinar completamente la evolución del sistema, incluyendo los resultados (no las probabilidades) de una posible medida. Estas teorías, sobre las que volveremos más adelante en el apartado 3.17, no quitan validez alguna al formalismo cuántico tal como lo estamos exponiendo. Sólo cuestionan su interpretación.

3.10 Observables posición y momento. Postulado 6.

- Hasta ahora los postulados de la M.C. son muy generales, en el sentido de que no hacen mención alguna a un sistema físico concreto. A pesar de ello hemos adelantado cuál será el espacio de Hilbert de los estados de una partícula que se mueve en una dimensión. Volvemos a hacer hincapié que los postulados no nos dicen cómo describir un sistema cuántico determinado; ha de ser el propio físico quien, tras el análisis pertinente, sea capaz de encontrar la descripción que mejor se adapte al sistema.

Sin embargo, hay un punto que debe postularse: cuál es la relación entre los observables mecánicos “clásicos” y su descripción a nivel cuántico. Esto último es esencial, puesto que es preciso salvaguardar el carácter de la mecánica clásica como “límite” de la mecánica cuántica. En el estudio de la Mecánica Analítica podrá el lector comprobar el fuerte paralelismo entre algunos resultados de la misma y este postulado que ahora enunciamos:

POSTULADO 6.- Si en un sistema clásico las coordenadas **cartesianas** de la posición son x_1, x_2, \dots, x_N y p_1, p_2, \dots, p_N son sus momentos canónicos *conjugados*, entonces los operadores hermíticos $\hat{X}_1, \hat{X}_2, \dots$ y $\hat{P}_1, \hat{P}_2, \dots$ que representan estos observables en M.C. deben satisfacer las **reglas de conmutación canónicas**

$$\boxed{\begin{aligned} [\hat{X}_i, \hat{X}_j] &= [\hat{P}_i, \hat{P}_j] = 0 \\ [\hat{X}_i, \hat{P}_j] &= i\hbar \delta_{ij}, \end{aligned}} \quad (3.43)$$

donde δ_{ij} es la delta de Kronecker.

Si la expresión clásica de un observable A es

$$A(x_1, x_2, \dots, x_N; p_1, p_2, \dots, p_N)$$

entonces, el operador correspondiente \hat{A} se obtiene a partir de la expresión anterior sustituyendo las variables x_i, p_j por los operadores \hat{X}_i, \hat{P}_j . Nótese que, en general, será necesario reescribir convenientemente A en función de las variables x_i, p_j para que la mencionada sustitución dé lugar a un operador hermítico.

- Analicemos en detalle el postulado 6 para una partícula de masa m que se mueve en una dimensión espacial. En este caso, la coordenada cartesiana es la posición x y el momento canónico conjugado es el momento lineal p . Las reglas de conmutación canónicas (3.43) se reducen entonces a

$$[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar. \quad (3.44)$$

Puesto que cualquier observable mecánico es función de x y p (y, eventualmente, del tiempo), entonces

$$A = A(x, p) \longrightarrow \hat{A} = A(\hat{X}, \hat{P}_x). \quad (3.45)$$

Por ejemplo, la energía cinética vendrá dada por el operador

$$\hat{K} = \frac{1}{2m} \hat{P}_x^2, \quad (3.46)$$

y la energía potencial $V(x)$ (si la partícula se mueve bajo la acción de una fuerza conservativa) está representada por

$$\hat{V} = V(\hat{X}), \quad (3.47)$$

por lo que el operador energía (el hamiltoniano) será, simplemente,

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{P}_x^2 + V(\hat{X}). \quad (3.48)$$

Nota: Como ya hemos comentado, pueden surgir dudas en situaciones como la siguiente. Sea el observable clásico xp . Si efectuamos directamente la asignación $x \rightarrow \hat{X}$ y $p \rightarrow \hat{P}_x$ el resultado será un operador no hermítico. Sin embargo, si reescribimos la expresión clásica como $(xp + px)/2$, entonces $(\hat{X}\hat{P}_x + \hat{P}_x\hat{X})/2$ sí es hermítico y éste será el operador que represente a la cantidad clásica xp .

No obstante, la regla anterior para construir operadores cuánticos a partir de magnitudes clásicas tampoco está libre de ambigüedades. Supongamos, por ejemplo, que queremos construir el operador cuántico asociado a la magnitud clásica x^2p . Si partimos de $x(xp)$ llegamos a

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(\hat{X}\hat{X}\hat{P}_x + \hat{X}\hat{P}_x\hat{X}) &= \frac{1}{4}(\hat{X}(\hat{X}\hat{P}_x + \hat{P}_x\hat{X}) + (\hat{X}\hat{P}_x + \hat{P}_x\hat{X})\hat{X}) \\ &= \frac{1}{4}(\hat{X}^2\hat{P}_x + \hat{P}_x\hat{X}^2 + 2\hat{X}\hat{P}_x\hat{X}), \end{aligned}$$

mientras que si partimos de x^2p llegamos a

$$\frac{1}{2}(\hat{X}^2\hat{P}_x + \hat{P}_x\hat{X}^2). \quad (3.49)$$

Al final del primer capítulo vimos que a la posición se le puede asignar el operador $\hat{X} = x$ y al momento lineal el operador $\hat{P}_x = -i\hbar d/dx$ dentro del espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. También hemos visto en distintos ejemplos del capítulo anterior que el espectro de estos dos operadores es continuo (la inclusión de la constante \hbar dentro de la definición de \hat{P}_x obviamente no cambia el resultado que vimos en su momento para $-i d/dx$). Lo que queremos resaltar ahora es que esta continuidad del espectro de los operadores de posición y momento puede deducirse directamente de las reglas de conmutación (3.43) y es independiente de una asignación concreta. Esto ya se apuntó en la discusión acerca de la no normalización del estado cuántico (que seguía a la demostración de la relación de incertidumbre generalizada en el apartado 3.5), pero vale la pena repetir ahora el razonamiento.

Supongamos que el espacio de Hilbert de los estados de una partícula que se mueve en una dimensión tiene dimensión finita. Entonces, cualquier operador hermítico definido sobre dicho espacio tendría un espectro puramente discreto. Pero si dos operadores \hat{A} y \hat{B} tienen un espectro discreto, su conmutador no puede ser igual a un operador escalar no nulo. En

efecto, sea ϕ_a un autovector de \hat{A} con autovalor a . Puesto que ϕ_a es un vector del espacio de Hilbert, los siguientes pasos están completamente justificados:

$$\begin{aligned} (\phi_a, [\hat{A}, \hat{B}] \phi_a) &= (\phi_a, \hat{A}\hat{B}\phi_a) - (\phi_a, \hat{B}\hat{A}\phi_a) = (\hat{A}\phi_a, \hat{B}\phi_a) - (\phi_a, \hat{B}\hat{A}\phi_a) \\ &= a(\phi_a, \hat{B}\phi_a) - a(\phi_a, \hat{B}\phi_a) = 0 \end{aligned}$$

por lo que $[\hat{A}, \hat{B}]$ no puede ser igual a un escalar (excepto en el caso de que el escalar sea el cero) y debe ser igual a algún otro operador. En definitiva, si el conmutador de dos operadores es un escalar, dichos operadores no pueden tener un espectro discreto.

Más aún, el desarrollo anterior sugiere que los espectros de \hat{X} y de \hat{P}_x tienen que ser estrictamente continuos y que sus autoestados son impropios (esto es, que no son estados normalizables del espacio de Hilbert). Como consecuencia, la asignación estándar:

Espacio de los estados $\rightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$		
Estados cuánticos \rightarrow Funciones $\psi(x)$ de cuadrado integrable		
$x \rightarrow \hat{X}$	tal que	$\hat{X}\psi(x) = x\psi(x)$
$p \rightarrow \hat{P}_x$	tal que	$\hat{P}_x\psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx}\psi(x)$

(3.50)

cumple todas las propiedades requeridas del postulado 6. De hecho, la asignación (3.50) puede considerarse como la versión restringida del postulado para una partícula que se mueve en una dimensión (en la denominada representación de posiciones, como veremos en el apartado 3.11).

- Para una partícula en tres dimensiones, la extensión natural de (3.50) es

Espacio de los estados $\rightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$		
Estados cuánticos \rightarrow Funciones $\psi(\vec{r})$ de cuadrado integrable en \mathbb{R}^3		
$x \rightarrow \hat{X}$	tal que	$\hat{X}\psi(\vec{r}) = x\psi(\vec{r})$
$y \rightarrow \hat{Y}$	tal que	$\hat{Y}\psi(\vec{r}) = y\psi(\vec{r})$
$z \rightarrow \hat{Z}$	tal que	$\hat{Z}\psi(\vec{r}) = z\psi(\vec{r})$
$p_x \rightarrow \hat{P}_x$	tal que	$\hat{P}_x\psi(\vec{r}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\psi(\vec{r})$
$p_y \rightarrow \hat{P}_y$	tal que	$\hat{P}_y\psi(\vec{r}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}\psi(\vec{r})$
$p_z \rightarrow \hat{P}_z$	tal que	$\hat{P}_z\psi(\vec{r}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}\psi(\vec{r})$

(3.51)

Ejercicio: Verificar que los observables $\{\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}\}$ y $\{\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z\}$ satisfacen las reglas de conmutación canónicas.

Ejemplo: Para una partícula en tres dimensiones, la componente x del momento cinético clásico es

$$L_x = yp_z - zp_y.$$

Análogamente, las otras dos componentes son

$$L_y = zp_x - xp_z$$

$$L_z = xp_y - yp_x.$$

De esta forma, el operador que representa de manera natural a la componente z del momento angular cuántico es

$$\hat{L}_x = \hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y,$$

que es hermitico pues

$$\hat{L}_x^\dagger = \hat{P}_z^\dagger \hat{Y}^\dagger - \hat{P}_y^\dagger \hat{Z}^\dagger = \hat{P}_z \hat{Y} - \hat{P}_y \hat{Z} = \hat{Y} \hat{P}_z - \hat{Z} \hat{P}_y = \hat{L}_x,$$

donde hemos tenido en cuenta que $[\hat{P}_z, \hat{Y}] = [\hat{P}_y, \hat{Z}] = 0$. Haciendo la sustitución dada en (3.51) obtenemos

$$\hat{L}_x^\dagger = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right),$$

procediéndose de igual forma para el resto de las componentes de \vec{L} .

Nótese que

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [\hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y, \hat{Z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z].$$

Desarrollando y escribiendo solamente aquellos conmutadores que en principio no son nulos

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [\hat{Y}\hat{P}_z, \hat{Z}\hat{P}_x] + [\hat{Z}\hat{P}_y, \hat{X}\hat{P}_z] = [\hat{Y}\hat{P}_z, \hat{Z}\hat{P}_x] + [\hat{P}_y\hat{Z}, \hat{P}_z\hat{X}].$$

Aplicando las reglas del álgebra de conmutadores y, de nuevo, eliminando los conmutadores que son nulos tendremos

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \hat{Y} [\hat{P}_z, \hat{Z}] \hat{P}_x + \hat{P}_y [\hat{Z}, \hat{P}_z] \hat{X}$$

y, aplicando ya las reglas de conmutación canónicas, nos queda

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = -i\hbar \hat{Y} \hat{P}_x + i\hbar \hat{P}_y \hat{X} = i\hbar (\hat{X} \hat{P}_y - \hat{Y} \hat{P}_x) = i\hbar \hat{L}_z. \quad (3.52)$$

Por simple intercambio de índices tenemos que

$$\begin{aligned} [\hat{L}_y, \hat{L}_z] &= i\hbar \hat{L}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] &= i\hbar \hat{L}_y. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Las expresiones (3.52) y (3.53) se conocen como *reglas de conmutación del momento angular o cinético*.

Ejercicio: Definiendo el observable *cuadrado del módulo del momento cinético* como $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ comprobar que

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$$

(fíjese que basta comprobar la compatibilidad de \hat{L}^2 con una sola componente del momento cinético, ya que entonces el resto de la relaciones se obtienen por transposición de índices).

Ejercicio: Verificar que, para una partícula de masa m que se mueve en tres dimensiones, el observable energía cinética

$$\hat{K} = \frac{1}{2m} (\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2)$$

conmuta con todas las componentes del momento cinético. Como consecuencia, para una partícula que se mueve libremente en tres dimensiones *el momento cinético será una constante del movimiento*.

Ejemplo: Para una partícula en tres dimensiones que se mueve bajo la acción de una fuerza central, la energía potencial depende únicamente de $x^2 + y^2 + z^2 = r^2$. Verifiquemos que $[\hat{L}_x, \hat{r}^2] = 0$. La metodología del cálculo es idéntica a la del ejemplo anterior:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{r}^2] &= [\hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y, \hat{X}^2 + \hat{Y}^2 + \hat{Z}^2] \\ &= [\hat{Y}\hat{P}_z, \hat{Z}^2] - [\hat{Z}\hat{P}_y, \hat{Y}^2] = \hat{Y} [\hat{P}_z, \hat{Z}^2] - \hat{Z} [\hat{P}_y, \hat{Y}^2] \\ &= \hat{Y}\hat{Z} [\hat{P}_z, \hat{Z}] + \hat{Y} [\hat{P}_z, \hat{Z}] \hat{Z} - \hat{Z}\hat{Y} [\hat{P}_y, \hat{Y}] - \hat{Z} [\hat{P}_y, \hat{Y}] \hat{Y} \\ &= \hat{Y}\hat{Z}(-i\hbar) + \hat{Y}(-i\hbar)\hat{Z} - \hat{Z}\hat{Y}(-i\hbar) - \hat{Z}(-i\hbar)\hat{Y} \\ &= -2i\hbar\hat{Y}\hat{Z} + 2i\hbar\hat{Z}\hat{Y} \end{aligned}$$

y como \hat{Z} e \hat{Y} conmutan

$$[\hat{L}_x, \hat{r}^2] = 0.$$

El resto de los conmutadores se obtienen por simple sustitución de índices.

Por lo tanto, para una fuerza central el momento cinético conmuta con \hat{K} (como hemos visto en el ejemplo anterior) y con \hat{V} si el potencial depende sólo de la coordenada radial (ya que las componentes del momento cinético conmutan con r^2 , inmediatamente conmutan con cualquier función de r^2). Como consecuencia, los operadores de momento angular conmutan con el hamiltoniano: el momento angular es una constante de movimiento, en completo acuerdo con el resultado clásico.

Ejercicio: Una partícula de masa m en tres dimensiones se mueve bajo la acción de una energía potencial de la forma

$$V = V(x^2 + y^2).$$

Demostrar que p_z es una constante del movimiento. Comprobar que L_z también lo es.

• Todos los ejercicios y ejemplos anteriores muestran la importancia de las reglas de conmutación canónicas dadas en el postulado 6. En general, las leyes de conservación que eran ciertas para sistemas clásicos lo siguen siendo en los análogos cuánticos. Sin embargo, las asignaciones dadas en (3.50) y (3.51) no son únicas. (Nótese que las conclusiones de los ejemplos anteriores se basaban en las reglas de conmutación y no en las asignaciones concretas para los observables de posición y momento lineal). Como veremos en las dos siguientes secciones, la interpretación directa del vector que represente al estado estará dada por cuál haya sido la asignación concreta, compatible con el postulado 6, de los observables de posición y momento.

3.11 La función de ondas en la representación de posiciones.

• La elección (3.50) de los operadores posición \hat{X} y momento \hat{P}_x para una partícula que se mueve en una dimensión es la más intuitiva si consideramos las conclusiones a las que llegamos tras la discusión del capítulo 1. En efecto, vimos allí que a la posición se le podía asignar el operador $\hat{X} = x$ y, como ya sabemos, las autofunciones de ese operador \hat{X} son las deltas de Dirac (véanse los problemas del capítulo 2). De esta forma, dado el estado genérico ψ , éste estará representado por una función de estado $\Psi(x)$ de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ (evitemos por el momento la costumbre de identificar directamente el estado con el vector ψ

del espacio de Hilbert)⁶. Nótese que $\Psi(x)$ puede escribirse en términos de las autofunciones de \hat{X} en la forma

$$\Psi(x) = \int_{\mathbb{R}} \delta(x-a) \Psi(a) da$$

y, en consecuencia, el valor de la función de estado $\Psi(a)$ puede identificarse directamente como la coordenada de la función en la base de autoestados de la posición. En consecuencia, $|\Psi(a)|^2 da$ será igual a la probabilidad de encontrar a la partícula en el intervalo $(a, a+da)$. De esta manera, el cálculo del valor medio se hace siguiendo las leyes generales que hemos visto anteriormente

$$\langle \hat{X} \rangle_{\psi} = \int_{\mathbb{R}} a |\Psi(a)|^2 da,$$

y de similar manera se evaluaría la incertidumbre.

Es importante darse cuenta de que la asignación $\hat{X} = x$ no es en absoluto un requisito necesario para obtener este último resultado. En efecto, hemos visto a partir de las reglas de conmutación canónicas, que el espectro del operador posición ha de ser continuo y, por obvias razones físicas, igual a todo \mathbb{R} . Lo que necesitamos para obtener los resultados anteriores es asegurar que las *coordenadas* del estado ψ en la base impropia de autoestados de la posición son las dadas por $\Psi(a)$; esto se asegura con la identificación $\hat{X} = x$. Lo que resulta evidente es que tenemos completa libertad para escoger la forma del operador \hat{X} siempre que seamos consistentes con la base postulacional de la M.C. Así, la expresión concreta de la función de estado puede cambiar, pero desde luego lo que ha de permanecer invariable es la función $\Psi(a)$ de las coordenadas del estado en la base de autoestados de la posición, ya que es aquí donde reside la información física. En otras palabras, *la información física relevante se obtiene a partir de los productos escalares del vector de estado que representa a ψ con otros vectores de estado*. Naturalmente tales productos escalares están unívocamente determinados por los vectores que se multiplican y, por lo tanto, son independientes de la representación concreta que escogamos dentro del espacio de Hilbert. Hasta aquí, el formalismo es totalmente general.

• Repitamos lo que acabamos de hacer con el operador \hat{X} , pero para un operador hermítico \hat{A} genérico. Sus autovectores ϕ_a constituyen una base del espacio de Hilbert de los estados cuánticos. Así, cualquier vector ψ del espacio de Hilbert (y ahora ya volvemos a usar la identificación habitual vector \leftrightarrow estado)

⁶En este apartado, y en el siguiente, denotaremos la función de onda con letras griegas mayúsculas, por ejemplo $\Psi(x)$, para evitar la confusión entre el estado ψ del espacio de Hilbert y su representación como función de onda $\Psi(x)$.

puede escribirse de la forma

$$\psi = \sum_a (\phi_a, \psi) \phi_a$$

si el espectro de \hat{A} es discreto, o

$$\psi = \int (\phi_a, \psi) \phi_a da$$

si el espectro es puramente continuo. (En el caso más general, el espectro de \hat{A} tendrá una parte discreta y una parte continua, a la vez que degeneración). Los escalares (ϕ_a, ψ) son las coordenadas del vector ψ en la base $\{\phi_a\}$ y tales coordenadas representan **unívocamente** al vector ψ . En dicha base el producto escalar de dos vectores se escribe, como ya sabemos, como

$$(\varphi, \psi) = \sum_a (\varphi, \phi_a) (\phi_a, \psi) \quad \text{o} \quad \int (\varphi, \phi_a) (\phi_a, \psi) da$$

y los elementos de matriz de un operador \hat{B} están dados por

$$(\varphi, \hat{B}\psi) = \sum_{a,a'} (\varphi, \phi_a) (\phi_a, \hat{B}\phi_{a'}) (\phi_{a'}, \psi)$$

o

$$\int \int (\varphi, \phi_a) (\phi_a, \hat{B}\phi_{a'}) (\phi_{a'}, \psi) da da'.$$

En el postulado 5 ya vimos que una base particularmente importante es la que constituyen los autovectores del operador hamiltoniano \hat{H} , pues es este operador el que determina la evolución temporal de los vectores de estado. Vimos también cómo se traduce la ecuación general (3.23) del postulado de evolución temporal en una ecuación diferencial concreta (3.33) para la evolución temporal de las coordenadas de ψ en la base constituida por los autovectores de \hat{H} .

Por otra parte, el postulado 6 nos ha señalado que otras dos bases especialmente importantes son las constituidas por los autovectores de los operadores \hat{X} y \hat{P} . Recordemos, una vez más, que en mecánica clásica las magnitudes posición y momento juegan un papel esencial como ejes del espacio de las fases, y cualquier otra magnitud mecánica se construye a partir de ellas. El postulado 6 traducía esto en términos cuánticos, pues nos dice cómo se construyen los

observables cuánticos a partir de las magnitudes clásicas mediante las reglas de conmutación canónicas y ciertas reglas de correspondencia.

• Tras esta digresión podemos volver a evaluar las coordenadas de ψ en la base de autoestados de la posición, pero sin mencionar su forma específica. Si ϕ_x son los vectores propios de \hat{X} , es decir $\hat{X}\phi_x = x\phi_x$, tenemos que ψ puede escribirse como

$$\psi = \int_{\mathbb{R}} (\phi_x, \psi) \phi_x dx \quad (3.54)$$

donde, repitamos, el conjunto de coordenadas (ϕ_x, ψ) constituye un conjunto continuo. Así, para cada valor $x \in \mathbb{R}$ existe un escalar $(\phi_x, \psi) \equiv \Psi(x)$ que es una función de la variable real x y se denomina *función de onda en la representación de posiciones* y, como ya hemos dicho, que es igual a la “ x -ésima” coordenada del estado ψ en la base de autoestados de la posición. La aplicación directa del postulado 3 nos dice entonces que $|\Psi(x)|^2 dx$ es la densidad de probabilidad asociada a la medida de encontrar la partícula en el intervalo dx alrededor de x .

En particular, si elegimos un autovector de posición $\phi_{x'}$, la función de onda será

$$\Phi_{x'}(x) \equiv (\phi_x, \phi_{x'}) = \delta(x - x'). \quad (3.55)$$

Nótese que esta función de onda *no es tampoco consecuencia* de que las deltas de Dirac sean las autofunciones del operador $\hat{X} = x$, sino de la relación de ortonormalidad generalizada a los vectores de una base ortonormal impropia. Por otra parte, sabemos que en su propia representación (es decir, en la base constituida por sus autovectores), un operador hermítico es diagonal, de modo que para el operador posición se debe cumplir que

$$(\phi_x, \hat{X}\phi_{x'}) = x'\delta(x - x'). \quad (3.56)$$

En definitiva, como eso es cierto para todo estado ϕ_x , la ecuación de autovalores para el operador \hat{X} en representación de posiciones es

$$\hat{X}\phi_x = x\phi_x \quad \Rightarrow \quad \hat{X}\delta(x - x') = x\delta(x - x'). \quad (3.57)$$

Multiplicando escalarmente por $\phi_{x'}$ los dos miembros de la ecuación (3.54), obtenemos

$$(\phi_{x'}, \psi) = \int_{\mathbb{R}} (\phi_{x'}, \phi_x) (\phi_x, \psi) dx \quad \Rightarrow \quad \Psi(x') = \int_{\mathbb{R}} \Psi(x) \delta(x - x') dx. \quad (3.58)$$

que coincide con el resultado que ya habíamos anticipado al principio de la sección.

Todo lo anterior sugiere el siguiente teorema:

TEOREMA: En la representación en la que el operador posición es $\hat{X} = x$, si el estado cuántico de una partícula queda descrito por la función normalizada $\Psi(x)$, entonces

$$\rho(x) = |\Psi(x)|^2 \quad (3.59)$$

es la densidad de probabilidad asociada a una medida de la posición. Esto significa que $\rho(x)dx$ es la probabilidad de que al medir la posición de la partícula se obtenga un valor dentro del intervalo $(x, x + dx)$. A $\Psi(x)$ se le denomina *función de onda de la partícula en la representación de posiciones* o, simplemente, *función de onda*.

• Con esta asignación para el operador de posición y la regla de conmutación canónica $[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar$, es fácil ver que la asignación adecuada para el operador momento \hat{P}_x es (siempre en la representación de posiciones)

$$\hat{P}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}. \quad (3.60)$$

Así, mediante sustitución directa ya podemos escribir la asignación del operador hamiltoniano en la representación de posiciones y, por ende, también la ecuación de Schrödinger. Sin embargo es instructivo hacerlo a partir de los autoestados de la posición, ya que éste es el procedimiento general sugerido por los postulados de la M.C. Si utilizamos el operador hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2m} + V(\hat{X})$$

en la ecuación (3.23) y multiplicamos esta ecuación escalarmente por ϕ_x , obtenemos

$$i\hbar \frac{d(\phi_x, \psi)}{dt} = (\phi_x, \hat{H}\psi) = \frac{1}{2m} (\phi_x, \hat{P}_x^2\psi) + (\phi_x, V(\hat{X})\psi). \quad (3.61)$$

Ahora bien,

$$\begin{aligned} (\phi_x, \hat{P}_x^2\psi) &= \int_{\mathbb{R}} (\phi_x, \phi_{x'}) \left(-i\hbar \frac{d}{dx'} \right)^2 (\phi_{x'}, \psi) dx' \\ &= -\hbar^2 \int_{\mathbb{R}} \delta(x - x') \frac{d^2\Psi(x')}{dx'^2} dx' = -\hbar^2 \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} \end{aligned} \quad (3.62)$$

y

$$\begin{aligned} (\phi_x, V(\hat{X})\psi) &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} (\phi_x, \phi_{x'}) (\phi_{x'}, V(x)\phi_{x''}) (\phi_{x''}, \psi) dx' dx'' \\ &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \delta(x - x') V(x) \delta(x' - x'') \Psi(x'') dx' dx'' = V(x) \Psi(x). \end{aligned} \quad (3.63)$$

De este modo, la ecuación (3.61) queda

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, t), \quad (3.64)$$

que es la *ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en representación de posiciones*. El segundo miembro de (3.64) es, obviamente, la actuación del operador hamiltoniano sobre la función de ondas $\Psi(x, t)$.

• A partir de la función de ondas $\Psi(x)$ podemos escribir tanto el valor esperado de la posición

$$\langle \hat{X} \rangle_\psi = \int_{\mathbb{R}} x \rho(x) dx = \int_{\mathbb{R}} x |\Psi(x)|^2 dx,$$

como el del momento lineal

$$\begin{aligned} \langle \hat{P}_x \rangle_\psi &= (\psi, \hat{P}_x \psi) = \int_{\mathbb{R}} (\psi, \phi_x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) (\phi_x, \psi) dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \Psi(x) dx. \end{aligned}$$

Dado que $\langle \hat{P}_x \rangle_\psi$ es un número real, tomando complejos conjugados en la anterior igualdad

$$\langle \hat{P}_x \rangle_\psi = \int_{\mathbb{R}} \Psi(x) \left(i\hbar \frac{d}{dx} \right) \Psi^*(x) dx$$

y, sumando miembro a miembro y dividiendo entre dos, obtenemos

$$\langle \hat{P}_x \rangle_\psi = \int_{\mathbb{R}} \frac{i\hbar}{2} \left(\Psi(x) \frac{d\Psi^*(x)}{dx} - \Psi^*(x) \frac{d\Psi(x)}{dx} \right) dx. \quad (3.65)$$

A la cantidad

$$J(x) \equiv \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi(x) \frac{d\Psi^*(x)}{dx} - \Psi^*(x) \frac{d\Psi(x)}{dx} \right) \quad (3.66)$$

se le llama **corriente de probabilidad**. Podemos entonces escribir que

$$\langle \hat{P}_x \rangle_\psi = m \int_{\mathbb{R}} J(x) dx,$$

por lo que $J(x)$ adquiere la interpretación hidrodinámica de un campo de velocidades de la partícula, al igual que $m\rho(x)$ sería su campo de densidades. Naturalmente esta imagen es figurada, pero como veremos a continuación da lugar a un resultado que sí tiene interpretación física real.

Ejercicio: Para una partícula en una dimensión bajo la acción de un potencial $V(x)$, obtenga los operadores asociados a la energía cinética \hat{K} , a la energía total \hat{H} , y a la fuerza \hat{F} . Particularice el caso para un *oscilador armónico unidimensional* de masa m y frecuencia o pulsación ω , en el que la energía potencial es $V(x) = m\omega^2 x^2/2$.

Ejercicio: Demostrar que si la función de ondas de una partícula es real, entonces su corriente de probabilidad es nula. Como consecuencia, probar que el valor esperado del momento lineal para una partícula cuya función de onda es real resulta ser nulo. Nótese que este resultado es cierto aunque la función de onda no sea normalizable.

Ejercicio: Sabemos que si $f(x)$ es una función par y $g(x)$ es impar, el producto escalar (f, g) en la recta real \mathbb{R} es nulo. Demostrar que los operadores \hat{X} y \hat{P}_x cambian la paridad, esto es que si $f(x)$ es una función par (impar) entonces $\hat{X}f(x)$ y $\hat{P}_x f(x)$ son funciones impares (pares). De esta manera, demostrar que $\langle \hat{X} \rangle_\psi = \langle \hat{P}_x \rangle_\psi = 0$ para cualquier estado ψ de paridad bien definida (esto es, para cualquier estado cuya función de ondas $\Psi(x)$ sea par o impar). Extender este análisis a los operadores \hat{X}^n y \hat{P}_x^n , siendo n un número natural. En concreto, demostrar que si n es par los operadores \hat{X}^n , \hat{P}_x^n conservan la paridad y que si n es impar, cambian la paridad.

• Introduzcamos ahora la dependencia temporal de la función de onda. Sea entonces el estado normalizado $\Psi(x, t)$, la densidad de probabilidad $\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$ y la correspondiente corriente de probabilidad $J(x, t)$. Veamos cómo es la evolución temporal de $\rho(x, t)$. Ya que $\rho(x, t) = \Psi(x, t)\Psi^*(x, t)$, tendremos que

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = \Psi(x, t) \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} + \Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}$$

y, teniendo en cuenta (3.64), resulta

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) &= -\Psi(x, t) \left(\frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) \right)^* - \Psi^*(x, t) \left(\frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) \right) \\ &\quad + \Psi(x, t) \left(\frac{1}{i\hbar} V(x) \Psi^*(x, t) \right) + \Psi^*(x, t) \left(\frac{1}{i\hbar} V(x) \Psi(x, t) \right). \end{aligned}$$

Ahora bien, $V(x)$ es real por lo que los dos últimos sumandos se anulan entre sí. Queda por tanto

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi(x, t) \frac{\partial^2 \Psi^*(x, t)}{\partial x^2} - \Psi^*(x, t) \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \right),$$

expresión que puede ser reescrita (compruébese) como

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi(x, t) \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} - \Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right) \right\}.$$

Pero el término entre llaves es, precisamente, la corriente de probabilidad. Queda entonces

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} J(x, t), \quad (3.67)$$

expresión conocida como **ecuación de continuidad**. Si ahora consideramos la probabilidad $\text{Prob}(x \in [a, b])$ de encontrar a la partícula en el intervalo $[a, b]$ tenemos

$$\text{Prob}_\psi(x \in [a, b]) = \int_a^b \rho(x, t) dt$$

y, como consecuencia

$$\frac{\partial \text{Prob}_\psi(x \in [a, b])}{\partial t} = J(a, t) - J(b, t), \quad (3.68)$$

que es la forma integrada de la ecuación de continuidad. Esta última fórmula nos da la mencionada interpretación física de $J(x, t)$ con reminiscencias de la hidrodinámica de los medios continuos: si en un intervalo $[a, b]$ el flujo neto de corriente de probabilidad $J(a, t) - J(b, t)$ es positivo (negativo), entonces la probabilidad de encontrar a la partícula en ese intervalo tiende a aumentar (disminuir) en el tiempo.

Ejercicio: Demostrar que si la partícula está en un estado estacionario $\Psi(x, t) = \alpha(t)\phi(x)$, con $|\alpha(t)| = 1$, entonces $\rho(x, t)$ es constante en el tiempo. Como consecuencia, probar que $J(x, t) = \text{cte}$.

• Para terminar este apartado, veamos cuál es la función de onda $\Phi_p(x)$ correspondiente a un estado propio ϕ_p del momento. Multiplicando escalarmente por ϕ_x la ecuación de valores propios para ϕ_p , obtenemos

$$\hat{P}_x \phi_p = p \phi_p \quad \Rightarrow \quad (\phi_x, \hat{P}_x \phi_p) = p (\phi_x, \phi_p) \equiv p \Phi_p(x).$$

Ahora bien

$$\begin{aligned} (\phi_x, \hat{P}_x \phi_p) &= \int_{\mathbb{R}} (\phi_x, \phi_{x'}) (\phi_{x'}, \hat{P}_x \phi_p) (\phi_{x'}, \phi_p) dx' \\ &= \int_{\mathbb{R}} \delta(x - x') \left(-i\hbar \frac{d}{dx'} \right) \Phi_p(x') dx' \\ &= \int_{\mathbb{R}} -i\hbar \frac{d\Phi_p(x')}{dx} \delta(x - x') dx' = -i\hbar \frac{d\Phi_p(x)}{dx}. \end{aligned}$$

En definitiva,

$$-i\hbar \frac{d\Phi_p(x)}{dx} = p \Phi_p(x) \Rightarrow \Phi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(ipx/\hbar), \quad (3.69)$$

donde la constante $(1/\sqrt{2\pi\hbar})$ se ha elegido para que se satisfaga la relación de ortonormalidad generalizada

$$(\Phi_p, \Phi_q) = \delta(p - q). \quad (3.70)$$

La función de onda $\Phi_p(x)$ buscada es, pues, una onda plana.

Ejercicio: Verifíquese la igualdad (3.70).

3.12 La función de ondas en la representación de momentos.

• En la sección anterior escogimos como base ortonormal de trabajo la constituida por las autofunciones de la posición, en la que la representación de los observables posición y momento es la dada por (3.50) y las *coordenadas* de un estado cuántico son la propia función de ondas $\Psi(x)$.

Supongamos que ahora tomamos como base del espacio de estados cuánticos la constituida por los autovectores ϕ_p del operador momento \hat{P}_x . También ahora el espectro es continuo: los autovalores p llenan la recta real. Entonces, cualquier vector de estado ψ puede escribirse en la forma

$$\psi = \int_{\mathbb{R}} (\psi, \phi_p) \phi_p dp. \quad (3.71)$$

El conjunto continuo de valores $(\psi, \phi_p) \equiv \tilde{\Psi}(p)$ es una función de la variable real p que se denomina *función de onda en la representación de momentos*. Multiplicando escalarmente la expresión anterior por ϕ_x tenemos

$$(\phi_x, \psi) = \int_{\mathbb{R}} (\psi, \phi_p) (\phi_x, \phi_p) dp \Rightarrow \Psi(x) = \int_{\mathbb{R}} \tilde{\Psi}(p) \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \right\} dp, \quad (3.72)$$

donde

$$\tilde{\Psi}(p) \equiv (\phi_p, \psi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} \Psi(x) \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) dx \quad (3.73)$$

es la *transformada de Fourier* de la función de onda $\Psi(x)$ en la representación de posiciones (véase el apartado anterior) y, en este contexto, la expresión de un simple cambio de base.

Repitamos el procedimiento que vimos en la sección anterior para el operador posición. En la representación de momentos, cualquier función del operador momento tiene una forma sencilla, pues es diagonal en su propia base,

$$\left(\phi_p, \hat{P}_x \phi_{p'}\right) = p \delta(p - p') \quad \left(\phi_p, f(\hat{P}_x) \phi_{p'}\right) = f(p) \delta(p - p')$$

es decir, $\hat{P}_x = p\hat{I}$. Con esto, y la condición $[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar$, es fácil ver que la asignación adecuada para el operador \hat{X} en esta representación es $\hat{X} = i\hbar(d/dp)$.

Naturalmente, $|\tilde{\Psi}(p)|^2 dp = \rho_P(p) dp$ es la densidad de probabilidad asociada a la medida del momento lineal y, como consecuencia los valores medios del momento lineal y de la energía cinética son:

$$\langle \hat{P}_x \rangle_\Psi = \int_{\mathbb{R}} p |\tilde{\Psi}(p)|^2 dp \quad ; \quad \langle \hat{K} \rangle_\Psi = \frac{1}{2m} \int_{\mathbb{R}} p^2 |\tilde{\Psi}(p)|^2 dp. \quad (3.74)$$

• Multiplicando ahora escalarmente la ecuación (3.23) por ϕ_p obtenemos la ecuación de evolución temporal

$$i\hbar \frac{d(\phi_p, \psi)}{dt} = \frac{1}{2m} (\phi_p, \hat{P}_x^2 \psi) + (\phi_p, V(\hat{X}) \psi) \quad (3.75)$$

Pero

$$\begin{aligned} (\phi_p, V(\hat{X}) \psi) &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} (\phi_p, \phi_x) (\phi_x, V(\hat{X}) \phi_{x'}) (\phi_{x'}, \phi_{p'}) (\phi_{p'}, \psi) dx dx' dp' \\ &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} (\phi_p, \phi_x) (\phi_x, V(\hat{X}) \phi_{x'}) (\phi_{p'}, \phi_{x'})^* (\phi_{p'}, \psi) dx dx' dp' \\ &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} V(x) \delta(x - x') \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ip'x'}{\hbar}} \tilde{\Psi}(p') dx dx' dp' \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} V(x) e^{\frac{i(p'-p)x}{\hbar}} \tilde{\Psi}(p') dx dp' \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{V}(p' - p) \tilde{\Psi}(p') dp', \end{aligned}$$

siendo

$$\tilde{V}(p' - p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} V(x) \exp\left(\frac{i(p' - p)x}{\hbar}\right) dx \quad (3.76)$$

la transformada de Fourier del potencial $V(x)$.

Así pues, la evolución temporal de $\tilde{\Psi}(p, t)$ es

$$i\hbar \frac{d\tilde{\Psi}(p, t)}{dt} = \frac{p^2}{2m} \tilde{\Psi}(p, t) + \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{V}(p - p') \tilde{\Psi}(p') dp', \quad (3.77)$$

que es la *ecuación de Schrödinger en la representación de momentos*. Teniendo en cuenta la definición de *producto de convolución* $\tilde{V}(p) * \tilde{\Psi}(p)$, la ecuación anterior se puede escribir como

$$i\hbar \frac{d\tilde{\Psi}(p, t)}{dt} = \frac{p^2}{2m} \tilde{\Psi}(p, t) + \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} [\tilde{V}(p) * \tilde{\Psi}(p)]. \quad (3.78)$$

Ejercicio: Aplicar la transformada inversa de Fourier a cada término de la ecuación (3.78) y comparar el resultado con (3.64).

• Como consecuencia de las relaciones canónicas de conmutación entre la posición y el momento, la dualidad onda-corpúsculo tiene una explicación transparente bajo el formalismo que estamos viendo en este capítulo. Si la partícula está muy localizada (carácter corpuscular de la partícula) alrededor de un punto x_0 , tendremos que su función de ondas es muy similar a una delta de Dirac centrada en x_0 . Por el contrario, si su momento lineal está prácticamente definido, siendo su valor p_0 (el comportamiento ondulatorio de la partícula se corresponde a un estado en el que el momento está muy bien definido), el estado cuántico de la partícula será la función $\exp(ipx/\hbar)/\sqrt{2\pi\hbar}$, que es una onda plana cuya longitud de onda es, naturalmente, $\lambda = h/p$: la fórmula de De Broglie. Ambos límites no se puedan satisfacer simultáneamente y esto refleja el hecho de que \hat{X} y \hat{P}_x **no son compatibles**. Si aplicamos la relación de incertidumbre generalizada (3.15) tendremos que, para cualquier estado cuántico,

$$(\Delta \hat{X})_{\psi} (\Delta \hat{P}_x)_{\psi} \geq \frac{\hbar}{2} \quad (3.79)$$

que es la relación de incertidumbre posición/momento de Heisenberg. En definitiva, el carácter corpuscular *puro* está asociado al límite $\Delta \hat{X} \rightarrow 0$, mientras que el carácter ondulatorio *puro*, incompatible con el anterior, se corresponde al límite $\Delta \hat{P}_x \rightarrow 0$.

Sin embargo, el carácter ondulatorio es algo intrínseco a la partícula, puesto que su estado siempre se podrá escribir como combinación lineal de ondas planas a través de (3.72). En general, la función de onda de la

partícula nunca será ni una onda plana (con longitud de onda bien definida) ni una delta de Dirac (en la que la densidad de probabilidad está concentrada en un punto). La función $\Psi(x, t)$ será, pues, un *paquete de ondas* dado, como acabamos de decir, por el desarrollo de Fourier (3.72) cuya interpretación física está ligada directamente a la naturaleza probabilística subyacente al postulado 3. Esta interpretación probabilista, más general, nos impide afirmar que una partícula *es* una onda (también nos impide decir que *es* un corpúsculo). La partícula es un ente bien definido, siendo su función de onda una representación válida de su estado que nos permite extraer información física relevante. Si, como ya hemos dicho, describimos el estado a partir de sus coordenadas en una base discreta del espacio de los estados, tendríamos que el estado está representado por una sucesión de números complejos, ¡pero a nadie se le ocurriría decir que una partícula *es* una sucesión convergente de números complejos!

Ejercicio: El hecho de que la posición y el momento sean incompatibles hace que en límite cuántico expresiones como “partícula en reposo” dejen de tener sentido. Si, a pesar de ello, definimos una partícula en reposo como aquella para la cual el valor esperado de la energía cinética es nulo, ¿cuál será entonces la función de ondas de la partícula?, ¿dónde estará localizada la misma?

3.13 Ecuaciones de Ehrenfest.

Consideremos el hamiltoniano de una partícula que se mueve en una dimensión bajo la acción de un potencial $V(x)$, descrita por el hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{P}_x^2 + V(\hat{X}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x). \quad (3.80)$$

Si la función de onda de la partícula es $\Psi(x, t)$, los valores esperados de la posición y el momento serán

$$\langle \hat{X} \rangle_t = \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx \quad ; \quad \langle \hat{P}_x \rangle_t = -i\hbar \int_{\mathbb{R}} \Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx.$$

Sin embargo, vimos en la sección 3.8 que dicha evolución puede calcularse directamente sin necesidad de conocer la expresión explícita del estado cuántico $\Psi(x, t)$, ya que se puede expresar en función del conmutador del observable con el hamiltoniano.

- Así, la **evolución temporal del valor medio de la posición** está dada por

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{X} \rangle_t = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{X}, \hat{H}] \rangle_t.$$

Si ahora tenemos en cuenta que \hat{X} conmuta con $V(\hat{X})$, sustituyendo y usando el álgebra de conmutadores obtenemos

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{X} \rangle_t = \frac{1}{2im\hbar} \langle [\hat{X}, \hat{P}_x^2] \rangle_t = \frac{1}{2im\hbar} \langle \hat{P}_x [\hat{X}, \hat{P}_x] + [\hat{X}, \hat{P}_x] \hat{P}_x \rangle_t.$$

Pero, por la regla de conmutación canónica, $[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar$,

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{X} \rangle_t = \frac{1}{m} \langle \hat{P}_x \rangle_t, \quad (3.81)$$

expresión conocida como *primera ecuación de Ehrenfest*. Por tanto, en cualquier instante de tiempo **el valor medio del momento lineal es igual a la masa de la partícula multiplicada por la derivada temporal del valor medio de la posición**. Claramente, (3.81) es el análogo cuántico a la relación clásica $p(t) = m (dx(t)/dt)$.

- Procediendo de idéntica forma, la **evolución temporal de $\langle \hat{P}_x \rangle_t$** es

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{P}_x \rangle_t = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{P}_x, \hat{H}] \rangle_t = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{P}_x, V(\hat{X})] \rangle_t.$$

Para evaluar el conmutador $[\hat{P}_x, V(\hat{X})]$ veamos cómo actúa sobre un estado cualquiera $\phi(x)$ en la representación de posiciones

$$\begin{aligned} [\hat{P}_x, V(\hat{X})] \phi(x) &= \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, V(x) \right] \phi(x) \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \{V(x) \phi(x)\} + V(x) i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \phi(x). \end{aligned}$$

Efectuando la derivada

$$[\hat{P}_x, V(\hat{X})] \phi(x) = -i\hbar \left(\frac{\partial V(x)}{\partial x} \right) \phi(x),$$

por lo que

$$[\hat{P}_x, V(\hat{X})] = -i\hbar V'(\hat{X}) = i\hbar F(\hat{X}), \quad (3.82)$$

donde $F(\hat{X})$ es el operador que representa a la fuerza $F(x) = -dV(x)/dx$. De esta manera obtenemos

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{P}_x \rangle_t = \langle F(\hat{X}) \rangle_t, \quad (3.83)$$

que es la *segunda ecuación de Ehrenfest* y que constituye la forma que toma en el límite cuántico la segunda ley de Newton: **la derivada temporal del valor medio del momento lineal es igual al valor medio de la fuerza.**

Nótese, sin embargo, que en general $\langle F(\hat{X}) \rangle \neq F(\langle \hat{X} \rangle)$, por lo que al operar (3.83) no tenemos por qué obtener exactamente la misma relación entre valores esperados de la posición y el momento que en el caso clásico. El siguiente ejemplo lo aclara.

Ejemplo: Una partícula de masa m se mueve bajo la acción de un potencial

$$V(x) = \alpha x^n,$$

donde n es un entero positivo. Como consecuencia, la fuerza estará dada por

$$F(x) = -n\alpha x^{n-1}.$$

Así, para todos los casos

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{X} \rangle_t = \frac{1}{m} \langle \hat{P}_x \rangle_t$$

mientras que

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{P}_x \rangle_t = -n\alpha \langle \hat{X}^{n-1} \rangle_t.$$

Derivando otra vez respecto del tiempo (3.81)

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{X} \rangle_t = \frac{1}{m} \frac{d}{dt} \langle \hat{P}_x \rangle_t = -\frac{n\alpha}{m} \langle \hat{X}^{n-1} \rangle_t = \frac{1}{m} \langle F(\hat{X}) \rangle_t \quad (3.84)$$

La anterior expresión *no es exactamente* igual que el análogo clásico

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{n\alpha}{m} x^{n-1}$$

puesto que, mientras que esta última ecuación es integrable directamente, la relación cuántica (3.84) no lo es, ya que en general $\langle \hat{X}^{n-1} \rangle_t \neq \langle \hat{X} \rangle_t^{n-1}$.

Sólo en el caso $0 \leq n \leq 2$ sí es completa la analogía. En efecto, estudiando cada caso por separado:

a) Partícula libre: $n = 0$.

La energía potencial es constante y la fuerza es nula. Entonces

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{X} \rangle_t = 0 \quad ; \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{P}_x \rangle_t = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle \hat{P}_x \rangle_t = \langle \hat{P}_x \rangle_0 = \text{cte}$$

y la solución general es idéntica a la evolución clásica:

$$\langle \hat{X} \rangle_t = \langle \hat{X} \rangle_0 + \frac{1}{m} \langle \hat{P}_x \rangle_0 t.$$

b) Partícula sometida a una fuerza constante: $n = 1$.

Escribiendo $V(x) = -Fx$ tendremos

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{X} \rangle_t = \frac{F}{m} \quad ; \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{P}_x \rangle_t = F$$

de donde

$$\langle \hat{P}_x \rangle_t = \langle \hat{P}_x \rangle_0 + Ft$$

$$\langle \hat{X} \rangle_t = \langle \hat{X} \rangle_0 + \frac{1}{m} \langle \hat{P}_x \rangle_0 t + \frac{1}{2} \frac{F}{m} t^2.$$

c) Partícula sometida a una fuerza armónica: $n = 2$.

Escribiendo $V(x) = m\omega^2 x^2/2$, la fuerza es $F(x) = -kx$, donde la relación entre pulsación ω y constante recuperadora k es $\omega = \sqrt{k/m}$. Así

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{X} \rangle_t = -\omega^2 \langle \hat{X} \rangle_t,$$

cuya solución general es

$$\langle \hat{X} \rangle_t = A \sin(\omega t + \delta).$$

El momento lineal está dado por

$$\langle \hat{P}_x \rangle_t = m \frac{d}{dt} \langle \hat{X} \rangle_t = m\omega A \cos(\omega t + \delta).$$

Conocidas las condiciones iniciales $\langle \hat{X} \rangle_0$ y $\langle \hat{P}_x \rangle_0$ tenemos inmediatamente que

$$\langle \hat{X} \rangle_0^2 + \frac{1}{m^2 \omega^2} \langle \hat{P}_x \rangle_0^2 = A^2$$

$$m\omega \frac{\langle \hat{X} \rangle_0}{\langle \hat{P}_x \rangle_0} = \tan \delta,$$

lo que permite hallar las constantes indeterminadas A y δ . Teniendo esto en cuenta, y operando, obtenemos

$$\langle \hat{X} \rangle_t = \langle \hat{X} \rangle_0 \cos \omega t + \frac{\langle \hat{P}_x \rangle_0}{m\omega} \sin \omega t.$$

Ejercicio: Otra forma de definir una partícula en reposo es como aquella para la que $\langle \hat{P}_x \rangle_t = 0$. Por la primera ecuación de Ehrenfest, el valor esperado de la posición será constante en el tiempo, lo que indica que, al menos, es una mejor definición que la que vimos en la sección anterior. Ahora bien, ¿implica esto necesariamente que la densidad de probabilidad sea constante en el tiempo? Recuerde que el concepto clásico de reposo (partícula inmóvil localizada) no tiene sentido cuántico.

- La expresión

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{X} \rangle_t = \frac{1}{m} \langle F(\hat{X}) \rangle_t$$

sería *exactamente* igual a la ecuación del movimiento clásica sólo si, como ya hemos dicho, $\langle F(\hat{X}) \rangle_t = F(\langle \hat{X} \rangle_t)$. Sólo en los tres casos discutidos en el ejemplo anterior esto sucede. Sin embargo consideremos el *límite clásico*, entendido éste como aquel en el que $|\Delta \hat{X}| \ll \langle \hat{X} \rangle_t$ esto es, la dispersión relativa de la distribución asociada a la medida de la posición es muy pequeña. En este caso $\langle F(\hat{X}) \rangle_t \simeq F(\langle \hat{X} \rangle_t)$ y tendremos la completa equivalencia entre las ecuaciones del movimiento clásica y cuántica. De nuevo es interesante que Ud. observe que todos estos resultados son consecuencia directa de las reglas de conmutación canónica dadas en el postulado 6.

- Naturalmente, el hamiltoniano no tiene por qué tener la forma (3.80) para todos los sistemas. Ya mencionamos la posibilidad de que \hat{H} dependiese explícitamente del tiempo o bien pudiese suceder que la “fuerza” a la que esté sometida la partícula no sea conservativa (la evolución de una partícula en el seno de un campo magnético es un buen ejemplo, en el que además tendríamos que introducir el espín). El estudio completo de sistemas en los que el hamiltoniano es dependiente del tiempo es extremadamente rico y se estudia en cursos posteriores; sin embargo merece la pena analizar un ejemplo en el que el hamiltoniano no es “energía cinética más energía potencial” y, por tanto, las ecuaciones de Ehrenfest no serán válidas en la forma dada en (3.81) y (3.83).

Ejemplo: Consideremos una partícula sometida a la acción del hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{P}_x^2 + \frac{1}{2\tau} (\hat{P}_x \hat{X} + \hat{X} \hat{P}_x),$$

donde τ es una constante con dimensiones de tiempo. Para este sistema se cumplirá que

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{X} \rangle_t = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{X}, \hat{H}] \rangle_t = \frac{1}{2im\hbar} \langle [\hat{X}, \hat{P}_x^2] \rangle_t + \frac{1}{2\tau i\hbar} \langle [\hat{X}, \hat{X}\hat{P}_x + \hat{P}_x\hat{X}] \rangle_t.$$

El primer sumando del segundo miembro ya lo conocemos, es $\langle \hat{P}_x \rangle_t / m$. En cuanto al segundo conmutador se tiene que

$$[\hat{X}, \hat{X}\hat{P}_x + \hat{P}_x\hat{X}] = [\hat{X}, \hat{X}\hat{P}_x] + [\hat{X}, \hat{P}_x\hat{X}] = 2i\hbar\hat{X},$$

por lo que

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{X} \rangle_t = \frac{1}{m} \langle \hat{P}_x \rangle_t + \frac{1}{\tau} \langle \hat{X} \rangle_t.$$

Por otro lado, la evolución temporal del momento lineal es

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{P}_x \rangle_t = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{P}_x, \hat{H}] \rangle_t = \frac{1}{2i\tau\hbar} \langle [\hat{P}_x, \hat{X}\hat{P}_x + \hat{P}_x\hat{X}] \rangle_t.$$

Efectuando el conmutador:

$$[\hat{P}_x, \hat{X}\hat{P}_x + \hat{P}_x\hat{X}] = -2i\hbar\hat{P}_x,$$

y nos queda

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{P}_x \rangle_t = -\frac{1}{\tau} \langle \hat{P}_x \rangle_t.$$

Esta ecuación diferencial admite como solución inmediata

$$\langle \hat{P}_x \rangle_t = \langle \hat{P}_x \rangle_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right),$$

con lo que la evolución de la posición está regida por la ecuación

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{X} \rangle_t = \frac{\langle \hat{P}_x \rangle_0}{m} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) + \frac{1}{\tau} \langle \hat{X} \rangle_t,$$

cuya solución es

$$\langle \hat{X} \rangle_t = a_0 \exp\left(\frac{t}{\tau}\right) - \frac{\tau \langle \hat{P}_x \rangle_0}{2m} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right),$$

siendo

$$a_0 = \langle \hat{X} \rangle_0 + \frac{\tau \langle \hat{P}_x \rangle_0}{2m}.$$

3.14 Propiedades generales de los autoestados de la energía.

• Hemos visto que los autoestados del operador hamiltoniano son estados estacionarios que no evolucionan (salvo una fase multiplicativa de módulo unidad) en el tiempo. A su vez también hemos visto que todo estado cuántico puede escribirse como combinación lineal de los estados estacionarios. De esta manera resulta inmediato el estudiar la evolución temporal tanto de cualquier estado como de los valores esperados en dicho estado. Por ello, la obtención y el análisis de los autoestados de la energía es esencial a la hora de estudiar un problema bajo el formalismo de la Mecánica Cuántica. Aquí nos limitaremos al caso sencillo de una partícula que se mueve en una dimensión. Para otros sistemas físicos habrá que utilizar técnicas matemáticas distintas, pero muchas de las ideas que vamos a ver seguirán siendo válidas.

Como ya sabemos, el operador hamiltoniano de una partícula de masa m que se mueve en una dimensión bajo un potencial $V(x)$ está dado en la representación de posiciones por

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x). \quad (3.85)$$

Los estados estacionarios con energía E ,

$$\Psi_E(x, t) = \varphi_E(x) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right), \quad (3.86)$$

poseen una parte no dependiente del tiempo $\varphi_E(x)$ solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, que en esta representación es

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right) \varphi_E(x) = E \varphi_E(x) \quad (3.87)$$

(verifique que eso es cierto, sustituyendo $\Psi_E(x, t)$ en la ecuación de Schrödinger).

• En primer lugar conviene hacer un análisis general de cómo son las energías permitidas E y las correspondientes autofunciones $\varphi_E(x)$. Para ello consideremos un potencial genérico (véase la figura 3.3) y definamos

$$\begin{aligned} V_0 &= \min V(x) \\ V_+ &= \lim_{x \rightarrow +\infty} V(x) \\ V_- &= \lim_{x \rightarrow -\infty} V(x). \end{aligned}$$

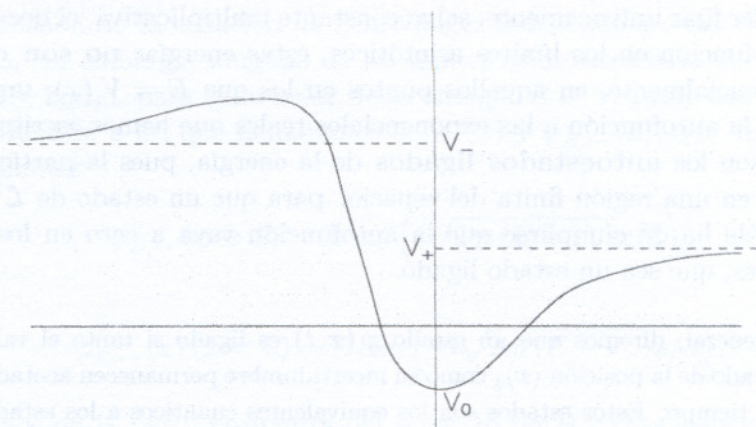


Fig. 3.3.

Supondremos, sin pérdida de generalidad, que $V_0 \leq V_+ \leq V_-$.

1.- Si hay algún autovalor de la energía en el intervalo (V_0, V_+) , esto es $V_0 < E < V_+$, la correspondiente autofunción $\varphi_E(x)$ verifica

$$\varphi_E(x \gg 0) \propto \exp\left(-\sqrt{2m(V_+ - E)x/\hbar}\right).$$

En efecto, si $x \gg 0$ entonces $V(x) \simeq V_+$ y por sustitución se puede comprobar que la anterior expresión satisface la ecuación de Schrödinger en esa zona $x \gg 0$. La otra posible solución, $\varphi_E(x \gg 0) \propto \exp\left(+\sqrt{2m(V_+ - E)x/\hbar}\right)$, no es admisible, puesto que entonces existiría una probabilidad infinita de encontrar a la partícula en $+\infty$.

Análogamente, en la zona en que $x \ll 0$ la función que satisface la ecuación de Schrödinger es

$$\varphi_E(x \ll 0) \propto \exp\left(\sqrt{2m(V_- - E)x/\hbar}\right).$$

Por tanto, los autoestados con energías $E \in (V_0, V_+)$ tienden asintóticamente a cero cuando $x \rightarrow \pm\infty$. De esta forma, estos autoestados son **normalizables**. Pero **sólo para determinados valores de E** es posible encontrar una autofunción que satisfaga simultáneamente ambos límites asintóticos: la ecuación de autovalores $\hat{H}\varphi_E(x) = E\varphi_E(x)$ tiene solución únicamente para esos valores concretos de E y dichas energías constituyen el **espectro puntual** de \hat{H} , $\sigma_p(\hat{H})$.

Al poder fijar unívocamente, salvo constante multiplicativa, el decaimiento de la autofunción en los límites asintóticos, estas energías **no son degeneradas**: esencialmente, en aquellos puntos en los que $E = V(x)$, uno puede empalmar la autofunción a las exponenciales reales que hemos escrito antes

Estos son los **autoestados ligados** de la energía, pues la partícula está localizada en una región finita del espacio: para que un estado de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ sea normalizable ha de cumplirse que la autofunción vaya a cero en los límites $\pm\infty$, esto es, que sea un estado ligado.

En general, diremos que un estado $\psi(x, t)$ es ligado si tanto el valor esperado de la posición $\langle x \rangle_t$ como su incertidumbre permanecen acotados en el tiempo. Estos estados son los equivalentes cuánticos a los estados clásicos de una partícula ligada por un potencial. Sin embargo conviene no confundir los términos de estado ligado y estado estacionario: un estado ligado no es necesariamente un autoestado de la energía.

2.- Para un autovalor de la energía en el intervalo (V_+, V_-) , esto es $V_+ < E < V_-$, los correspondientes límites asintóticos son

$$\begin{aligned}\varphi_E(x \gg 0) &= A \exp\left(i\sqrt{2m(E - V_+)x/\hbar}\right) + B \exp\left(-i\sqrt{2m(E - V_+)x/\hbar}\right) \\ \varphi_E(x \ll 0) &\propto \exp\left(\sqrt{2m(V_- - E)x/\hbar}\right).\end{aligned}$$

En este caso, $\varphi_E(x)$ **no es normalizable** (la autofunción no tiende a cero en ambos límites $\pm\infty$), por lo que representa un *autoestado no ligado* de la energía (también llamado *autoestado de colisión*). Es fácil ver que para **cualquier energía** $E \in (V_+, V_-)$ existe una solución de (3.87) con el decaimiento asintótico que acabamos de describir, por lo que esa energía E es parte del **espectro continuo** de \hat{H} . Salvo constante multiplicativa, sólo el límite $x \ll 0$ está unívocamente fijado por su decaimiento; por ello, esta parte del espectro continuo es también **no degenerada**, y la designaremos por $\sigma_{c\neq 1}(\hat{H})$.

3.- Por último, si $E > V_-$, los límites asintóticos son

$$\begin{aligned}\varphi_E(x \gg 0) &= A \exp\left(i\sqrt{2m(E - V_+)x/\hbar}\right) + B \exp\left(-i\sqrt{2m(E - V_+)x/\hbar}\right) \\ \varphi_E(x \ll 0) &= C \exp\left(i\sqrt{2m(E - V_-)x/\hbar}\right) + D \exp\left(-i\sqrt{2m(E - V_-)x/\hbar}\right).\end{aligned}$$

De nuevo, $\varphi_E(x)$ **no es normalizable** (la autofunción no tiende a cero en ninguno de los límites $\pm\infty$). Igualmente, para **cualquier energía** $E > V_-$

existe solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. En este caso, sin embargo, ninguno de los límites asintóticos está unívocamente fijado. De hecho, para cada valor de la energía $E > V_-$, hay dos soluciones independientes, a las que llamaremos $\varphi_{E,\rightarrow}(x)$ y $\varphi_{E,\leftarrow}(x)$, que viene fijadas por los límites

$$\varphi_{E,\rightarrow}(x \gg 0) = A \exp(i\sqrt{2m(E - V_+)}x/\hbar)$$

$$\varphi_{E,\leftarrow}(x \ll 0) = D \exp(-i\sqrt{2m(E - V_-)}x/\hbar)$$

y seguimos en la parte **continua** del espectro de \hat{H} . Esas soluciones se corresponden, respectivamente, a ondas planas que se propagan hacia la derecha cuando $x \gg 0$ y hacia la izquierda cuando $x \ll 0$. En definitiva, si $E > V_-$, los valores espectrales de la energía son **doblemente degenerados**. En esta parte del espectro, simbolizado por $\sigma_{c\#2}(\hat{H})$, cualquier autoestado es combinación lineal de dos autoestados no ligados independientes.

La discusión anterior puede generalizarse. Por ejemplo, si $V_0 = V_+$ no puede haber espectro puntual, mientras que si $V_- = \infty$ no hay espectro continuo doblemente degenerado, etc. Los resultados pueden resumirse en la siguiente tabla. Nótese que si $V_- \geq V_+$ simplemente tendremos que intercambiar V_+ y V_- .

	$\sigma_p(\hat{H})$	$\sigma_{c\#1}(\hat{H})$	$\sigma_{c\#2}(\hat{H})$
$V_0 < V_+ < V_- < \infty$	$a_n \in (V_0, V_+)$	(V_+, V_-)	(V_-, ∞)
$V_0 = V_+ < V_- < \infty$	\emptyset	(V_+, V_-)	(V_-, ∞)
$V_0 < V_+ = V_- < \infty$	$a_n \in (V_0, V_+)$	\emptyset	(V_+, ∞)
$V_0 < V_+ < V_- = \infty$	$a_n \in (V_0, V_+)$	(V_+, ∞)	\emptyset
$V_0 = V_+ = V_- < \infty$	\emptyset	\emptyset	(V_0, ∞)
$V_0 = V_+ < V_- = \infty$	\emptyset	(V_+, ∞)	\emptyset
$V_0 < V_+ = V_- = \infty$	$a_n \in (V_0, \infty)$	\emptyset	\emptyset

Nota: el símbolo \emptyset denota el conjunto vacío.

- Una vez que hemos caracterizado el espectro de \hat{H} veamos algunas propiedades de las autofunciones de la energía.

1.- En primer lugar, deben pertenecer al dominio de \hat{H} , por lo que han de ser doblemente derivables. En concreto, **para cualquier autoestado de la energía, ligado o no, la función de onda y su derivada han de**

ser continuas, siempre y cuando no existan discontinuidades infinitas del potencial. En efecto, supongamos que el potencial tiene una discontinuidad finita en $x = 0$. Escribiendo la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo como

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

e integrándola entre $-\epsilon$ y $+\epsilon$ tenemos

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \frac{d^2 \varphi_E(x)}{dx^2} dx = \varphi'_E(\epsilon) - \varphi'_E(-\epsilon) = \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \varphi_E(x).$$

Tomando el límite $\epsilon \rightarrow 0$, obtenemos la continuidad de la derivada:

$$\varphi'_E(0^+) - \varphi'_E(0^-) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \varphi_E(x) = 0$$

si, como hemos dicho, la discontinuidad del potencial es finita.

El caso particular en que la energía potencial tenga una discontinuidad de tipo infinito merece una matización. Sea, por ejemplo, el potencial de barrera infinita

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{si } x \leq a \\ v(x) & \text{si } x > a \end{cases}.$$

Entonces, toda función de ondas físicamente admisible ha de ser nula en el intervalo $(-\infty, a)$, puesto que de lo contrario el valor esperado de la energía sería infinito. Puesto que la función de ondas ha de ser continua, tendremos que $\varphi_E(a) = 0$, aunque la demostración anterior nos dice que la derivada de φ_E ya no tiene por qué ser continua en $x = a$ (esto es, la derivada por la derecha en $x = a$ de una autofunción de la energía puede ser distinta de cero). Así, todos los autoestados del momento y aquellos autoestados de la posición con autovalor $x_0 < a$ no son físicamente admisibles por doble motivo: no son normalizables y, además, el valor esperado de la energía sería infinito.

Otra opción sería definir el espacio de los estados igual a $\mathcal{L}^2[a, +\infty)$. En este caso, las funciones de onda físicamente admisibles se han de anular en $x = a$ (y, naturalmente, en $x = +\infty$) porque el operador momento lineal \hat{P}_x no sería hermítico para aquellas funciones para las que $\psi(a) \neq 0$; pero no existe condición alguna sobre el valor de las derivadas de $\varphi_E(x)$ en $x = a$, puesto que este punto es el extremo

del dominio de definición de los vectores del espacio de Hilbert. De cualquier manera, ambas opciones son, a efectos prácticos, equivalentes: no podemos imponer que la derivada por la derecha de la función de ondas en $x = a$ sea igual a cero. (Este tipo de detalles técnicos tienen su importancia en formulaciones matemáticamente rigurosas de la M.C.)

Respecto de la derivabilidad de la función de ondas podemos decir una cosa más. Para un estado cualquiera con significado físico, la función de ondas ha de ser infinitamente derivable. Esto se debe a que, en el caso de que una derivada de orden finito fuese discontinua, puede entonces demostrarse que existe un valor n finito para el que el valor esperado de \hat{P}_x^n es infinito. La condición de ser infinitamente derivable deja de ser una exigencia en aquellos puntos, como el comentado anteriormente, en el que el potencial tenga una discontinuidad de salto infinito (sin entrar en discusión sobre si es admisible físicamente la existencia de tal tipo de discontinuidades).

2.- Por otra parte, ya que $V(x)$ es real, dada una solución $\varphi_E(x)$ de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, su compleja conjugada también lo es. Como consecuencia, puesto que el espectro puntual y la primera parte del continuo son no degenerados, no queda más remedio que **las autofunciones $\varphi_E(x)$ de la energía sean, salvo constante multiplicativa, reales** para esta parte del espectro. Esto implica, entre otras cosas, que la corriente de probabilidad es nula y, por tanto, el valor esperado del momento lineal es igual a cero para los correspondientes estados estacionarios.

3.- Finalicemos enunciando una propiedad (que no demostraremos) referente a los **autoestados ligados** de la energía de una partícula que se mueve en una dimensión. Sea $\{E_0, E_1, E_2, \dots\}$ el espectro puntual del hamiltoniano del sistema y $\phi_0(x), \phi_1(x), \phi_2(x)$ las correspondientes autofunciones. La función de onda $\phi_0(x)$ corresponde al estado fundamental del sistema, mientras que las funciones $\phi_1(x), \phi_2(x)$, etc. corresponden al primer, segundo, etc., estados excitados. Resulta que el número de nodos (ceros aislados de una función) del estado estacionario $\phi_n(x)$ es igual a n . En otras palabras, **la autofunción del estado fundamental no tiene nodos, la función de ondas del primer estado excitado posee un nodo, y así sucesivamente.**

3.15 El formalismo cuántico en notación de Dirac.*

En secciones anteriores hemos visto dos formas alternativas y equivalentes de representar los operadores y los estados cuánticos: la representación de

posiciones y la representación de momentos. Estas dos no son las únicas representaciones posibles. De hecho, dada cualquier base ortonormal, continua o discreta, de \mathcal{H} (y recordemos que los autovectores de cualquier operador hermítico constituyen una base de ese tipo) siempre podremos expresar un estado cuántico a partir de sus coordenadas en dicha base, y los observables posición y momento lineal vendrán dados por su actuación sobre cada uno de los elementos de la base.

Ahí reside la ventaja de la notación de Dirac. En dicha notación, cada estado cuántico se representa por un ket $|\psi\rangle$ que es independiente de la representación utilizada.

- Los estados cuánticos correspondientes a una partícula con una posición bien definida x_a se representan por el ket $|x_a\rangle$, de modo que tales estados satisfacen la ecuación de autovalores

$$\hat{X} |x_a\rangle = x_a |x_a\rangle$$

que, asimismo, es independiente de la representación utilizada. La ortogonalidad de dos estados distintos $|x_a\rangle$ y $|x_b\rangle$ se expresa en la forma

$$\langle x_a | x_b \rangle = \delta(x_a - x_b).$$

Ahora, un vector ket cualquiera $|\psi\rangle$ puede expresarse, en la base constituida por los kets $|x\rangle$ que son autoestados de \hat{X} , como

$$|\psi\rangle = \int \langle x | \psi \rangle |x\rangle dx. \quad (3.88)$$

Los coeficientes $\langle x | \psi \rangle$ son los productos escalares del ket $|x\rangle$ y el ket $|\psi\rangle$. Para cada valor x , este producto escalar toma un valor diferente. Entonces definimos el producto escalar

$$\langle x | \psi \rangle \equiv \Psi(x)$$

como la **función de onda correspondiente al ket $|\psi\rangle$ en la representación de posiciones**. Así, multiplicando escalarmente la ecuación (3.88) por el ket $|x'\rangle$ tenemos

$$\langle x' | \psi \rangle = \int \langle x | \psi \rangle \langle x' | x \rangle dx \Rightarrow \Psi(x') = \int \Psi(x) \delta(x - x') dx,$$

que es la ecuación (3.58).

- Análogamente, un estado correspondiente a un sistema con un momento bien definido p_a se representa por $|p_a\rangle$ y verifica que

$$\hat{P}_x |p_a\rangle = p_a |p_a\rangle \quad \text{y} \quad \langle p_a | p_b \rangle = \delta(p_a - p_b).$$

Asimismo, el ket $|\psi\rangle$ puede expresarse en la base constituida por los kets $|p\rangle$

$$|\psi\rangle = \int \langle p | \psi \rangle |p\rangle dp, \quad (3.89)$$

siendo el producto escalar

$$\langle p | \psi \rangle = \tilde{\Psi}(p)$$

la función de onda correspondiente al ket $|\psi\rangle$ en la representación de momentos. Ahora tenemos

$$\langle x | \psi \rangle = \int \langle p | \psi \rangle \langle x | p \rangle dp \Rightarrow \Psi(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int \tilde{\Psi}(p) \exp(ipx/\hbar) dp,$$

puesto que $\langle x | p \rangle \equiv \Psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp(ipx/\hbar)$ es la función de onda del estado $|p\rangle$. Análogamente, multiplicando escalarmente (3.88) por $|p\rangle$, tenemos

$$\langle p | \psi \rangle = \int \langle x | \psi \rangle \langle p | x \rangle dx \Rightarrow \tilde{\Psi}(p) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int \Psi(x) \exp(-ipx/\hbar) dx,$$

que es la ecuación (3.73)

3.16 Sobre el problema de la medida en Mecánica Cuántica.*

- Recordemos que, según el postulado 4, si el estado cuántico del sistema es $|\xi\rangle$, entonces al hacer una medición del observable A que da como resultado el valor a_k , el estado cuántico se colapsa transformándose en el autoestado $|a_k\rangle$ de \hat{A} con autovalor a_k .⁷ Ahora bien, es interesante analizar el fenómeno de la medida desde una perspectiva más completa, centrándonos en el carácter físico del mismo. Sea \mathcal{S} el sistema físico que estamos midiendo y \mathcal{M} el aparato de medida, que al ser un sistema físico en sí mismo *debiera estar también sometido a las leyes de la Mecánica Cuántica*. Sean entonces $|\xi\rangle$, $|\mu\rangle$ los kets que representan los estados del sistema bajo estudio y del aparato de medida,

⁷Supondremos, por sencillez, que todos los valores espectrales de \hat{A} son discretos y no degenerados.

respectivamente, antes de la medida (debe entenderse, pues, que $|\mu\rangle$ es el estado cuántico de \mathcal{M} cuando todavía no se ha registrado medición alguna).

Establezcamos ahora cómo se produce la medida. En un instante dado hacemos interaccionar los sistemas \mathcal{S} y \mathcal{M} ; tras esta interacción, el estado cuántico $|\mu\rangle$ del aparato de medida habrá cambiado y, puesto que se supone que éste es más accesible, su inspección nos dirá cuál ha sido el resultado de la medición. Imaginemos en primer lugar que el estado $|\xi\rangle$ de \mathcal{S} es el autoestado $|a_k\rangle$ del operador \hat{A} . Supuesta la medida ideal, la M.C. afirma que el resultado de la misma será $A = a_k$ con certeza absoluta (postulado 3) y que la medida no afectará al estado de \mathcal{S} (postulado 4). Como consecuencia, si el estado inicial del sistema conjunto $\mathcal{S} + \mathcal{M}$ es $|a_k\rangle|\mu\rangle$ (el producto debe entenderse como producto tensorial $|a_k\rangle \otimes |\mu\rangle$, véase el capítulo segundo), tras la medida el estado será $|a_k\rangle|\mu_k\rangle$, donde el hecho de que el estado del aparato de medida (digamos, *la posición de la aguja indicadora*) sea $|\mu_k\rangle$ permite inferir al experimentador que el resultado ha sido a_k . El proceso ha sido, entonces

$$|a_k\rangle|\mu\rangle \longrightarrow |a_k\rangle|\mu_k\rangle \quad (3.90)$$

Naturalmente, el proceso (3.90) ha de ser similar para todos los posibles autovalores a_k . A su vez hemos de admitir que, si los estados iniciales de \mathcal{S} son respectivamente $|a_k\rangle$ y $|a_{k'}\rangle$, entonces los estados finales de \mathcal{M} , $|\mu_k\rangle$ y $|\mu_{k'}\rangle$, han de ser necesariamente distintos, puesto que de lo contrario la medida no sería efectiva.

Supongamos ahora la situación más común, en la que el estado $|\xi\rangle$ no es un autoestado de \hat{A} , sino que es de la forma

$$|\xi\rangle = \sum_k \alpha_k |a_k\rangle \quad ; \quad \sum_k |\alpha_k|^2 = 1$$

(podemos escribir lo anterior puesto que los autoestados de \hat{A} , por ser éste un observable, forman una base completa del espacio de los estados de \mathcal{S}). Ya que el sistema $\mathcal{S} + \mathcal{M}$ está sometido a las leyes de la M.C. *la interacción entre ambos sistemas ha de estar regida por un hamiltoniano, que es un operador lineal* (postulado 5). Sea $\hat{U}_{\mathcal{S}+\mathcal{M}}$ el operador de evolución temporal en el sistema $\mathcal{S} + \mathcal{M}$ asociado al mencionado hamiltoniano (prescindamos de la variable temporal). Entonces la evolución descrita sucintamente por la ecuación (3.90) puede escribirse como

$$\hat{U}_{\mathcal{S}+\mathcal{M}}(|a_k\rangle|\mu\rangle) = |a_k\rangle|\mu_k\rangle.$$

Si el estado inicial de $\mathcal{S} + \mathcal{M}$ es $|\xi\rangle|\mu\rangle$, entonces

$$\begin{aligned}\hat{U}_{\mathcal{S}+\mathcal{M}}(|\xi\rangle|\mu\rangle) &= \hat{U}_{\mathcal{S}+\mathcal{M}}\left(\sum_k \alpha_k |a_k\rangle|\mu\rangle\right) = \sum_k \alpha_k \hat{U}_{\mathcal{S}+\mathcal{M}}(|a_k\rangle|\mu\rangle) \\ &= \sum_k \alpha_k |a_k\rangle|\mu_k\rangle\end{aligned}$$

por lo que tenemos la evolución

$$|\xi\rangle|\mu\rangle \longrightarrow \sum_k \alpha_k |a_k\rangle|\mu_k\rangle. \quad (3.91)$$

Esto nos indica que el resultado es una superposición *coherente* de los estados $|a_k\rangle|\mu_k\rangle$, pero no podemos afirmar que sea uno de ellos en particular. Vemos, pues, que esta argumentación no nos permite afirmar que podemos medir realmente el observable \hat{A} .

Para poder afirmar que se ha producido la medida, es precisa la evolución

$$|\xi\rangle|\mu\rangle \longrightarrow |a_k\rangle|\mu_k\rangle, \quad (3.92)$$

la cual sabemos que tiene una probabilidad $|\alpha_k|^2$ de producirse. Pero esta evolución, como acabamos de ver, contradice el carácter lineal del Hamiltoniano del sistema interactuante $\mathcal{S} + \mathcal{M}$. La medida, entendida de esta forma, contradice las leyes de evolución *normal* de un sistema físico y esto fue lo que obligó a von Neumann⁸ a postular que en algún momento se producía la transición discontinua desde el estado superposición coherente $\sum_k \alpha_k |a_k\rangle|\mu_k\rangle$ hasta un estado $|a_k\rangle|\mu_k\rangle$. Este es el postulado 4, que introduce como ya dijimos un cambio **discontinuo, irreversible y aleatorio** en el estado $|\xi\rangle$, cambio que, como es evidente, no está regido por hamiltoniano alguno.

La cuestión que se plantea ahora es *cuándo* se produce la reducción

$$\sum_k \alpha_k |a_k\rangle|\mu_k\rangle \longrightarrow |a_k\rangle|\mu_k\rangle, \quad (3.93)$$

esto es, cuándo podemos decir que la medida se ha realizado efectivamente. Von Neumann parece sugerir que es cuando el *observador* lee el registro del aparato, esto es, cuando inspecciona el estado cuántico de \mathcal{M} . Es entonces el propio observador quien al “ver” la indicación de la aguja, “decide” que el aparato está en el estado $|\mu_k\rangle$ y, por lo tanto, que el sistema \mathcal{S} ha quedado colapsado al estado $|a_k\rangle$. La reducción parece entonces estar desencadenada

⁸Véase su libro citado en la bibliografía.

por un proceso mental del observador, proceso que no puede seguir las leyes de la M.C. ya que entonces entraríamos en un proceso de *medidas del aparato de medida* que no tendría fin. Esta interpretación aparece todavía más patente en un libro posterior de London y Bauer, que confiere a la medida un carácter inequívocamente subjetivo.

- Las extrañas consecuencias de esta concepción de la medida fueron puestas de manifiesto en la famosa paradoja del gato de Schrödinger. Imaginemos un gato encerrado en una habitación. En la misma habitación hay un átomo de un elemento radiactivo tal que al desintegrarse rompe una ampolla de gas venenoso que hace que el gato muera envenenado instantáneamente. En este ejemplo, el gato actúa como aparato de medida \mathcal{M} respecto del estado del átomo. Así, si el estado del gato es $|v\rangle$ (vivo), el átomo está en el estado $|0\rangle$ (no desintegrado), mientras que si el gato está en el estado $|m\rangle$ (muerto), el átomo está en el estado $|1\rangle$ (desintegrado). Al cabo de un tiempo correspondiente a un periodo de semidesintegración, la teoría predice que hay un 50% de probabilidad de que el átomo se haya desintegrado. De esta forma, si el sistema total evoluciona de acuerdo con la ecuación de Schrödinger, la función de onda del gato será $(|v\rangle + |m\rangle) / \sqrt{2}$. Entonces, de acuerdo con la teoría expuesta, no tiene sentido decir que el gato esté vivo o muerto, sino que está mitad vivo y mitad muerto. Sólo cuando miramos dentro de la habitación y vemos si, efectivamente, el gato está vivo o muerto, se produce la reducción del estado que nos permite inferir si el átomo o no se ha desintegrado o sí se ha desintegrado, respectivamente.

- Veamos ahora otra paradoja, relacionada con esta interpretación de la teoría de la medida. Supongamos que un observador \mathcal{O}_{int} , entendido éste como el ente consciente que cierra el proceso físico de la medida, realiza medidas del sistema \mathcal{S} con la ayuda del aparato de medida \mathcal{M} . Imaginemos ahora que el sistema $\mathcal{O}_{int} + \mathcal{S} + \mathcal{M}$ está también sometido a observación por un nuevo observador exterior \mathcal{O}_{ext} . Para este observador no hay cambios discontinuos (colapso cuántico) en el estado de $\mathcal{S} + \mathcal{M}$ mientras él no realice ninguna observación. Sin embargo, cada vez que \mathcal{O}_{int} hace una medida sobre \mathcal{S} se producen cambios discontinuos en el estado de \mathcal{S} . Ahora bien, desde el punto de vista de \mathcal{O}_{ext} , ¿cómo es posible que haya discontinuidades en \mathcal{S} sin que las haya en $\mathcal{S} + \mathcal{M}$? La reducción depende de cada observador: para \mathcal{O}_{int} ha habido colapso cuántico, mientras que para \mathcal{O}_{ext} no. Dicho de otra manera, el sistema cuántico carece de realidad física objetiva pues no es independiente de cualquier medida desde el exterior.

Para muchos físicos, el apelar a entes conscientes para solucionar el problema del colapso no es admisible, ya que éstos no siguen las leyes que queremos explicar; pero si se niega esa independencia al observador \mathcal{O}_{int} , resultará imposible explicar el colapso cuántico. Este es el gran dilema de la teoría de la medida cuántica. Además, cada vez que estas consciencias actúan, dotando de sentido físico al sistema bajo estudio, la evolución determinista que se puede esperar de un sistema cerrado debe desterrarse. Sólo evoluciona de manera determinista (mediante la ecuación de Schrödinger) un sistema que no es observado; pero si no lo podemos observar, ¿qué importancia tiene cómo evolucione?

• Algunas soluciones propuestas al problema de la medida son las siguientes:

1. Puesto que el dilema aparece en su mayor parte por la aceptación del principio de superposición, esto es, por el carácter lineal del operador de evolución temporal, algunos físicos como Wigner, Ludwig o Pearle han sugerido que es necesario introducir leyes de evolución no lineales a la hora de tratar la interacción entre sistemas microscópicos (por ejemplo el sistema \mathcal{S}) y sistemas esencialmente macroscópicos (como el aparato de medida \mathcal{M}). De esta manera, la solución del problema de la medida queda aplazada hasta que se conozcan estas hipotéticas leyes físicas. Por otra parte el carácter lineal del mundo cuántico parece estar muy bien establecido.
2. Una solución más fantástica es la propuesta por Hugh Everett con la llamada *formulación del estado relativo* o *teoría de los varios mundos*. Básicamente esta formulación afirma que cada vez que se realiza una medida, el Universo se desdobra en tantos universos paralelos como posibles resultados pueda dar la medida. A cada uno de estos universos corresponde un término de la combinación $\sum_k \alpha_k |a_k\rangle |\mu_k\rangle$ (así, habría un universo en el que el gato de Schrödinger estaría vivo y otro en el que estaría muerto), de modo que todos estos términos existen simultáneamente aunque en universos no interactuantes (ortogonales) y no hay reducción del paquete de ondas, por lo que el postulado 4 puede eliminarse. Aunque Wheeler y De Witt han apoyado esta teoría sobre la base de que es la única consistente con el formalismo cuántico, parece claro que en este caso es peor el remedio que la enfermedad.
3. Una solución más razonable al problema de la medida afirma que la reducción del estado es un proceso físico que se produce en el propio aparato de medida. Según esto, la interacción de \mathcal{S} con \mathcal{M} (y más concretamente, con su sistema de registro: placa fotográfica, contador,

etc.) desencadena un complejo proceso irreversible que lleva finalmente al aparato a uno de los estados $|\mu_k\rangle$. Interpretaciones de este tipo, con diferencias de matiz en cuanto al carácter exacto del proceso, pueden encontrarse en los ya clásicos libros de Landau y Lifshitz o de Gottfried. En todas ellas, el carácter macroscópico del aparato de medida M (es decir, sus muchos grados de libertad) juega un papel decisivo, y la relación entre medida e irreversibilidad queda puesta de manifiesto.⁹

Se ha argumentado que este tipo de interpretaciones de la medida no explica los llamados *experimentos de resultado negativo* de Renninger, también llamados de *no medida* de Dicke. Un ejemplo típico es el siguiente: supongamos una partícula encerrada en una caja. Su función de ondas se extenderá por toda la caja y la partícula tiene una probabilidad finita de estar en cualquier región de la caja. Introduzcamos ahora un detector en la mitad izquierda de la caja. Si el detector da señal quiere decir que la partícula estaba en esa mitad y se produce la reducción del estado. Pero si el detector no da señal podemos inferir que la partícula está en la mitad derecha de la caja: de esta forma se ha producido una reducción del paquete de ondas sin que la partícula haya interactuado *físicamente* con el detector. Lógicamente, la validez de estos argumentos depende de lo que entendamos por interactuar físicamente o de si tiene sentido hablar de las mitades izquierda y derecha de la caja separadamente.

- Toda las anteriores propuestas no niegan, como es evidente, la validez esencial del formalismo cuántico, sino que pretenden clarificar el contenido del postulado 4 de nuestra teoría física más fundamental. Desgraciadamente, todavía no tenemos una respuesta definitiva a la pregunta que abría esta sección: ¿cuándo y cómo se produce el colapso cuántico?; esto es, ¿cuándo la ecuación de Schrödinger deja de actuar y da paso a la reducción del estado?. Otro tipo de argumentos que también pretenden completar el formalismo cuántico (no negarlo), pero quitándole su carácter esencial, son los que veremos en la próxima sección.

3.17 Introducción a los modelos de variables ocultas.*

- En la conferencia de Solvay de 1927, Born y Heisenberg proclamaron que “La Mecánica Cuántica conduce a resultados precisos en lo que concierne a valores medios [véanse, por ejemplo, las ecuaciones de Ehrenfest], pero no da

⁹Para más discusiones sobre este punto puede consultarse el libro *La nueva alianza* de Ilya Prigogine e Isabelle Stengers (Alianza Editorial), especialmente el capítulo 8.

ninguna información sobre los detalles de cada suceso individual. El determinismo, hasta hoy considerado como la base de las ciencias exactas, debe ser abandonado. [...] Mantenemos que la Mecánica Cuántica es una teoría completa, cuyas hipótesis fundamentales, físicas y matemáticas, no son susceptibles de modificación". Einstein, a pesar de ser uno de los fundadores de la física cuántica, nunca aceptó la M.C. como una teoría definitiva. Tras un famoso debate científico con Bohr, del que salió "vencido pero no convencido", tuvo que admitir que la M.C. era consistente, pero siguió rechazando la base probabilística de la M.C. como descripción completa de la realidad física.

En el mencionado debate con Bohr (que tuvo lugar básicamente en la conferencia Solvay de 1930), Einstein presentó un experimento mental que parecía violar la relación de incertidumbre energía/tiempo: en concreto, se podía establecer la cantidad de energía que se emitía por una abertura de una caja y el tiempo exacto de emisión con precisión mayor que la admitida por el principio de incertidumbre. La energía emitida se determinaba pesando la caja antes y después de la emisión y aplicando la ecuación relativista $E = mc^2$ junto con el principio de equivalencia de la Relatividad General. Bohr, "tras una noche de insomnio" como él mismo declara, encontró una refutación del experimento que hacía uso de algunos resultados de la Relatividad General (teoría que, como todos sabemos, fue concebida por el propio Einstein).

Desde entonces, Einstein dedicó sus esfuerzos no a mostrar posibles contradicciones de la Mecánica Cuántica, sino a demostrar que, aunque válida, la teoría era incompleta. En 1935, Einstein en colaboración con Boris Podolsky y Nathan Rosen, publicó un artículo titulado *¿Puede considerarse la Mecánica Cuántica como una descripción completa de la realidad?*¹⁰ en el que se exponían estas ideas, usualmente conocidas desde entonces como el *argumento EPR*. El artículo comenzaba afirmando que una teoría física es completa si cualquier elemento de la realidad física tiene su contrapartida en la teoría. Por realidad física, EPR entienden lo siguiente "Si, sin perturbar en modo alguno el sistema, podemos predecir con certeza el valor de una magnitud física, entonces existe un elemento de realidad física correspondiente a dicha magnitud". Una vez aceptada esta definición, EPR plantean un experimento que, por comodidad, expondremos en una versión diferente propuesta por D. Bohm. Supongamos una molécula compuesta por dos átomos, cada uno con espín $s = 1/2$, que se encuentra en un estado con momento cinético \vec{L} y de momento angular total \vec{J} iguales a cero. A continuación, y mediante

¹⁰ A. Einstein, B. Podolsky y N. Rosen, *Physical Review* **47**, pag. 777 (1935).

un proceso que conserva el momento angular, disociamos la molécula en sus dos átomos constituyentes y de forma que cada uno de ellos posea momento cinético \vec{L} nulo. Como consecuencia, si medimos la componente z del espín de uno de los átomos (digamos el átomo 1), y su valor resulta ser $+\hbar/2$, podemos inferir que la misma componente del momento angular para el átomo 2 vale $-\hbar/2$, *sin necesidad de realizar una medida de s_z sobre este segundo átomo*. De acuerdo con el concepto de realidad física EPR antes expuesto, s_z tiene realidad física en el átomo 2, puesto que hemos predicho su valor con certeza absoluta sin tocarlo (la única medida se ha hecho sobre el átomo 1, que puede estar muy lejos). Por otra parte, podríamos decir lo mismo para cualquier componente del espín del átomo 2, por lo que todas las componentes del espín tendrían realidad física, aunque la M.C. afirme que no se puede hablar de dos componentes simultáneamente pues los operadores correspondientes no conmutan.¹¹

De esta forma, el argumento EPR puede resumirse de la siguiente manera:

TEOREMA (de Einstein-Podolsky-Rosen)

Las dos afirmaciones siguientes son incompatibles:

- 1.- El vector de estado ψ proporciona una descripción completa de un sistema físico.
- 2.- Las condiciones físicas reales de dos subsistemas aislados (separados espacialmente) son independientes (*principio de acción local* o de localidad einsteiniana).

Evidentemente, la existencia de una correlación entre los dos subsistemas era lo que repugnaba a Einstein. Puestos a elegir, el prefirió la afirmación 2 a costa de rechazar la 1, esto es, de rechazar el carácter completo de la M.C.

• La solución más sencilla para salvar el principio de acción local es, naturalmente, suponer que el estado $|\psi\rangle$ del espín total no contiene la información completa del estado cuántico. Las **teorías de variables ocultas** van encaminadas en esta dirección. Tales variables pertenecen a un nivel "subcuántico" inobservable y las variables observables del nivel cuántico resultarían de promedios realizados sobre una distribución de variables ocultas. Según esto, la M.C. no sería la teoría más profunda y completa de la naturaleza, sino que permanecería en un nivel de descripción más grosero.

¹¹ Estos argumentos son impecables, puesto que, efectivamente, si se mide s_z en el átomo 2 se obtendrá con total seguridad el valor $-\hbar/2$. Lo que sí es rechazable es la presuposición de que la medida sobre el átomo 1 se halla efectuado sólo sobre el primer átomo, cuando en realidad es una medida sobre el sistema formado por los dos átomos, aunque estén muy separados espacialmente.

Se puede establecer una cierta analogía entre la relación variables ocultas *frente a* estados cuánticos y estados coherentes *frente a* estados mezcla incoherentes. Como ya vimos, si reuníamos dos haces de partículas provenientes de sendas medidas de \hat{s}_z con resultados opuestos, sabemos que cada una de las partículas está o en el estado $|+\rangle$ o en el estado $|-\rangle$, pero puesto que nuestras partículas se han mezclado, no podemos predecir a ciencia cierta cuál es el estado de una partícula en concreto y decimos que su estado es una mezcla incoherente de los estados $|+\rangle$ y $|-\rangle$. Este desconocimiento no es debido a un principio físico profundo, sino al desconocimiento de *todos los datos posibles* de cada una de las partículas del haz (esto es similar a nuestro desconocimiento del color de la bola que vamos a sacar de una bolsa con bolas blancas y negras). Sin embargo, según la mecánica cuántica, si la partícula está en el estado $|+\rangle$ nuestro desconocimiento previo del resultado de una medida concreta de \hat{s}_x (puede ser $+\hbar/2$ o $-\hbar/2$ con igual probabilidad) sí es un principio físico fundamental. Las teorías de variables ocultas, por el contrario, propugnan que este estado $|+\rangle$ es también una mezcla estadística de estados definidos a un nivel más fundamental por los valores que toman las variables ocultas; y, en este nivel de descripción, no habría ninguna incertidumbre estadística en las medidas. Así, en el caso propuesto por EPR, al disociarse la molécula cada uno de los átomos tenía “impresos” en sus variables ocultas cuál iba a ser el resultado de las posteriores medidas de cualquier componente de sus espines. No existiría entonces la correlación entre los dos átomos separados espacialmente y el resultado de la medida sobre uno de ellos no afecta al estado del otro, puesto que todo ya estaba determinado desde el momento en el que se produjo la disociación.

- La posibilidad de una teoría de variables ocultas ya había sido considerada y rechazada por von Neumann en 1930. Más exactamente, von Neumann demostró que ninguna teoría de variables ocultas podía dar lugar a predicciones más precisas que las de la M.C. Las teorías de variables ocultas serían entonces irrelevantes o innecesarias. Esta demostración fue aceptada de forma un tanto acrítica durante más de veinte años, pese a que en los años 50 se propusieron algunas teorías de variables ocultas que, aunque demasiado simples, contradecían la afirmación de von Neumann. Pero, en un examen más profundo de la demostración, Jauch y Piron encontraron una circularidad en el argumento de von Neumann: una de sus hipótesis de partida suponía parte de lo que se quería probar. Una nueva demostración de Jauch y Piron en una línea diferente a la anterior fue también objeto de críticas similares. De esta forma, quedaba abierta en principio la puerta a la formulación de teorías de variables ocultas.

• Sin entrar en detalles, que exceden con mucho el nivel en el que nos movemos, hay un primer tipo de teorías de variables ocultas que no pretenden salvar el principio de acción local, sino justificar las predicciones probabilísticas de la M.C. (esta línea ha sido seguida, entre otros, por Bohm). El esquema es, en lenguaje figurado, similar al que se tiene en física estadística, en el que los valores medios macroscópicos se obtienen como promedios a partir de los estados microscópicos que forman el sistema y que se distribuyen de manera conocida cuando el sistema está en equilibrio termodinámico. De esta forma, las propiedades del estado cuántico $|\psi\rangle$ serían un promedio sobre las distribuciones de los valores que toman las variables ocultas. Estas variables ocultas se podrían manifestar experimentalmente justamente después de una medición, si no ha habido tiempo para que la distribución de variables ocultas se relaje y vuelva a ser la correspondiente al equilibrio termodinámico. En este caso, una segunda medida daría un resultado contrario al predicho por la M.C. ya que éste viene dado por configuraciones de equilibrio de los valores de las variables ocultas. Experimentos llevados por Papaliolos en 1967, no dieron resultados que violasen las predicciones de la M.C., pero tampoco sirvieron para desechar definitivamente la idea de Bohm. A este tipo de variables ocultas se les denomina *variables ocultas de primera especie*.

Si en lugar de querer justificar las leyes de la M.C. se pone el énfasis en el principio de acción local se tiene la línea iniciada por J. S. Bell. En primer lugar, demostró un teorema menos restrictivo que el de von Neumann; a saber que ninguna teoría *local* de variables ocultas puede dar resultados más precisos que los de la M.C. La novedad aquí es la introducción de la hipótesis de *localidad*. Veamos lo que esto significa. Supongamos en el ejemplo anterior que hemos medido el espín del primer átomo. Si, una vez conocido el resultado, se puede enviar una señal con velocidad *infinita* al átomo 2 éste, cuyo espín no estaba definida antes de la medida en 1, puede adquirir el valor necesario para compensar el resultado de la medida del espín en el átomo 1. En otras palabras, la medida en 1 puede afectar instantáneamente al sistema 2, que por tanto no se puede considerar separado localmente del primero. Esto es lo que ocurre esencialmente en la explicación ortodoxa del experimento.

Sin embargo, ninguna señal puede propagarse a velocidad mayor que la de la luz. De esta manera, si el subsistema 1 se ha medido en un instante t_1 , podemos afirmar que el subsistema 2 no se verá afectado por esta medida al menos hasta el instante $t_2 = t_1 + d/c$, siendo d la separación espacial entre ambos. Entonces, al menos durante el intervalo (t_1, t_2) los sistemas 1 y 2 pueden considerarse separados. Matemáticamente esto quiere decir que, en este lapso de tiempo, las distribuciones de los valores de las variables ocultas en los dos subsistemas son independientes entre sí. Las teorías de variables

ocultas (*de segunda especie*) que contemplan este hecho se denominan *locales*, aunque sería más correcto decir *separables*. Siguiendo esta hipótesis, Bell dedujo unas desigualdades matemáticas entre resultados de medidas realizadas en el átomo 1 y 2 que tendrían que satisfacerse si una teoría local de variables ocultas fuese cierta. Los experimentos realizados desde entonces hasta la fecha, en especial los realizados por Aspect en la década de los ochenta, han mostrado sistemáticamente la violación de las desigualdades de Bell, dando la razón a la Mecánica Cuántica.

Otra variante de las teorías de variables ocultas se refiere al *problema de la contextualidad*. Hemos dicho que las teorías de variables ocultas pretenden que cada sistema cuántico individual tiene valores bien definidos para todos los observables, aunque en la práctica sea imposible determinar experimentalmente dichos valores y tengamos que contentarnos con promedios estadísticos en medidas realizadas sobre un número muy grande de sistemas “semejantes”. Sin embargo, en 1967 Kochen y Specker demostraron un teorema que afirma que, si se quieren respetar los valores medios que proporciona la teoría cuántica, los valores individuales asignados a los observables de cada sistema físico deben depender del conjunto de observables compatibles que se consideren. En otras palabras, consideremos tres observables \hat{A} , \hat{B} y \hat{C} , tales que $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, $[\hat{A}, \hat{C}] = 0$ y $[\hat{B}, \hat{C}] \neq 0$. La mecánica cuántica nos dice que podemos medir simultáneamente A y B , o A y C , pero no podemos medir simultáneamente B y C . Pero el teorema de Kochen y Specker afirma que para asignar valores bien definidos para los observables de cada sistema físico individual, de modo que se satisfagan las predicciones estadísticas, los valores de A deben ser diferentes según estemos considerando simultáneamente el observable B o el observable C . Es decir, los valores determinados por las variables ocultas dependen del contexto experimental en el que esté situado el sistema.

Obviamente, el problema de la localidad se puede ver como un caso particular de la contextualidad. En efecto, si tenemos un par de partículas como las del experimento EPR, cualquier medida realizada en una de ellas es compatible con cualquier medida realizada sobre la otra. En particular, la medida de la componente x del espín de la primera de ellas (que llamaremos $s_x^{(1)}$) es compatible con la medida de cualquier componente del espín de la segunda ($s_x^{(2)}$, $s_y^{(2)}$ o $s_z^{(2)}$), aunque estas últimas sí sean mutuamente incompatibles. Sin embargo, los valores individuales (suponiendo que existieran) de $s_x^{(1)}$ dependerían de qué componente de espín estuviéramos midiendo realmente sobre la segunda.

- Todo esto no cierra la posibilidad de existencia de variables ocultas, sobre todo en su intento no tanto de salvar la localidad einsteniana sino de dotar

de un marco determinista a la descripción de los sistemas microscópicos. Así, todas las paradojas relativas, por ejemplo, al colapso del estado cuántico quedarían explicadas. A efectos prácticos esto no tendría importancia alguna, puesto que en las situaciones físicas de interés las variables ocultas quedarían fuera de nuestro control, pero al menos satisfacerían la necesidad de eliminar el azar como característica sustancial en los principios físicos. En cualquier caso, el problema del determinismo en la naturaleza ya no es una cuestión cerrada, como lo era antes de inventarse la Mecánica Cuántica, sino que es un tema abierto con implicaciones que trascienden lo puramente físico, que pone en cuestión ideas profundamente arraigadas acerca de la propia naturaleza de la realidad.

3.18 Problemas resueltos.

Los problemas que presentamos aquí no son una mera aplicación mecánica de las fórmulas obtenidas en secciones anteriores. Por el contrario, estos problemas suponen un desarrollo y profundización en muchos de los conceptos teóricos. Algunos grupos de problemas constituyen, por sí solos, una breve presentación de la teoría cuántica de ciertos sistemas sencillos, pero fundamentales en el estudio de la física. Por ello, antes de abordar cada problema es conveniente que el lector repase las ideas básicas que intervienen en su solución.

3.18.1 Formalismo general.

Problema 3.1 .- Demostrar la relación de conmutación $[\hat{X}, \hat{P}_x^n] = i\hbar n \hat{P}_x^{n-1}$.

Hay varias maneras de resolver este problema. Podemos, por ejemplo, escribir la expresión de \hat{P}_x^n en la representación de coordenadas como $(-i\hbar d/dx)^n$ y utilizar las reglas de derivación normales. Sin embargo, un método más sencillo es la demostración por inducción. Así, partiendo de que $[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar$ y utilizando las relaciones conocidas para conmutadores de productos de operadores, resulta

$$[\hat{X}, \hat{P}_x^2] = [\hat{X}, \hat{P}_x \hat{P}_x] = [\hat{X}, \hat{P}_x] \hat{P}_x + \hat{P}_x [\hat{X}, \hat{P}_x] = 2i\hbar \hat{P}_x.$$

$$\begin{aligned} [\hat{X}, \hat{P}_x^3] &= [\hat{X}, \hat{P}_x^2 \hat{P}_x] = [\hat{X}, \hat{P}_x^2] \hat{P}_x + \hat{P}_x^2 [\hat{X}, \hat{P}_x] = 2i\hbar \hat{P}_x \hat{P}_x + \hat{P}_x^2 i\hbar \\ &= 3i\hbar \hat{P}_x^2. \end{aligned}$$

Veamos entonces si es válida la expresión $[\hat{X}, \hat{P}_x^n] = ni\hbar \hat{P}_x^{n-1}$. Para ello, calculamos

$$\begin{aligned} [\hat{X}, \hat{P}_x^{n+1}] &= [\hat{X}, \hat{P}_x^n \hat{P}_x] = [\hat{X}, \hat{P}_x^n] \hat{P}_x + \hat{P}_x^n [\hat{X}, \hat{P}_x] \\ &= ni\hbar \hat{P}_x^{n-1} \hat{P}_x + \hat{P}_x^n i\hbar = (n+1)i\hbar \hat{P}_x^n, \end{aligned}$$

que es semejante a la expresión de partida. La demostración está así completa.

Problema 3.2 .- Demostrar la relación de conmutación $[\hat{X}, f(\hat{P}_x)] = i\hbar df(\hat{P}_x)/d\hat{P}_x$.

Supondremos que la función $f(\hat{P}_x)$ es regular y se puede desarrollar en serie de potencias. Entonces, podemos escribir el desarrollo simbólico del operador $f(\hat{P}_x) = \sum_n a_n \hat{P}_x^n$. Combinando ahora la propiedad distributiva de los conmutadores con el resultado del problema anterior tenemos

$$\begin{aligned} [\hat{X}, f(\hat{P}_x)] &= \sum_n a_n [\hat{X}, \hat{P}_x^n] = \sum_n a_n (ni\hbar \hat{P}_x^{n-1}) \\ &= i\hbar \sum_n a_n n \hat{P}_x^{n-1} = i\hbar \frac{df(\hat{P}_x)}{d\hat{P}_x}. \end{aligned}$$

Problema 3.3 .- Sea $\phi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp(ipx/\hbar)$ una función propia del operador $\hat{P}_x = -i\hbar d/dx$ con valor propio p ; es decir, $\hat{P}_x \phi_p(x) = p \phi_p(x)$. Entonces

$$(\phi_p(x), \hat{X} \hat{P}_x \phi_p(x)) = p (\phi_p(x), \hat{X} \phi_p(x)) = p \langle X \rangle_\phi$$

y

$$(\phi_p(x), \hat{P}_x \hat{X} \phi_p(x)) = (\hat{P}_x \phi_p(x), \hat{X} \phi_p(x)) = p (\phi_p(x), \hat{X} \phi_p(x)) = p \langle X \rangle_\phi$$

de modo que, aparentemente,

$$(\phi_p(x), \hat{X} \hat{P}_x \phi_p(x)) - (\phi_p(x), \hat{P}_x \hat{X} \phi_p(x)) = 0$$

Sin embargo, los operadores \hat{X} y \hat{P}_x se han definido de manera que $[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar$, y así

$$(\phi_p(x), \hat{X} \hat{P}_x \phi_p(x)) - (\phi_p(x), \hat{P}_x \hat{X} \phi_p(x)) =$$

$$= (\phi_p(x), [\hat{X}, \hat{P}_x] \phi_p(x)) = i\hbar (\phi_p(x), \phi_p(x)) = i\hbar,$$

en clara contradicción con el resultado anterior. ¿Dónde está el error en el razonamiento?

El error está en el paso $(\phi_p(x), \hat{P}_x \hat{X} \phi_p(x)) = (\hat{P}_x \phi_p(x), \hat{X} \phi_p(x))$, que no es válido pues en este paso estamos admitiendo que \hat{P}_x es hermítico cuando actúa sobre $\phi_p(x)$. Pero $\phi_p(x)$ no es una función de cuadrado integrable, y \hat{P}_x sólo es hermítico cuando actúa sobre funciones de cuadrado integrable.

En efecto, dadas dos funciones $f(x)$ y $g(x)$ cualesquiera, tenemos (integrando por partes)

$$\begin{aligned} (f(x), \hat{P}_x g(x)) &= -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x) \frac{dg(x)}{dx} dx \\ &= -i\hbar f^*(x)g(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} + i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{df^*(x)}{dx} g(x) dx \\ &= -i\hbar f^*(x)g(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} + (\hat{P}_x f(x), g(x)). \end{aligned}$$

Por lo tanto, para que \hat{P}_x sea hermítico, el producto $f^*(x)g(x)$ debe anularse en $x = \pm\infty$, lo que equivale a que las funciones sean de cuadrado integrable.

Problema 3.4 .- Sean \hat{X} y \hat{P}_x los operadores correspondientes a los observables cuánticos posición y momento respectivamente. Supongamos una partícula de masa m que se mueve bajo la acción de una energía potencial $V(x)$ que no depende de \hat{P}_x .

a) Demostrar que los operadores producto $\hat{X}\hat{P}_x$ y $\hat{P}_x\hat{X}$ no son hermíticos, pero sí lo es la suma $\hat{X}\hat{P}_x + \hat{P}_x\hat{X}$.

b) Demostrar la identidad $\hat{X}\hat{P}_x + \hat{P}_x\hat{X} = im [\hat{H}, \hat{X}^2]$, donde m es la masa de la partícula.

c) A partir de esta última relación, demostrar que si $\psi(x)$ es un estado propio de la energía (es decir, si $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$) entonces para dicho estado se tiene $\langle \hat{X}\hat{P}_x + \hat{P}_x\hat{X} \rangle_\psi = 0$.

a) Hay varias maneras de demostrar esto. Por ejemplo, puede demostrarse que un producto de operadores hermíticos $\hat{A}\hat{B}$ es hermítico si y sólo si los operadores \hat{A} y \hat{B} conmutan, esto es, si $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Puesto que los operadores \hat{X} y \hat{P}_x no conmutan, entonces su producto no será hermítico.

Otra forma de demostrarlo es la siguiente. De la definición de hermiticidad, y puesto que \hat{X} y \hat{P}_x son hermíticos (actuando sobre funciones de cuadrado

integrable), se tiene que para dos funciones cualesquiera f y g

$$(f, \hat{X}\hat{P}_x g) = (\hat{X}f, \hat{P}_x g) = (\hat{P}_x \hat{X}f, g) = (\hat{X}\hat{P}_x f, g) - i\hbar(f, g),$$

de modo que $\hat{X}\hat{P}_x$ no es hermítico. Análogamente,

$$(f, \hat{P}_x \hat{X}g) = (\hat{P}_x f, \hat{X}g) = (\hat{X}\hat{P}_x f, g) = (\hat{P}_x \hat{X}f, g) + i\hbar(f, g),$$

con lo que $\hat{P}_x \hat{X}$ tampoco es hermítico. Sin embargo, sumando las dos expresiones anteriores se obtiene

$$\begin{aligned} (f, (\hat{X}\hat{P}_x + \hat{P}_x \hat{X})g) &= (f, \hat{X}\hat{P}_x g) + (f, \hat{P}_x \hat{X}g) = (\hat{X}\hat{P}_x f, g) + (\hat{P}_x \hat{X}f, g) \\ &= ((\hat{X}\hat{P}_x + \hat{P}_x \hat{X})f, g), \end{aligned}$$

que es la condición de hermiticidad para $\hat{X}\hat{P}_x + \hat{P}_x \hat{X}$.

b) Evidentemente $[V(\hat{X}), \hat{X}] = 0$, de modo que

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{X}^2] &= \frac{1}{2m} [\hat{P}_x^2, \hat{X}^2] = \frac{1}{2m} ([\hat{P}_x^2, \hat{X}] \hat{X} + \hat{X} [\hat{P}_x^2, \hat{X}]) \\ &= \frac{1}{2m} (-2i\hbar \hat{P}_x \hat{X} - 2i\hbar \hat{X} \hat{P}_x) = -\frac{i\hbar}{m} (\hat{X}\hat{P}_x + \hat{P}_x \hat{X}). \end{aligned}$$

c) De lo anterior resulta que, para un estado propio ψ tal que $\hat{H}\psi = E\psi$

$$\begin{aligned} \langle \hat{X}\hat{P}_x + \hat{P}_x \hat{X} \rangle_\psi &= \frac{im}{\hbar} [(\psi, \hat{H}\hat{X}^2\psi) - (\psi, \hat{X}^2\hat{H}\psi)] \\ &= \frac{im}{\hbar} [(\hat{H}\psi, \hat{X}^2\psi) - (\psi, \hat{X}^2\hat{H}\psi)] \\ &= \frac{im}{\hbar} E (\langle \hat{X}^2 \rangle_\psi - \langle \hat{X}^2 \rangle_\psi) = 0. \end{aligned}$$

Problema 3.5 .- Se define el operador paridad $\hat{\Pi}$ como aquél que al actuar sobre una función $f(x)$ da como resultado $f(-x)$, es decir, que cambia el signo del argumento

$$\hat{\Pi}f(x) \equiv f(-x).$$

a) Hallar los valores propios y las funciones propias de dicho operador.

b) Calcular el conmutador $[\hat{H}, \hat{\Pi}]$ en el caso de que el hamiltoniano \hat{H} incluya un potencial simétrico $V = V(|x|)$.

a) De la propia definición del operador tenemos

$$\hat{\Pi}^2 f(x) = \hat{\Pi} (\hat{\Pi} f(x)) = \hat{\Pi} f(-x) = f(x),$$

de modo que $\hat{\Pi}^2 = \hat{I}$ es el operador identidad. Si llamamos λ_i a los valores propios de $\hat{\Pi}$ deberá cumplirse entonces

$$\hat{\Pi}^2 = \hat{I} \Rightarrow \lambda_i^2 = 1 \Rightarrow \lambda_i = \pm 1.$$

El operador $\hat{\Pi}$ tiene así los valores propios $\lambda_1 = 1$ y $\lambda_2 = -1$. Las funciones propias correspondientes a cada valor propio han de cumplir

$$\lambda_1 = 1 \Rightarrow \hat{\Pi} f_1(x) \equiv f_1(-x) = +1 \cdot f_1(x)$$

$$\lambda_2 = -1 \Rightarrow \hat{\Pi} f_2(x) \equiv f_2(-x) = -1 \cdot f_2(x).$$

Es decir, cualquier función par es función propia de $\hat{\Pi}$ con valor propio $+1$, mientras que cualquier función impar será función propia de $\hat{\Pi}$ con valor propio -1 .

b) Para calcular el conmutador $[\hat{H}, \hat{\Pi}]$ veamos el resultado de aplicar $\hat{H}\hat{\Pi}$ y $\hat{\Pi}\hat{H}$ a una función cualquiera

$$\hat{H} \cdot \hat{\Pi} f(x) = \hat{H} f(-x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 f(-x)}{dx^2} + V(|x|) f(-x)$$

y

$$\begin{aligned} \hat{\Pi} \cdot \hat{H} f(x) &= \hat{\Pi} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 f(x)}{dx^2} + V(|x|) f(x) \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 f(-x)}{d(-x)^2} + V(|-x|) f(-x). \end{aligned}$$

Pero es evidente que ambos resultados son iguales, ya que $V(|x|) = V(|-x|)$ y también

$$\frac{d^2 f(-x)}{d(-x)^2} = \frac{d}{d(-x)} \frac{df(-x)}{d(-x)} = -\frac{d}{dx} \left(-\frac{df(-x)}{dx} \right) = \frac{d^2 f(-x)}{dx^2}.$$

Nota: Vemos así que el operador paridad conmuta con el hamiltoniano para un potencial simétrico (par). Esto tiene dos consecuencias importantes. En primer lugar, las funciones propias del

hamiltoniano deben ser también funciones propias del operador paridad; es decir, las funciones propias de un potencial simétrico deben ser funciones pares o impares. En segundo lugar, puesto que $\hat{\Pi}$ conmuta con el hamiltoniano, la paridad es una constante del movimiento; esto significa que aunque el sistema no esté en un estado estacionario (es decir, en un estado propio de \hat{H}) y, por consiguiente, no venga descrito por una función de onda con paridad definida, el valor esperado $\langle \hat{\Pi} \rangle_t$ se mantiene constante en el tiempo.

Problema 3.6 .- a) Demostrar que para cualquier pozo de potencial simétrico respecto a $x = 0$, con niveles no degenerados, los estados ligados son funciones pares o impares. b) De acuerdo con esto, ¿cuánto valen $\langle \hat{X} \rangle$ y $\langle \hat{P}_x \rangle$ para una partícula en un estado ligado de tales pozos?

a) La primera parte de este problema ya ha sido demostrada en el problema anterior a partir de la conmutabilidad del hamiltoniano (con un potencial simétrico) con el operador paridad. Vamos a ver ahora una demostración ligeramente diferente, partiendo directamente de la ecuación de Schrödinger estacionaria. Si $\varphi_E(x)$ es una función propia, correspondiente al valor propio E , debe satisfacer

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_E(x)}{dx^2} + V(x) \varphi_E(x) = E \varphi_E(x).$$

Haciendo el cambio de variable $x \rightarrow -x$, la ecuación anterior se transforma en

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_E(-x)}{d(-x)^2} + V(-x) \varphi_E(-x) = E \varphi_E(-x),$$

que es equivalente a

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

ya que $V(x) = V(-x)$. Esta última ecuación nos dice que $\varphi_E(-x)$ también es una función propia correspondiente al valor propio E . Ahora bien, hemos dicho que los valores propios del hamiltoniano son no degenerados, de modo que $\varphi_E(x)$ y $\varphi_E(-x)$ sólo pueden diferir en una constante (que puede ser compleja), es decir $\varphi_E(x) = c \varphi_E(-x)$. Entonces, haciendo de nuevo el cambio $x \rightarrow -x$

$$\varphi_E(-x) = c \varphi_E(x) = c^2 \varphi_E(-x) \Rightarrow c = \pm 1 \Rightarrow \varphi_E(x) = \pm \varphi_E(-x),$$

de modo que $\varphi_E(x)$ debe ser una función par (signo +) o impar (signo -).

b) Los valores esperados del momento y la posición vienen dados por (recuérdese que $\varphi_E(x)$ es real)

$$\langle \hat{X} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\varphi_E(x)|^2 dx \quad \langle \hat{P}_x \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_E(x) \varphi'_E(x) dx.$$

Puesto que $\varphi_E(x)$ sólo puede ser par o impar, la distribución de probabilidad $|\varphi_E(x)|^2$ es siempre una función par. Por consiguiente, el integrando $x|\varphi_E(x)|^2$ que aparece en la primera integral es una función impar y la integral se anula. Asimismo, si $\varphi_E(x)$ es una función par (impar), su derivada $\varphi'_E(x)$ será impar (par), el integrando $\varphi_E(x)\varphi'_E(x)$ que aparece en segunda integral será también impar y la integral también se anulará.

El primer resultado parece obvio. Puesto que el potencial es simétrico, la partícula tiene la misma probabilidad de estar en x que en $-x$, por lo que el valor medio de su posición estará en el centro del pozo $x = 0$. También parece obvio el segundo resultado ya que la partícula tiene la misma probabilidad de viajar en una dirección que en la contraria. Sin embargo, el hecho de que $\langle \hat{P}_x \rangle = 0$ en un estado ligado es algo mucho más general y no requiere necesariamente que el potencial sea simétrico. Esto es lo que vamos a ver en el siguiente problema.

Problema 3.7 .- Demostrar la identidad $\hat{P}_x = (im/\hbar) [\hat{H}, \hat{X}]$. A partir de esta relación, demostrar que para los estados estacionarios de cualquier hamiltoniano $\hat{H} = \hat{P}_x^2/2m + V(\hat{X})$ (con valores propios discretos) se cumple $\langle \hat{P}_x \rangle = 0$, es decir, el valor esperado del momento es nulo.

La demostración de la primera identidad es inmediata. En efecto, teniendo en cuenta que \hat{X} conmuta con cualquier función $f(\hat{X})$, y en particular con el potencial $V(\hat{X})$, resulta

$$[\hat{H}, \hat{X}] = \frac{1}{2m} [\hat{P}_x^2, \hat{X}] + [V(\hat{X}), \hat{X}] = -\frac{i\hbar}{m} \hat{P}_x,$$

que es el resultado buscado.

Sea ahora φ_E una función propia del hamiltoniano correspondiente al valor propio E , es decir, $\hat{H}\varphi_E = E\varphi_E$. Entonces

$$\langle \hat{P}_x \rangle_{\varphi_E} = \frac{im}{\hbar} (\varphi_E, [\hat{H}, \hat{X}] \varphi_E) = \frac{im}{\hbar} (\varphi_E, \hat{H}\hat{X}\varphi_E) - \frac{im}{\hbar} (\varphi_E, \hat{X}\hat{H}\varphi_E).$$

Ahora bien

$$(\varphi_E, \hat{X} \hat{H} \varphi_E) = (\varphi_E, \hat{X} E \varphi_E) = E (\varphi_E, \hat{X} \varphi_E) = E \langle \hat{X} \rangle_{\varphi_E}.$$

Por otra parte, teniendo en cuenta que \hat{H} es hermítico

$$(\varphi_E, \hat{H} \hat{X} \varphi_E) = (\hat{H} \varphi_E, \hat{X} \varphi_E) = (E \varphi_E, \hat{X} \varphi_E) = E \langle \hat{X} \rangle_{\varphi_E},$$

de modo que $\langle \hat{P}_x \rangle_{\varphi_E} = 0$.

Como vemos, el hecho de que el valor esperado del momento se anule no depende de la forma del potencial sino simplemente de que tratamos con un estado estacionario. El resultado sigue siendo obvio. De hecho, la primera identidad forma parte de la demostración que lleva a la ecuación de Ehrenfest $d \langle \hat{X} \rangle_t / dt = \langle \hat{P}_x \rangle_t / m$. Ahora bien, en un estado estacionario la densidad de probabilidad $|\Psi(x, t)|^2$ no depende del tiempo y, por consiguiente, tampoco depende del tiempo el valor esperado de la posición. Por lo tanto, su derivada con respecto al tiempo es nula y, con ella, el valor esperado del momento.

Problema 3.8 .- Supongamos que la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para un potencial $V(x)$ tiene soluciones de la forma

$$\Psi(x, t) = A \exp \frac{iW(x, t)}{\hbar},$$

siendo A una constante. (Esta es la expresión de una onda plana cuya longitud de onda varía con x y t .)

a) ¿Qué ecuación debe satisfacer la función $W(x, t)$?

b) ¿A qué se reduce esta ecuación en el caso en que $\Psi(x, t)$ represente un estado estacionario?

a) De la forma propuesta para $\Psi(x, t)$ se sigue que

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} &= \frac{i}{\hbar} \Psi(x, t) \frac{\partial W(x, t)}{\partial x} \\ \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} &= \frac{i}{\hbar} \Psi(x, t) \frac{\partial W(x, t)}{\partial t} \end{aligned}$$

y

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{i}{\hbar} \Psi(x, t) \frac{\partial^2 W(x, t)}{\partial x^2} - \frac{1}{\hbar^2} \Psi(x, t) \left(\frac{\partial W(x, t)}{\partial x} \right)^2.$$

Sustituyendo estas expresiones en la ecuación de Schrödinger

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

obtenemos finalmente

$$-\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 W}{\partial x^2} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 + V(x) = -\frac{\partial W}{\partial t},$$

que es la ecuación en derivadas parciales que debe satisfacer $W(x, t)$.

Esta ecuación muestra cómo puede obtenerse la Mecánica Clásica en el límite $\hbar \rightarrow 0$. En efecto, para $\hbar = 0$ el primer término se anula y el resto de la ecuación puede escribirse en la forma

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} + H(p, x) = 0$$

siendo $H(p, x) = p^2/2m + V(x)$, con $\vec{p} = \vec{\nabla} W(x, t)$. Esta es la llamada *ecuación de Hamilton-Jacobi* de la mecánica clásica,¹² que proporciona una vía de unión entre la mecánica y la óptica. En efecto, así como en óptica los rayos son perpendiculares a los frentes de onda o superficies de fase constante, también podemos considerar que las trayectorias de las partículas son ortogonales a superficies de fase $W(x, t)$ constante, donde la fase $W(x, t)$ obedece a la ecuación de Hamilton-Jacobi.

b) En un estado estacionario, la función de onda depende del tiempo sólo a través de una fase $e^{-iEt/\hbar}$. Por lo tanto, $W(x, t)$ debe ser de la forma $W(x, t) = \Phi(x) - Et$. Sustituyendo esta forma particular en la expresión general para $W(x, t)$, es fácil ver que la función $\Phi(x)$ debe satisfacer la ecuación

$$-\frac{i\hbar}{2m} \frac{d^2 \Phi}{dx^2} + \frac{1}{2m} \left(\frac{d\Phi}{dx} \right)^2 + V(x) = E.$$

¹²Véase, por ejemplo, el libro de H. Goldstein *Mecánica Clásica*, segunda edición, editorial Reverté.

Problema 3.9 .- Calcular el resultado de aplicar el operador $\exp\left(ia\hat{P}_x/\hbar\right)$ a una función $f(x)$.

Puesto que $\hat{P}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$, el operador en cuestión puede escribirse en la forma $e^{a(d/dx)}$. Este operador puede desarrollarse simbólicamente en serie de potencias. Haciendo esto, y aplicando cada término del desarrollo a la función $f(x)$, resulta

$$\begin{aligned} e^{ia\hat{P}_x/\hbar} f(x) &= e^{a(d/dx)} f(x) \\ &= \left(1 + a \frac{d}{dx} + \frac{a^2}{2!} \frac{d^2}{dx^2} + \dots + \frac{a^n}{n!} \frac{d^n}{dx^n} + \dots\right) f(x) \\ &= f(x) + a f'(x) + \frac{a^2}{2!} f''(x) + \dots + \frac{a^n}{n!} f^{(n)}(x) + \dots \end{aligned}$$

Pero esto es precisamente el desarrollo en serie de Taylor de $f(x+a)$, de modo que

$$e^{ia\hat{P}_x/\hbar} f(x) = f(x+a).$$

El efecto del operador sobre una función $f(x)$ consiste en desplazar dicha función una longitud a a lo largo del eje X.

Problema 3.10 .- Sea $\hat{T}_a = \exp\left(ia\hat{P}_x/\hbar\right)$ el operador introducido en el problema anterior, cuyo efecto es desplazar una función $f(x)$ una longitud a a lo largo del eje X, es decir, $\hat{T}_a f(x) = f(x+a)$.

a) Demostrar que si el hamiltoniano es periódico con periodo espacial a , es decir si $\hat{H}(p, x) = \hat{H}(p, x+a)$, entonces \hat{T}_a conmuta con \hat{H} .

b) Encontrar la forma general de las funciones propias de dicho hamiltoniano.

a) Veamos el resultado de aplicar $\hat{H}\hat{T}_a$ y $\hat{T}_a\hat{H}$ a una función $f(x)$.

$$\hat{H}\hat{T}_a f(x) = \hat{H} f(x+a) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 f(x+a)}{dx^2} + V(x) f(x+a)$$

y

$$\begin{aligned} \hat{T}_a\hat{H} f(x) &= \hat{T}_a \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 f(x)}{dx^2} + V(x) f(x) \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 f(x+a)}{d(x+a)^2} + V(x+a) f(x+a) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 f(x+a)}{dx^2} + V(x+a) f(x+a). \end{aligned}$$

Ambas expresiones son iguales si $V(x) = V(x + a)$, de manera que \hat{T}_a y \hat{H} conmutan.

b) Sea $\varphi_E(x)$ una función propia con valor propio E , es decir, $\hat{H}\varphi_E(x) = E\varphi_E(x)$. Entonces, debido a la conmutación de los operadores, tenemos

$$\hat{H}\varphi_E(x + a) = \hat{H} \cdot \hat{T}_a\varphi_E(x) = \hat{T}_a\hat{H}\varphi_E(x) = \hat{T}_aE\varphi_E(x) = E\varphi_E(x + a),$$

de manera que $\varphi_E(x + a)$ es también función propia de \hat{H} con el mismo valor propio E . De modo análogo se puede demostrar que $\varphi_E(x + na)$ (para cualquier n entero) es también función propia correspondiente al mismo valor. Entonces, si el espectro no está degenerado, todas estas funciones sólo pueden diferir en una fase compleja de módulo unidad

$$\varphi_E(x + na) = [e^{i\alpha(a)}]^n \psi(x)$$

La forma más general para $\varphi_E(x)$ es entonces $\varphi_E(x) = e^{ikx}u_k(x)$, con $u_k(x + a) = u_k(x)$. En efecto

$$\varphi_E(x + a) = e^{ik(x+a)}u_k(x + a) = e^{ika}e^{ikx}u_k(x) = e^{ika}\varphi_E(x).$$

Además, si el potencial $V(x)$ es real las $\varphi_E(x)$ pueden escogerse reales, y entonces

$$e^{ika} = 1 \Rightarrow ka = 2\pi m \Rightarrow k = \frac{2\pi}{a}m.$$

Este resultado es una versión simplificada del *teorema de Bloch*, que tiene una importancia fundamental en la teoría cuántica de los sólidos. En efecto, los electrones independientes en un sólido están sometidos a un potencial periódico creado por los iones dispuestos en una estructura cristalina ordenada: un hipotético cristal unidimensional de constante a creará un potencial periódico de periodo a y, por consiguiente, la función de onda de los electrones será de la forma general $\psi(x) = u_k(x)e^{ikx}$; es decir, tendrán la forma de una onda plana de longitud de onda $2\pi m/k = a$ cuya amplitud está modulada por una función periódica $u_k(x)$ de periodo a . Tales funciones $\psi(x)$ se extienden por todo el espacio y no son de cuadrado integrable por lo que, estrictamente hablando, no podemos calcular valores esperados del momento. No obstante, se pueden normalizar las funciones $u_k(x)$ en el intervalo $(-a/2, a/2)$ y definir productos escalares sobre dicho intervalo. Entonces podemos

definir un *cuasimomento* o *momento cristalino* para un electrón descrito por una función $\psi(x)$ de la forma siguiente

$$\begin{aligned}\langle \hat{P}_x \rangle &= -i\hbar \int_{-a/2}^{+a/2} \psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} dx \\ &= -i\hbar \left(ik \int_{-a/2}^{a/2} |u(x)|^2 dx + \int_{-a/2}^{a/2} u(x) \frac{du(x)}{dx} dx \right) \\ &= \hbar k = \frac{2\pi\hbar}{a} m.\end{aligned}$$

Problema 3.11 .- Demostrar que el valor esperado de la energía cinética en cualquier estado normalizable es, necesariamente, no nulo.

En realidad, este problema ya ha sido resuelto casi en su totalidad en el capítulo 2. En efecto, el operador energía cinética en la representación de posiciones es $\hat{K} = \hat{P}_x^2/2m$. Teniendo en cuenta que \hat{P}_x es hermítico cuando actúa sobre estados ψ normalizables, se tiene

$$\langle \hat{K} \rangle_\psi = (\psi, \hat{K}\psi) = \frac{1}{2m} (\psi, \hat{P}_x^2\psi) = \frac{1}{2m} (\hat{P}_x\psi, \hat{P}_x\psi) = \frac{1}{2m} \|\hat{P}_x\psi\|^2 \geq 0.$$

La igualdad sólo se satisface para $\hat{P}_x\psi = 0$, pero esto implica $\psi = A = cte.$; y como hemos supuesto que el estado es normalizable, A debe ser cero. Por consiguiente, para cualquier estado ψ normalizable resulta $\langle \hat{K} \rangle_\psi > 0$.

Problema 3.12 .- Una partícula se mueve bajo la acción de un potencial $V(x)$ cuyo mínimo absoluto es V_{\min} . Demostrar que no puede existir un estado estacionario ligado cuya energía sea, precisamente, V_{\min} .

Si ψ fuera un estado estacionario de energía $E = V_{\min}$, se cumpliría que

$$V_{\min} = \langle \hat{H} \rangle_\psi = \langle \hat{K} \rangle_\psi + \langle \hat{V} \rangle_\psi \Rightarrow \langle \hat{K} \rangle_\psi = V_{\min} - \langle \hat{V} \rangle_\psi.$$

Ahora bien

$$\langle \hat{V} \rangle_\psi = \int_{\mathbb{R}} V(x) |\psi(x)|^2 dx \geq V_{\min} \int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 dx = V_{\min},$$

y así

$$\langle \hat{K} \rangle_\psi = V_{\min} - \langle \hat{V} \rangle_\psi \leq 0.$$

Hemos llegado a una contradicción, pues hemos visto en el problema anterior que $\langle \hat{K} \rangle_\psi$ debe ser necesariamente mayor que cero. Por consiguiente, la hipótesis de partida, $E = V_{\min}$, es falsa.

Problema 3.13 .- Para $t = 0$ la función de onda de una partícula libre de masa m es

$$\Psi(x, 0) = N e^{-\alpha|x|}, \quad \text{con } \alpha > 0 \text{ real.}$$

- Calcular la distribución de probabilidad de posición para $t = 0$.
- Calcular la distribución de probabilidad del momento lineal para $t = 0$.
- A partir de a) y b) calcular los valores esperados $\langle \hat{X} \rangle$ y $\langle \hat{P}_x \rangle$ y las desviaciones típicas $\Delta \hat{X}$ y $\Delta \hat{P}_x$.
- Calcular el valor esperado $\langle E \rangle$ de la energía.

a) Nótese, antes de nada, que en el exponente aparece el valor absoluto $|x|$ de la variable, de modo que la función de onda es una función par, lo que permitirá simplificar los cálculos. En primer lugar vamos a calcular el valor de la constante de normalización N :

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx = 2N^2 \int_0^{+\infty} e^{-2\alpha x} dx = \frac{N^2}{\alpha}$$

y así

$$\Psi(x, 0) = \sqrt{\alpha} \exp(-\alpha|x|),$$

de donde obtenemos la densidad de probabilidad

$$\rho(x, 0) = \alpha \exp(-2\alpha|x|).$$

b) Para calcular $\rho_p(p, 0)$ necesitamos obtener la transformada de Fourier de $\Psi(x, 0)$

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

Como la función de onda es par

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}(p, 0) &= 2\sqrt{\frac{\alpha}{2\pi\hbar}} \int_0^{+\infty} \exp(-\alpha x) \cos(px/\hbar) dx \\ &= \sqrt{\frac{2\alpha\hbar}{\pi p^2}} \int_0^{+\infty} \exp\left(-\frac{\alpha\hbar}{p}u\right) \cos(u) du. \end{aligned}$$

La integral es fácil de hacer integrando por partes; simbolizando $\beta = \alpha\hbar/p$

$$\begin{aligned}
 I &= \int_0^{+\infty} \exp(-\beta u) \cos(u) du \\
 &= \exp(-\beta u) \sin(u) \Big|_0^{+\infty} + \beta \int_0^{+\infty} \exp(-\beta u) \sin(u) du \\
 &= \beta \left\{ -\exp(-\beta u) \cos(u) \Big|_0^{+\infty} - \beta \int_0^{+\infty} \exp(-\beta u) \cos(u) du \right\} \\
 &= -\beta(1 + \beta I),
 \end{aligned}$$

de donde

$$I = -\frac{\beta}{1 + \beta^2} = -\frac{\alpha\hbar/p}{1 + (\alpha\hbar/p)^2}.$$

Por tanto,

$$\tilde{\Psi}(p, 0) = \sqrt{\frac{2\alpha\hbar}{\pi p^2}} \frac{\alpha\hbar/p}{1 + (\alpha\hbar/p)^2} = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar\alpha}} \frac{1}{1 + \frac{p^2}{\alpha^2\hbar^2}}.$$

La distribución de probabilidad del momento nos queda entonces

$$\rho_p(p, 0) dp = \frac{2}{\pi\hbar\alpha} \left[1 + \left(\frac{p}{\alpha\hbar} \right)^2 \right]^{-2} dp.$$

c) Tanto $\rho(x, 0)$ como $\rho_p(p, 0)$ son funciones pares, luego

$$\langle \hat{X} \rangle = 0, \quad \langle \hat{P}_x \rangle = 0.$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{X}^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \rho(x, 0) dx = \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \exp(-2\alpha|x|) dx \\
 &= \frac{2}{\alpha^2} \int_0^{+\infty} u^2 \exp(-2u) du = \frac{1}{2\alpha^2}
 \end{aligned}$$

y

$$\langle \hat{P}_x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} p^2 \rho_p(p, 0) dp = \frac{4\hbar^2\alpha^2}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{u^2}{(1+u^2)^2} du = (\alpha\hbar)^2.$$

Por tanto,

$$\Delta \hat{X} = \sqrt{\langle \hat{X}^2 \rangle} = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \quad ; \quad \Delta \hat{P}_x = \sqrt{\langle \hat{P}_x^2 \rangle} = \alpha\hbar$$

(nótese que para este estado se cumple, como debe ser, $\Delta\hat{X} \cdot \Delta\hat{P}_x = \hbar/\sqrt{2} \geq \hbar/2$).

d) Según el enunciado la partícula está libre, es decir, no sometida a ningún potencial.¹³ Como consecuencia,

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{1}{2m} \langle \hat{P}_x^2 \rangle = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}$$

(pruebe a evaluar $\langle \hat{H} \rangle$ de otra manera).

Problema 3.14 .- Una partícula libre viene representada en el instante $t = 0$ por la función de onda

$$\Psi(x, 0) = u(x) \exp\left(\frac{ip_0 x}{\hbar}\right),$$

siendo $u(x)$ una función real y normalizada. Calcular el valor esperado $\langle \hat{P}_x \rangle$ del momento de la partícula y demostrar que la desviación típica del momento $\Delta\hat{P}_x$ no depende del valor de p_0 .

El valor medio del momento es inmediato:

$$\begin{aligned} \langle \hat{P}_x \rangle &= -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} u(x) \exp\left(-\frac{ip_0 x}{\hbar}\right) \frac{d}{dx} \left\{ u(x) \exp\left(\frac{ip_0 x}{\hbar}\right) \right\} dx \\ &= -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} u(x) \frac{du(x)}{dx} dx + p_0 \int_{-\infty}^{+\infty} |u(x)|^2 dx. \end{aligned}$$

Por hipótesis, la función $u(x)$ está normalizada, luego la primera integral es cero (integre por partes y tenga en cuenta que $u(x)$ se anulará en $\pm\infty$) y la segunda es uno. Por consiguiente,

$$\langle \hat{P}_x \rangle = p_0.$$

En cuanto a la incertidumbre, calculemos

$$\begin{aligned} \langle \hat{P}_x^2 \rangle &= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} u(x) \exp\left(-\frac{ip_0 x}{\hbar}\right) \frac{d^2}{dx^2} \left\{ u(x) \exp\left(\frac{ip_0 x}{\hbar}\right) \right\} dx \\ &= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} u(x) \frac{d^2 u(x)}{dx^2} dx + p_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |u(x)|^2 dx \\ &\quad - 2i\hbar p_0 \int_{-\infty}^{+\infty} u(x) \frac{du(x)}{dx} dx \end{aligned}$$

¹³Evidentemente, para que en $t = 0$ la partícula esté en el estado descrito por $\Psi(x, 0)$ habrá habido que prepararla interaccionando con ella de alguna manera; pero a partir de ese instante, la partícula queda libre.

y, recordando los argumentos de antes,

$$\langle \hat{P}_x^2 \rangle = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} u(x) \frac{d^2 u(x)}{dx^2} dx + p_0^2.$$

Por tanto,

$$\begin{aligned} \Delta \hat{P}_x &= \sqrt{\langle \hat{P}_x^2 \rangle - \langle \hat{P}_x \rangle^2} = \sqrt{-\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} u(x) \frac{d^2 u(x)}{dx^2} dx} \\ &= \hbar \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{du(x)}{dx} \right|^2 dx}, \end{aligned}$$

que, efectivamente, es independiente de p_0 .

Problema 3.15 .- En la teoría del momento angular es conveniente utilizar los operadores \hat{L}_+ y \hat{L}_- definidos como

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y.$$

Calcular las relaciones de conmutación entre \hat{L}_+ , \hat{L}_- y \hat{L}_z .

Teniendo en cuenta la propiedad distributiva de los conmutadores, y las relaciones de conmutación entre \hat{L}_x , \hat{L}_y y \hat{L}_z , se tiene

$$\begin{aligned} [\hat{L}_+, \hat{L}_z] &= [\hat{L}_x, \hat{L}_z] + i[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = -i\hbar\hat{L}_y + i(i\hbar\hat{L}_x) \\ &= -\hbar(\hat{L}_x + i\hat{L}_y) = -\hbar\hat{L}_+. \end{aligned}$$

De modo análogo se obtiene $[\hat{L}_-, \hat{L}_z] = \hbar\hat{L}_-$.

Por otra parte

$$\begin{aligned} [\hat{L}_+, \hat{L}_-] &= [\hat{L}_x + i\hat{L}_y, \hat{L}_x - i\hat{L}_y] \\ &= [\hat{L}_x, \hat{L}_x] + i[\hat{L}_y, \hat{L}_x] - i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] + [\hat{L}_y, \hat{L}_y] \\ &= -2i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = 2\hbar\hat{L}_z. \end{aligned}$$

Problema 3.16 .- Sea una función $\psi(x, y, z)$ escrita en coordenadas cartesianas en el espacio tridimensional; los operadores cuánticos correspondientes a las componentes cartesianas del momento son, como es sabido, $\hat{P}_x = -i\hbar(\partial/\partial x)$, $\hat{P}_y = -i\hbar(\partial/\partial y)$ y $\hat{P}_z = -i\hbar(\partial/\partial z)$. Consideremos ahora la función escrita en coordenadas polares $\psi(r, \theta, \phi)$.

¿Es $-i\hbar(\partial/\partial r)$ el operador cuántico correspondiente a la componente radial p_r del momento?

Los operadores cuánticos que corresponden a las magnitudes clásicas deben ser operadores hermíticos pues sólo así se garantiza que sus valores propios sean reales. Sin embargo, el operador $-i\hbar(\partial/\partial r)$ no es hermítico. Ello se debe a que las integrales que aparecen en los productos escalares están extendidas a todo el espacio tridimensional e incluyen el elemento de volumen $dV = r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi$. Entonces (considerando por simplicidad sólo la dependencia radial de las funciones) para cualesquiera funciones f y g

$$\begin{aligned} \left(f(r), -i\hbar \frac{dg(r)}{dr} \right) &= -i\hbar \int_0^\infty f^*(r) \frac{dg(r)}{dr} 4\pi r^2 dr \\ &= -i\hbar 4\pi \left[f^*(r) g(r) r^2 \right]_0^\infty \\ &\quad + i\hbar 4\pi \int_0^\infty \left(2r f^*(r) + r^2 \frac{df^*(r)}{dr} \right) g(r) dr \\ &= -i\hbar 4\pi \left[f^*(r) g(r) r^2 \right]_0^\infty + \left(-i\hbar \frac{df(r)}{dr}, g(r) \right) \\ &\quad + i\hbar 8\pi \int_0^\infty r f^*(r) g(r) dr. \end{aligned}$$

Así, aunque las funciones $f(r)$, $g(r)$ tiendan a cero lo suficientemente rápido para que el primer término sea nulo en el infinito, la última integral será en general diferente de cero y, por lo tanto, no se cumple la condición de hermiticidad.

Problema 3.17 .- El operador \hat{L}_z (componente z del momento angular) se escribe en coordenadas polares

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

siendo φ el ángulo azimutal. Estudiar qué condiciones deben satisfacer las funciones $f(\varphi)$ sobre las que debe actuar dicho operador para que sea hermítico.

El operador \hat{L}_z es formalmente idéntico al operador \hat{P}_x . Sin embargo, φ es ahora un ángulo azimutal y, por consiguiente, los límites de integración en las integrales que dan los productos escalares son 0 y 2π . Entonces, integrando

por partes, como en el problema anterior, tenemos

$$\begin{aligned} \left(f(\varphi), \hat{L}_z g(\varphi) \right) &= -i\hbar \int_0^{2\pi} f^*(\varphi) \frac{dg(\varphi)}{d\varphi} d\varphi \\ &= -i\hbar f^*(\varphi)g(\varphi) \Big|_0^{2\pi} + i\hbar \int_0^{2\pi} \frac{df^*(\varphi)}{d\varphi} g(\varphi) d\varphi \\ &= i\hbar f^*(\varphi)g(\varphi) \Big|_0^{2\pi} + \left(\hat{L}_z f(\varphi), g(\varphi) \right). \end{aligned}$$

Por lo tanto, para que \hat{L}_z sea hermítico el producto $f^*(\varphi)g(\varphi)$ debe tomar el mismo valor para $\varphi = 0$ y para $\varphi = 2\pi$. Esto ocurrirá si las funciones son periódicas con periodo 2π .

3.18.2 Relaciones de incertidumbre.

Problema 3.18 .- A partir de las relaciones de incertidumbre, hacer una estimación para una cota inferior de la energía del estado fundamental de una partícula de masa m en un pozo cuadrado infinito de anchura L , esto es, sometida a la acción del potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in [-L/2, L/2] \\ +\infty & \text{si } x \notin [-L/2, L/2]. \end{cases}$$

La relación de incertidumbre posición-momento es $\Delta \hat{X} \cdot \Delta \hat{P}_x \geq \hbar/2$. Ahora bien, en un pozo simétrico centrado en el origen se tiene $\langle \hat{X} \rangle = 0$, y por consiguiente, $(\Delta \hat{X})^2 = \langle \hat{X}^2 \rangle - \langle \hat{X} \rangle^2 = \langle \hat{X}^2 \rangle$. Sabemos también que para cualquier estado estacionario $\langle \hat{P}_x \rangle = 0$ y $(\Delta \hat{P}_x)^2 = \langle \hat{P}_x^2 \rangle$. En resumen, para un estado estacionario de un pozo simétrico, la relación de incertidumbre equivale a

$$\Delta \hat{X} \cdot \Delta \hat{P}_x \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \langle \hat{X}^2 \rangle \cdot \langle \hat{P}_x^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

El hamiltoniano del sistema dentro del pozo es $\hat{H} = \hat{P}_x^2/2m$, de modo que

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{\langle \hat{P}_x^2 \rangle}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{8m \langle \hat{X}^2 \rangle}.$$

Evidentemente, si la anchura del pozo es L , $\langle \hat{X}^2 \rangle$ será del orden de L^2 , lo que nos daría una cota $E \geq \hbar^2/8mL^2$. Esta cota es bastante pequeña y no limita mucho los posibles valores de la energía del estado fundamental.

Para obtener una cota algo mejor (más restrictiva) podemos afinar algo más el cálculo de la desviación típica de la posición. En una aproximación clásica, la partícula tendría la misma probabilidad de estar en cualquier punto en el interior del pozo, de modo que su distribución de probabilidad de posición sería $\rho(x) dx = (1/L) dx$. Entonces

$$\langle X^2 \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} x^2 \rho(x) dx = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} x^2 dx = \frac{L^2}{12}.$$

Con este valor para $\langle X^2 \rangle$ obtenemos una cota inferior para la energía $E \geq 3\hbar^2/2mL^2$, que es 12 veces mayor que la anterior, y por lo tanto limita más el intervalo de valores para la energía del estado fundamental.

De hecho, en el caso del pozo cuadrado infinito es fácil calcular (lo veremos en un problema posterior) que la energía del estado fundamental es $E_1 = \pi^2\hbar^2/2mL^2$, que es unas 40 veces mayor que nuestra cota más tosca pero sólo 3 veces mayor que la cota que hemos obtenido con un cálculo más aproximado (aunque muy simple).

Problema 3.19 .- A partir de las relaciones de incertidumbre hacer una estimación de una cota inferior para la energía del estado fundamental de una partícula de masa m en un pozo de potencial $V(x) = b|x|^n$, siendo n un número entero positivo.

Antes de nada, podemos ver mediante un análisis dimensional cómo dependerá la energía de las tres constantes físicas que intervienen en el problema, a saber, \hbar , m y b . Evidentemente \hbar y m tienen dimensiones de [energía \times tiempo] = ML^2T^{-1} y [masa] = M , respectivamente. Sin embargo, las dimensiones de b dependen de n , ya que el producto $b|x|^n$ debe tener dimensiones de energía, y así b tendrá dimensiones de [energía $\times L^{-n}$] = $ML^{2-n}T^{-2}$. Con esto, es fácil ver que la única combinación de las constantes \hbar , m y b con dimensiones de energía es de la forma $(\hbar^2 n b^2 / m^n)^{1/(n+2)}$. Así pues, las cotas que obtengamos podrán escribirse en forma de esta combinación, multiplicada por un factor numérico adimensional.

Como en el problema anterior, el pozo de potencial es simétrico (pues $|x| = |-x|$) y, por lo tanto,

$$\Delta \hat{X} \cdot \Delta \hat{P}_x \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \langle \hat{X}^2 \rangle \cdot \langle \hat{P}_x^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

El valor esperado del hamiltoniano será ahora

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{\langle \hat{P}_x^2 \rangle}{2m} + b \langle |\hat{X}|^n \rangle \geq \frac{\hbar^2}{8m \langle \hat{X}^2 \rangle} + b \langle |\hat{X}|^n \rangle = \frac{\hbar^2}{8m \langle |\hat{X}|^2 \rangle} + b \langle |\hat{X}|^n \rangle$$

(Hemos escrito el último paso para dejar claro que $\langle \hat{X}^2 \rangle = \langle |\hat{X}|^2 \rangle$). Clásicamente, esto corresponde a una energía

$$E \geq \frac{\hbar^2}{8m|x|^2} + b|x|^n.$$

El segundo miembro es ahora una función de $|x|$ cuyo mínimo nos dará una cota inferior. Dicho mínimo corresponde a

$$\frac{dE}{d|x|} = -\frac{\hbar^2}{4m|x|^3} + bn|x|^{n-1} = 0 \Rightarrow |x| = \left(\frac{\hbar^2}{4mbn} \right)^{1/(n+2)}$$

y su valor es entonces

$$\begin{aligned} E_{\min} &= \frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{\hbar^2}{4mbn} \right)^{-2/(n+2)} + b \left(\frac{\hbar^2}{4mbn} \right)^{n/(n+2)} \\ &\simeq \left(\frac{n}{2} + 1 \right) \left(\frac{1}{4n} \right)^{n/(n+2)} \left(\frac{\hbar^{2n} b^2}{m^n} \right)^{1/(n+2)}, \end{aligned}$$

que es la cota inferior buscada.

Veamos ahora algunos casos particulares interesantes:

Caso $n = 1$. Este caso corresponde a un pozo de potencial simétrico con paredes rectas de pendiente $\pm b$. Entonces

$$E_{\min} = \frac{3}{2} \left(\frac{1}{4} \right)^{1/3} \left(\frac{\hbar^2 b^2}{m} \right)^{1/3} \simeq 0.94 \left(\frac{\hbar^2 b^2}{m} \right)^{1/3}.$$

Caso $n = 2$. Este caso corresponde a un pozo de potencial armónico de frecuencia $\omega = \sqrt{2b/m}$. La solución exacta para el estado fundamental de este pozo es $E = \hbar\omega/2 = \hbar\sqrt{b/2m}$. La cota obtenida a partir del principio de incertidumbre es

$$E_{\min} = \frac{2}{\sqrt{8}} \hbar \sqrt{\frac{b}{m}} = \hbar \sqrt{\frac{b}{2m}},$$

que coincide con el valor exacto.

Caso $n \rightarrow \infty$. Para evitar problemas dimensionales, en primer lugar escribamos el potencial $V(x)$ como

$$V(x) = V_0 \left| \frac{x}{a} \right|^n$$

donde hemos sustituido la constante b por V_0/a^n , siendo V_0 una constante con dimensiones de energía y a otra constante con dimensiones de longitud. Teniendo en cuenta que $\lim_{n \rightarrow \infty} |x/a|^n$ es igual a 0 para $|x| < a$ e igual a ∞ para $|x| > a$, este caso corresponde a un pozo cuadrado infinito con paredes en $x = \pm a$, es decir, de anchura $L = 2a$. Así

$$E_{\min} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{n}{2} + 1 \right) \left(\frac{1}{4n} \right)^{n/(n+2)} \left(\frac{\hbar^{2n} (V_0/a^n)^2}{m^n} \right)^{1/(n+2)}$$

y, tomando el límite, fácilmente se obtiene la cota

$$E_{\min} = \frac{\hbar^2}{8ma^2} = \frac{\hbar^2}{2mL^2}$$

frente al valor exacto de la energía del estado fundamental, $E = \pi^2 \hbar^2 / (2mL^2)$.

Problema 3.20 .- Hacer una estimación, a partir del principio de incertidumbre, de una cota inferior para la energía del estado fundamental de un ion H^- (es decir, un átomo constituido por un protón y dos electrones) y compararla con la energía del estado fundamental del átomo neutro.

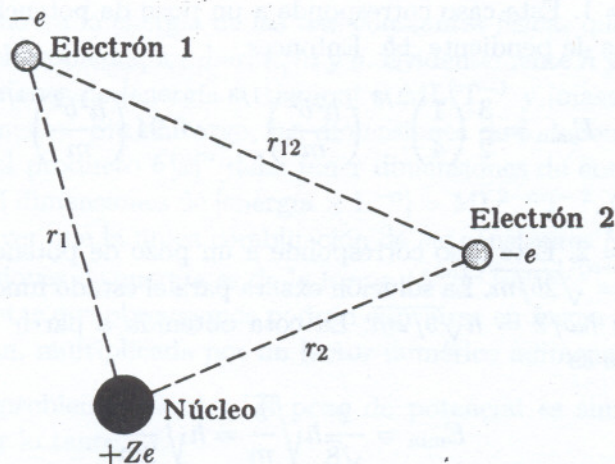


Fig. 3.4.

En rigor, y como sucede con el caso del átomo de hidrógeno simple, deberíamos referir los movimientos de las 3 partículas a su centro de masas común.

No obstante, en primera aproximación, y también como se suele hacer en el caso del átomo de hidrógeno, supondremos que dicho centro de masas coincide aproximadamente con el protón ya que éste es mucho más pesado que los 2 electrones. Entonces podemos considerar el protón en reposo y escribir la energía total del sistema como

$$E = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}.$$

Aquí, r_1 y r_2 son las distancias de los electrones 1 y 2 al protón, y r_{12} es la distancia entre los dos electrones, que está relacionada con r_1 y r_2 por la expresión

$$r_{12}^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \phi,$$

siendo ϕ el ángulo que forman las rectas que unen a los electrones con el protón (véase la figura 3.4). Los dos primeros sumandos de la energía son las energías cinéticas de los electrones 1 y 2; el tercero y cuarto sumandos son las energías potenciales de interacción coulombiana entre el protón y los electrones 1 y 2, y el quinto sumando es la energía potencial de interacción entre ambos electrones.

Nótese que estamos trabajando en coordenadas esféricas y todavía no sabemos cómo calcular exactamente $\langle r \rangle$, $\langle r^2 \rangle$, $\langle p \rangle$ y $\langle p^2 \rangle$. No obstante, y puesto que ahora r es positivo, podemos hacer una estimación¹⁴ de las incertidumbres máximas: $\Delta r \sim r$ y $\Delta p \sim p$. Por consiguiente, las relaciones de incertidumbre estrictas las podemos aproximar por $\Delta r_1 \cdot \Delta p_1 \sim r_1 p_1 \sim \hbar$, y $\Delta r_2 \cdot \Delta p_2 \sim r_2 p_2 \sim \hbar$. Con ayuda de estas relaciones podemos escribir la energía total en la forma

$$E = \frac{\hbar^2}{2mr_1^2} + \frac{\hbar^2}{2mr_2^2} - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2} + \frac{e^2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \phi}}.$$

En el estado fundamental dicha energía debe ser mínima. Las condiciones matemáticas para que la función $E = E(r_1, r_2, \phi)$ tenga un extremo son

$$\frac{\partial E}{\partial r_1} = 0 \quad \frac{\partial E}{\partial r_2} = 0 \quad \frac{\partial E}{\partial \phi} = 0.$$

La tercera condición, junto con la condición $\partial^2 E / \partial \phi^2 > 0$ (para que el extremo sea un mínimo), implica $\cos \phi = -1$. Este es un resultado matemático, pero también es intuitivo desde el punto de vista físico. En efecto, para $\phi = \pi$,

¹⁴Véase la Nota al final del problema siguiente.

la separación entre los electrones es máxima $r_{12} = r_1 + r_2$ (para r_1 y r_2 dados) y su energía de interacción es mínima. Con esto, las otras dos condiciones quedan

$$\frac{\partial E}{\partial r_1} = -\frac{\hbar^2}{mr_1^3} + \frac{e^2}{r_1^2} - \frac{e^2}{(r_1 + r_2)^2} = 0$$

$$\frac{\partial E}{\partial r_2} = -\frac{\hbar^2}{mr_2^3} + \frac{e^2}{r_2^2} - \frac{e^2}{(r_1 + r_2)^2} = 0.$$

Estas dos ecuaciones juntas implican $r_1 = r_2$ y, así, la condición de mínimo se reduce a

$$-\frac{\hbar^2}{mr_1^3} + \frac{e^2}{r_1^2} - \frac{e^2}{4r_1^2} = 0 \Rightarrow r_1 = r_2 = \frac{4\hbar^2}{3me^2} = \frac{4}{3} r_B,$$

siendo r_B el radio de Bohr. Es decir, hemos estimado que la distancia de los electrones al núcleo en el ion H^- es $1/3$ mayor que en el átomo neutro. Ello se debe evidentemente a la repulsión adicional entre los electrones. Sustituyendo este valor del radio en la expresión de la energía se obtiene

$$E_{\min} = -\frac{9}{16} \frac{e^2}{r_B} = \frac{9}{8} E_0^H,$$

que es ligeramente mayor (en valor absoluto) que la energía del estado fundamental del átomo de hidrógeno neutro E_0^H .

Problema 3.21 .- Hacer una estimación de una cota inferior para la energía del estado fundamental del átomo de hidrógeno en el caso relativista.

La ecuación de Schrödinger es válida en tanto que las partículas a las que se aplica tengan una velocidad pequeña comparada con la de la luz. Entonces $(pc)^2 \ll (mc^2)^2$ y podemos escribir

$$E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} \simeq mc^2 + \frac{p^2}{2m}$$

que, mediante la correspondencia $\vec{p} \rightarrow -i\hbar\vec{\nabla}$, nos da el hamiltoniano cuántico no relativista.

Para partículas con energías muy grandes esta aproximación no es válida y hay que utilizar una ecuación de ondas relativista. No obstante, si lo que queremos es simplemente obtener pequeñas correcciones a la energía debidas

a la variación de la masa con la velocidad (excluyendo, por supuesto, la posible transformación de partículas en energía o viceversa), podemos escribir la expresión relativista para la energía cinética. Entonces, la energía del electrón en el átomo de hidrógeno será (prescindiendo de la energía en reposo)

$$E = E_{\text{cin}} + E_{\text{pot}} = \sqrt{m_e^2 c^4 + p^2 c^2} - m_e c^2 - \frac{e^2}{r}.$$

Siguiendo ahora un razonamiento similar al del problema anterior, tenemos

$$rp \simeq \hbar \Rightarrow E = \sqrt{m_e^2 c^4 + p^2 c^2} - m_e c^2 - \frac{e^2 p}{\hbar}.$$

Ahora es fácil obtener el mínimo de esta expresión que es sólo función de p :

$$\frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{\sqrt{m_e^2 c^4 + p^2 c^2}} - \frac{e^2}{\hbar} = \frac{pc^2}{\sqrt{m_e^2 c^4 + p^2 c^2}} - \alpha c = 0 \Rightarrow p = \frac{m_e \alpha c}{\sqrt{1 - \alpha^2}},$$

donde α es la constante de estructura fina. De esta manera

$$\begin{aligned} E_{\text{min}} &= \left(\frac{m_e^2 \alpha^2 c^4}{1 - \alpha^2} + m_e^2 c^4 \right)^{1/2} - m_e c^2 - \frac{m_e \alpha^2 c^2}{\sqrt{1 - \alpha^2}} \\ &= m_e c^2 \left[(1 - \alpha^2)^{1/2} - 1 \right]. \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta que $\alpha \simeq 1/137 \ll 1$, podemos desarrollar la raíz en serie de potencias, y así

$$E_{\text{min}} = m_e c^2 \left(1 - \frac{\alpha^2}{2} + \frac{\alpha^4}{8} - \dots - 1 \right) = -\frac{1}{2} m_e c^2 \alpha^2 + \frac{1}{8} m_e c^2 \alpha^4 - \dots$$

El primer término coincide con el valor no relativista y el segundo corresponde a la corrección relativista de primer orden. Es fácil ver que dicha corrección es del orden de los 10^{-4} eV.

Nota: La utilización del principio de incertidumbre que se ha hecho en los dos problemas anteriores no es demasiado rigurosa. Si los hemos incluido en este apartado es por su carácter heurístico. En realidad, se trata de una combinación de argumentos semiclásicos y una versión aproximada de las relaciones de incertidumbre. Por ejemplo, se ha considerado simplemente $\Delta r \simeq r$ y $\Delta p \simeq p$. Esto parece razonable puesto que, en un sistema acotado se puede poner que la incertidumbre máxima Δr_{max} en la distancia al núcleo no puede ser mucho mayor que la propia distancia r ($\Delta r_{\text{max}} \simeq r$). Por tanto, $\Delta p_{\text{min}} \simeq \hbar / \Delta r_{\text{max}}$.

Sin embargo hay otra objeción más seria desde el punto de vista formal. Estrictamente hablando, la relación de incertidumbre afirma que $\Delta\hat{A} \cdot \Delta\hat{B} \geq \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right| / 2$, siendo \hat{A} y \hat{B} dos operadores hermíticos. Los problemas anteriores están planteados en coordenadas polares esféricas y no sabemos todavía cuáles son los operadores hermíticos correspondientes a las componentes polares del momento, ni cuáles son sus relaciones de conmutación con r . (De hecho, hemos visto en un problema anterior que el operador hamiltoniano asociado a p_r no puede ser $-i\hbar\partial/\partial r$).

Por tanto, para resolver el problema de manera más rigurosa deberíamos conocer dichos operadores. Otra forma de resolver el problema consistiría en plantearlo en coordenadas cartesianas y utilizar la relación estricta $\Delta\hat{X} \cdot \Delta\hat{P}_x \geq \hbar/2$, y las análogas para las otras dos componentes. Evidentemente esto complicaría algo los cálculos.

3.18.3 Pozos cuadrados.

Problema 3.22 - Una partícula de masa m se encuentra en el seno de un pozo cuadrado infinito de anchura L , esto es, sometida a la acción del potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in [0, L] \\ +\infty & \text{si } x \notin [0, L] \end{cases}.$$

Calcular los estados estacionarios y las energías correspondientes en dicho sistema.

Evidentemente, para $x \notin [0, L]$ la función de onda es idénticamente nula. En cuanto a la región $x \in [0, L]$, la ecuación de Schrödinger estacionaria es

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

cuya solución general es

$$\varphi(x) = A \sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x + B \cos \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x.$$

Esta función ha de anularse en $x = 0$ y $x = L$. Entonces

$$\varphi(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad B = 0,$$

y

$$\varphi(L) = 0 \Rightarrow \sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} L = 0 \Rightarrow \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} L = n\pi \quad \text{con } n \text{ entero.}$$

Así, pues, los posibles valores de la energía y las funciones propias correspondientes son

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad \varphi_n(x) = A_n \sin \sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar^2}} x = A_n \sin \frac{n\pi x}{L}.$$

La constante A_n se obtiene de la condición de normalización

$$\int_0^L |\varphi_n(x)|^2 dx = A_n^2 \int_0^L \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{L} \right) dx = A_n^2 \frac{L}{2} = 1 \Rightarrow A_n = \sqrt{\frac{2}{L}}.$$

Nótese que podíamos haber planteado el problema del pozo infinito de anchura L con paredes situadas en $x = \pm L/2$ en lugar de estar situadas en $x = 0$ y L . Esto tiene la ventaja de que el pozo sería simétrico con respecto al origen $x = 0$ y podríamos aplicar más fácilmente argumentos de simetría para ciertos cálculos. Evidentemente, las funciones propias ya no tendrán la misma expresión porque hemos desplazado en una cantidad $-L/2$ el origen de coordenadas. Haciendo el cambio $x \rightarrow x - L/2$ es inmediato ver que las funciones de onda en el nuevo pozo son

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos \frac{n\pi x}{L} & \text{si } n \text{ es impar} \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} & \text{si } n \text{ es par,} \end{cases}$$

que son alternativamente pares e impares, como debe cumplirse en un pozo simétrico.

Problema 3.23 .- Una partícula de masa m se encuentra en un potencial cuadrado infinito de anchura L . Su estado inicial es tal que al hacer una medida de su energía hay un 75% de probabilidades de obtener el valor $E = (\pi\hbar)^2/2mL^2$ y un 25% de probabilidades de obtener el valor $E = 2(\pi\hbar)^2/mL^2$.

- Escribir la función de onda inicial $\Psi(x, 0)$.
- Escribir la función de onda $\Psi(x, t)$ para cualquier instante.
- Calcular el valor medio de la posición $\langle \hat{X} \rangle_t$ para cualquier instante. ¿Cómo varía con t ?

- d) Calcular el valor medio del momento $\langle \hat{P}_x \rangle_t$ para cualquier instante. ¿Cómo varía con t ?
- e) Calcular la densidad de probabilidad $|\Psi(x, t)|^2$. ¿En qué instantes se verifica que $|\Psi(x, t)|^2 = |\Psi(x, 0)|^2$?
- f) Calcular la corriente de probabilidad en los instantes en que se verifica la condición del apartado anterior.
- g) Calcular el valor medio $\langle E \rangle_t$ y la desviación típica $(\Delta E)_t$ de la energía. ¿Cómo varían con t ?
- h) Hallar un límite inferior para el tiempo de evolución de cualquier observable.

a) Teniendo en cuenta que los valores propios de la energía para un pozo cuadrado de anchura L son $E_n = \pi^2 \hbar^2 n^2 / (2mL^2)$, el enunciado nos está diciendo que la función de onda que describe el estado de la partícula en $t = 0$ es una combinación lineal de las funciones propias $\varphi_1(x)$ y $\varphi_2(x)$, con coeficientes $|c_1|^2 = 3/4$ y $|c_2|^2 = 1/4$. Como consecuencia

$$\Psi(x, 0) = \sqrt{\frac{3}{4}} \varphi_1(x) + e^{i\delta} \sqrt{\frac{1}{4}} \varphi_2(x) = \frac{\sqrt{3}}{2} \varphi_1(x) + \frac{e^{i\delta}}{2} \varphi_2(x),$$

siendo δ una fase indeterminada. Suponiendo que las paredes del pozo se encuentran en $x = -L/2$ y en $x = L/2$, y utilizando las funciones propias para este caso que hemos obtenido en el problema anterior, tenemos

$$\Psi(x, 0) = \sqrt{\frac{3}{2L}} \cos \frac{\pi x}{L} + e^{i\delta} \sqrt{\frac{1}{2L}} \sin \frac{2\pi x}{L}$$

(obviamente, la función de ondas se anula fuera del intervalo $(-L/2, L/2)$).

b) Puesto que en general

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(x) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right), \quad c_n = (\varphi_n(x), \Psi(x, 0)),$$

la evolución temporal es inmediata:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \sqrt{\frac{3}{2L}} \cos \frac{\pi x}{L} \exp\left(-\frac{iE_1 t}{\hbar}\right) + e^{i\delta} \sqrt{\frac{1}{2L}} \sin \frac{2\pi x}{L} \exp\left(-\frac{iE_2 t}{\hbar}\right) \\ &= \sqrt{\frac{3}{2L}} \cos \frac{\pi x}{L} \exp\left(-it \frac{\pi^2 \hbar}{2mL^2}\right) + e^{i\delta} \sqrt{\frac{1}{2L}} \sin \frac{2\pi x}{L} \exp\left(-it \frac{2\pi^2 \hbar}{mL^2}\right). \end{aligned}$$

c) Para cualquier instante de tiempo, el valor medio de la posición es

$$\langle \hat{X} \rangle_t = \int_{-L/2}^{L/2} \Psi(x, t)^* x \Psi(x, t) dx$$

y puesto que

$$\Psi(x, t) = \frac{\sqrt{3}e^{-iE_1t/\hbar}}{2}\varphi_1(x) + \frac{e^{i\delta}e^{-iE_2t/\hbar}}{2}\varphi_2(x)$$

operando se obtiene

$$\begin{aligned}\langle \hat{X} \rangle_t &= \frac{3}{4}(\hat{X})_{11} + \frac{1}{4}(\hat{X})_{22} + \frac{1}{4}\sqrt{3}e^{iE_1t/\hbar}e^{i\delta}e^{-iE_2t/\hbar}(\hat{X})_{12} \\ &\quad + \frac{1}{4}\sqrt{3}e^{-iE_1t/\hbar}e^{-i\delta}e^{iE_2t/\hbar}(\hat{X})_{21},\end{aligned}$$

donde

$$(\hat{X})_{mn} = \int_{-L/2}^{+L/2} \varphi_m^*(x) x \varphi_n(x) dx.$$

Como los autoestados del pozo son reales, $(\hat{X})_{12} = (\hat{X})_{21}$ y entonces

$$\langle \hat{X} \rangle_t = \frac{3}{4}(\hat{X})_{11} + \frac{1}{4}(\hat{X})_{22} + \frac{\sqrt{3}}{2} \cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar}t - \delta\right)(\hat{X})_{12}.$$

Por la simetría de las funciones de onda de los estados estacionarios

$$(\hat{X})_{11} = (\hat{X})_{22} = 0,$$

mientras que

$$(\hat{X})_{12} = \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{+L/2} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) x \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx = -\frac{16}{9} \frac{L}{\pi^2}.$$

Por consiguiente

$$\langle \hat{X} \rangle_t = -\frac{8\sqrt{3}L}{9\pi^2} \cos(\omega_{12}t - \delta),$$

siendo $\omega_{12} = (E_2 - E_1)/\hbar = 3\pi^2\hbar/(2mL^2)$. La evolución temporal de la posición es de naturaleza armónica, con centro en $L/2$ y periodo de oscilación $T = 2\pi/\omega_{12} = 4mL^2/(3\pi\hbar)$.

d) La evolución del valor medio del momento lineal es inmediata aplicando el teorema de Ehrenfest:

$$\langle \hat{P}_x \rangle_t = m \frac{d\langle \hat{X} \rangle_t}{dt} = \frac{8\sqrt{3}mL\omega_{12}}{9\pi^2} \sin(\omega_{12}t - \delta) = \frac{4\hbar}{\sqrt{3}L} \sin(\omega_{12}t - \delta),$$

evolución que es igualmente armónica, oscilando $\langle \hat{P}_x \rangle_t$ con el mismo periodo T del apartado anterior.

e) La densidad de probabilidad está dada por $\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = \Psi(x, t) \Psi^*(x, t)$. Sustituyendo

$$\rho(x, t) = \left(\sqrt{\frac{3}{2L}} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) e^{-iE_1 t/\hbar} + \sqrt{\frac{1}{2L}} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) e^{i\delta} e^{-iE_2 t/\hbar} \right) \times \\ \left(\sqrt{\frac{3}{2L}} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) e^{iE_1 t/\hbar} + \sqrt{\frac{1}{2L}} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) e^{-i\delta} e^{iE_2 t/\hbar} \right)$$

y, operando,

$$\rho(x, t) = \left[\frac{3}{2L} \cos^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) + \frac{1}{2L} \sin^2\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \right] \\ + \frac{\sqrt{3}}{L} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \cos(\omega_{12}t - \delta).$$

Vemos que $\rho(x, t)$ es suma de un término independiente del tiempo más otro que evoluciona armónicamente con frecuencia ω_{12} . Como consecuencia,

$$\rho(x, 0) = \rho(x, nT), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

f) La corriente de probabilidad es

$$J(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \Psi(x, t) \frac{d\Psi^*(x, t)}{dx} - \Psi^*(x, t) \frac{d\Psi(x, t)}{dx} \right\}$$

Partiendo de la expresión de $\Psi(x, t)$ en términos de las funciones de onda de los estados estacionarios podemos escribir

$$J(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left[\left(\frac{\sqrt{3}e^{-iE_1 t/\hbar}}{2} \varphi_1(x) + \frac{e^{i\delta} e^{-iE_2 t/\hbar}}{2} \varphi_2(x) \right) \right. \\ \left. \times \left(\frac{\sqrt{3}e^{iE_1 t/\hbar}}{2} \varphi_1'(x) + \frac{e^{-i\delta} e^{iE_2 t/\hbar}}{2} \varphi_2'(x) \right) \right] \\ - \frac{i\hbar}{2m} \left[\left(\frac{\sqrt{3}e^{iE_1 t/\hbar}}{2} \varphi_1(x) + \frac{e^{-i\delta} e^{iE_2 t/\hbar}}{2} \varphi_2(x) \right) \right. \\ \left. \times \left(\frac{\sqrt{3}e^{-iE_1 t/\hbar}}{2} \varphi_1'(x) + \frac{e^{i\delta} e^{-iE_2 t/\hbar}}{2} \varphi_2'(x) \right) \right]$$

y, operando,

$$J(x, t) = \frac{\sqrt{3}\hbar}{4m} (\varphi'_1(x) \varphi_2(x) - \varphi_1(x) \varphi'_2(x)) \sin(\omega_{12}t - \delta).$$

Al sustituir los estados por su expresión,

$$J(x, t) = \frac{\sqrt{3}\pi\hbar}{2mL^2} \left[-\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) - 2 \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \right] \sin(\omega_{12}t - \delta).$$

Es decir, $J(x, t)$ varía con la misma frecuencia que $\rho(x, t)$, pero con un desfase de un cuarto de periodo. Por consiguiente, en los instantes nT se cumplirá

$$J(x, t) = -\frac{\sqrt{3}\pi\hbar \sin \delta}{2mL^2} \left\{ \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) + 2 \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \right\}.$$

Por otro lado (hágalo) es fácil comprobar que $\rho(x, t)$ y $J(x, t)$ satisfacen, como debe ser, la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial J(x, t)}{\partial x} = 0.$$

g) Naturalmente, puesto que \hat{H} es una constante del movimiento, ni su valor esperado ni su incertidumbre varían con el tiempo. En efecto

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{3}{4}E_1 + \frac{1}{4}E_2 = \frac{7\pi^2\hbar^2}{8mL^2}$$

y

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \frac{3}{4}E_1^2 + \frac{1}{4}E_2^2 = \frac{19}{16} \left(\frac{\pi^2\hbar^2}{mL^2} \right)^2,$$

de donde

$$\Delta \hat{H} = \sqrt{\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2} = \sqrt{\frac{19}{16} - \left(\frac{7}{8}\right)^2} \frac{\pi^2\hbar^2}{mL^2} = \frac{3\sqrt{3}}{8} \frac{\pi^2\hbar^2}{mL^2}.$$

h) Por último, el tiempo τ_A de evolución de un observable cualquiera \hat{A} y la desviación típica de la energía $\Delta \hat{H}$ están ligados por la relación de incertidumbre energía/tiempo, en consecuencia

$$\tau_A \Delta \hat{H} \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Rightarrow \quad \tau_A \geq \frac{\hbar}{2\Delta \hat{H}} = \frac{4\sqrt{3}mL^2}{9\pi^2\hbar}.$$

Problema 3.24 .- Una partícula en un pozo cuadrado infinito de anchura L se encuentra, en el instante $t = 0$, en un estado definido por la función de onda $\Psi(x, 0) = Ax(L - x)$, siendo A una constante de normalización. Calcular la distribución de probabilidad $\rho_E(E_n)$ de la energía, su valor medio $\langle E \rangle$ y su desviación típica ΔE .

Según el enunciado del problema, el pozo se encuentra centrado entre 0 y L , puesto que $\Psi(x, 0)$ se anula en estos puntos. Empecemos normalizando la función de ondas:

$$1 = A^2 \int_0^L x^2 (L - x)^2 dx = \frac{A^2 L^5}{30},$$

con lo que tenemos

$$\Psi(x, 0) = \frac{\sqrt{30}}{L^{5/2}} x(L - x) = \sqrt{\frac{30}{L}} \frac{x}{L} \left(1 - \frac{x}{L}\right).$$

El valor esperado de la energía es

$$\langle \hat{H} \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L \Psi(x, 0) \frac{\partial^2 \Psi(x, 0)}{\partial x^2} dx = \frac{5\hbar^2}{mL^2} = \frac{10}{\pi^2} E_1 \simeq 1,01 E_1.$$

Análogamente,

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \left(\frac{\hbar^2}{2mL^2} \right)^2 \int_0^L \Psi(x, 0) \frac{\partial^4 \Psi(x, 0)}{\partial x^4} dx = \frac{30\hbar^4}{m^2 L^4}.$$

Por tanto,

$$\Delta \hat{H} = \sqrt{\frac{30\hbar^4}{m^2 L^4} - \left(\frac{5\hbar^2}{mL^2} \right)^2} = \frac{\sqrt{5}\hbar^2}{mL^2} = \frac{2\sqrt{5}}{\pi^2} E_1 \simeq 0,45 E_1.$$

Observamos que el valor esperado de la energía $\langle \hat{H} \rangle$ es prácticamente el del estado fundamental. Esto es lógico, puesto que la función $\Psi(x, 0)$ es muy similar a $\varphi_1(x)$.

Calculemos ahora la distribución de probabilidad $\rho_E(E_n) = P(E_n)$, esto es, la probabilidad de que al medir la energía obtengamos el valor n -ésimo del espectro. Ahora bien, la función $\Psi(x, 0)$ es simétrica respecto del centro del pozo; luego, si llamamos φ_n a las autofunciones de la energía del pozo, todos los productos escalares (φ_n, Ψ) en los que la función φ_n sea impar respecto del

centro del pozo se anularán, como sucede para todos los n pares ($n = 2, 4, \dots$). Por tanto, tenemos que

$$P(E_{2n}) = 0$$

y sólo tendremos que calcular $P(E_{2n+1})$ con $n = 0, 1, \dots$. Puesto que

$$\varphi_{2n+1}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{(2n+1)\pi x}{L},$$

nos queda

$$P(E_{2n+1}) = |(\varphi_{2n+1}, \Psi)|^2 = 60 \left| \int_0^1 u(1-u) \sin[(2n+1)\pi u] du \right|^2 \equiv 60 I_n^2,$$

donde

$$I_n = \int_0^1 u(1-u) \sin[(2n+1)\pi u] du.$$

La integral no es excesivamente complicada (un par de integraciones por partes bastan). El resultado es

$$I_n = \frac{4}{\pi^3 (8n^3 + 12n^2 + 6n + 1)} = \frac{4}{\pi^3 (2n+1)^3}$$

y entonces

$$P(E_{2n+1}) = \frac{960}{\pi^6} \frac{1}{(2n+1)^6}, \quad n = 0, 1, \dots$$

(nótese que, en correspondencia a lo que comentamos respecto a la función de onda anteriormente, hemos encontrado que $P(E_1)$ es prácticamente la unidad, $P(E_1) = 960/\pi^6 = 0,99856$).

Nota: Podemos obtener los valores esperados de \hat{H} y \hat{H}^2 a partir de esta distribución de probabilidad. Para ello es necesaria la fórmula

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^{2K}} = \frac{(2^{2K} - 1) \pi^{2K}}{2 \times (2K)!} B_K$$

donde B_K son los llamados números de Bernoulli: $B_1 = 1/6$, $B_2 = 1/30$, $B_3 = 1/42$, ... Así, empecemos verificando la condición de normalización de las probabilidades $P(E)$. En efecto,

$$\sum_{n=0}^{\infty} P(E_{2n+1}) = \frac{960}{\pi^6} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^6} = \frac{960}{\pi^6} \frac{(2^6 - 1) \pi^6}{2 \times 6!} B_3 = 42 B_3 = 1.$$

El valor esperado de la energía es

$$\begin{aligned}\langle \hat{H} \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} P(E_{2n+1}) E_{2n+1} = \frac{960}{\pi^6} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^6} \frac{\pi^2 \hbar^2 (2n+1)^2}{2mL^2} \\ &= \frac{480}{\pi^4} \frac{\hbar^2}{mL^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^4} = \frac{480}{\pi^4} \frac{\hbar^2}{mL^2} \frac{(2^4 - 1) \pi^4}{2 \times 4!} B_2 \\ &= \frac{150}{mL^2} \hbar^2 B_2 = \frac{5\hbar^2}{mL^2}.\end{aligned}$$

Por último,

$$\begin{aligned}\langle \hat{H}^2 \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} P(E_{2n+1}) E_{2n+1}^2 = \frac{960}{\pi^6} \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \right)^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^2} \\ &= \frac{180\hbar^4}{m^2 L^4} B_1 = \frac{30\hbar^4}{m^2 L^4},\end{aligned}$$

valores todos ellos que coinciden (naturalmente) con los obtenidos anteriormente.

Problema 3.25 .- Una partícula de masa m se encuentra en el n -ésimo estado ligado de un pozo cuadrado infinito. Determinar la distribución de probabilidad de momento lineal para dicha partícula.

Consideremos un pozo cuadrado infinito de anchura L con paredes en 0 y L . Las funciones propias son

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} = \frac{1}{\sqrt{2Li}} \left(\exp\left(\frac{in\pi x}{L}\right) - \exp\left(\frac{-in\pi x}{L}\right) \right)$$

para $x \in (0, L)$ y $\varphi_n(x) = 0$ para $x \notin (0, L)$. La función de ondas dentro del pozo es igual a una combinación lineal de dos funciones que coinciden con funciones propias del momento lineal.¹⁵

Apliquemos la transformada de Fourier a la función de onda $\varphi_n(x)$

$$\begin{aligned}\tilde{\varphi}_n(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^L \varphi_n(x) \exp\left(\frac{-ipx}{\hbar}\right) dx \\ &= \frac{1}{2i\sqrt{\pi\hbar L}} \int_0^L \left(\exp\left(\frac{in\pi x}{L}\right) - \exp\left(\frac{-in\pi x}{L}\right) \right) \exp\left(\frac{-ipx}{\hbar}\right) dx.\end{aligned}$$

¹⁵ Esto podría hacer pensar que la forma de Fourier de $\psi_n(x)$ será $\tilde{\psi}_n(p) = \{\delta(p - p_n) + \delta(p + p_n)\} / \sqrt{2}$, donde $p_n = \sqrt{2mE_n}$. Pero esto no es completamente exacto. En efecto, fuera del pozo la función de ondas es idénticamente nula, mientras que la combinación lineal de autoestados del momento *no lo es*. De esta forma, $\psi_n(x)$ *no es combinación lineal de dos autofunciones del momento lineal* y esto va a implicar contribuciones a $\tilde{\psi}_n(p)$ de valores $p \neq \pm p_n$ aunque, como veremos inmediatamente, de menor amplitud.

Agrupando términos

$$\tilde{\varphi}_n(p) = \frac{1}{2i\sqrt{\pi\hbar L}} \int_0^L \left\{ \exp \left[i \left(\frac{n\pi}{L} - \frac{p}{\hbar} \right) x \right] - \exp \left[-i \left(\frac{n\pi}{L} + \frac{p}{\hbar} \right) x \right] \right\} dx.$$

Las integrales son muy sencillas de hacer. En concreto se tiene que

$$\begin{aligned} \int_0^L \exp \left[i \left(\frac{n\pi}{L} - \frac{p}{\hbar} \right) x \right] dx &= \frac{-i}{\frac{n\pi}{L} - \frac{p}{\hbar}} \left\{ \exp \left[i \left(\frac{n\pi}{L} - \frac{p}{\hbar} \right) L \right] - 1 \right\} \\ &= \frac{-ie^{-ipL/\hbar}}{\frac{n\pi}{L} - \frac{p}{\hbar}} \left\{ e^{in\pi} - e^{ipL/\hbar} \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_0^L \exp \left[-i \left(\frac{n\pi}{L} + \frac{p}{\hbar} \right) x \right] dx &= \frac{i}{\frac{n\pi}{L} + \frac{p}{\hbar}} \left\{ \exp \left[-i \left(\frac{n\pi}{L} + \frac{p}{\hbar} \right) L \right] - 1 \right\} \\ &= \frac{ie^{-ipL/\hbar}}{\frac{n\pi}{L} + \frac{p}{\hbar}} \left\{ e^{-in\pi} - e^{ipL/\hbar} \right\} \end{aligned}$$

y así

$$\tilde{\varphi}_n(p) = \frac{-e^{-ipL/\hbar}}{2\sqrt{\pi\hbar L}} \left\{ \frac{e^{-in\pi} - e^{ipL/\hbar}}{\frac{n\pi}{L} + \frac{p}{\hbar}} + \frac{e^{in\pi} - e^{ipL/\hbar}}{\frac{n\pi}{L} - \frac{p}{\hbar}} \right\}.$$

Dado que $\exp(\pm in\pi) = (-1)^n$, operando,

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_n(p) &= \sqrt{\frac{L\pi}{\hbar}} \frac{ne^{-ipL/\hbar} (e^{ipL/\hbar} - (-1)^n)}{n^2\pi^2 - p^2L^2/\hbar^2} \\ &= \sqrt{\frac{L\pi}{\hbar}} \frac{n \exp\left(\frac{-ipL}{2\hbar}\right) \left(\exp\left(\frac{ipL}{2\hbar}\right) - (-1)^n \exp\left(\frac{-ipL}{2\hbar}\right) \right)}{n^2\pi^2 - p^2L^2/\hbar^2}. \end{aligned}$$

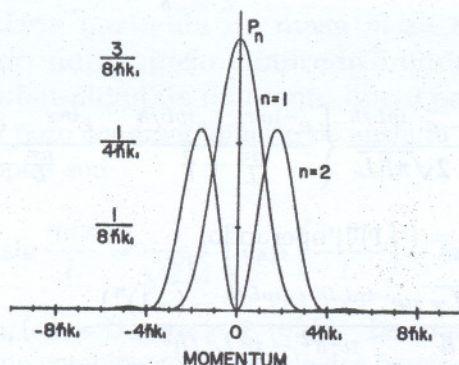
Nótese que el resultado se puede simplificar aun más, ya que

$$\left(\exp\left(\frac{ipL}{2\hbar}\right) - (-1)^n \exp\left(\frac{-ipL}{2\hbar}\right) \right) = \begin{cases} 2 \cos\left(\frac{pL}{2\hbar}\right) & \text{si } n \text{ es impar} \\ 2i \sin\left(\frac{pL}{2\hbar}\right) & \text{si } n \text{ es par.} \end{cases}$$

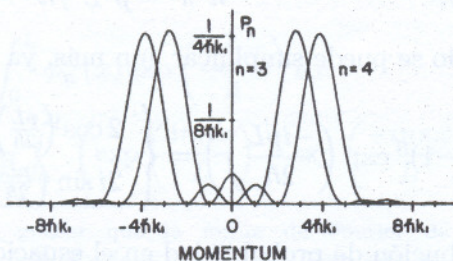
Por lo tanto, la distribución de probabilidad en el espacio de momentos es

$$|\tilde{\varphi}_n(p)|^2 = \frac{4L\pi}{\hbar} \left(\frac{n}{n^2\pi^2 - p^2L^2/\hbar^2} \right)^2 \times \begin{cases} \cos^2\left(\frac{pL}{2\hbar}\right) & \text{si } n \text{ es impar} \\ \sin^2\left(\frac{pL}{2\hbar}\right) & \text{si } n \text{ es par.} \end{cases}$$

Podemos estudiar ahora en detalle la forma de esta función de distribución. Consideremos el caso n impar. La función $\cos^2(pL/(2\hbar))$ presenta máximos para valores $p = 2m(\pi\hbar/L)$ con m entero; por tanto $|\tilde{\varphi}_n(p)|^2$ también presenta máximos locales para estos valores. Sin embargo, para estos valores de p , el denominador toma el valor $(n^2 - (2m)^2)^2 \pi^4$, de modo que la amplitud de los máximos disminuye rápidamente a medida que aumenta $|n^2 - (2m)^2|$. Por otra parte, la función $\cos^2(pL/(2\hbar))$ se anula para $p = (2m+1)\pi\hbar/L$. Sucede, sin embargo, que el denominador también se anula para $p = n\pi\hbar/L$ (recuerde que n es impar). En definitiva, cuando $2m+1 = n$, tanto el numerador como el denominador se hacen nulos pero su cociente es finito, como puede verse calculando el límite de $|\tilde{\varphi}_n(p)|^2$ cuando $p \rightarrow n\pi\hbar/L$. En realidad, para este valor (y su opuesto) la función presenta un máximo absoluto. Un análisis muy similar se tiene cuando n es par. En la figura 3.5 se han representado esquemáticamente las distribuciones de momento para los estados $n = 1, \dots, 4$.



(a)



(b)

Fig. 3.5.

Resumiendo, la función $|\tilde{\varphi}_n(p)|^2$ presenta dos máximos pronunciados centrados en $p_n = \pm n\pi\hbar/L = \pm\sqrt{2mE}$ y con anchuras del orden de $2\pi\hbar/L$. Para estados ligados tales que $n \gg 1$, la anchura de los máximos es mucho menor que su distancia al origen y la distribución de probabilidad de momentos está muy fuertemente concentrada alrededor de los valores $\pm\sqrt{2mE}$. Esto justifica que para valores altos de n , las incertidumbres obtenidas con la distribución $(1/2)(\delta(p - p_n) + \delta(p + p_n))$, que se ha sugerido anteriormente, sean muy similares a los obtenidos con la distribución exacta.

Nota: Es importante hacer todos los cálculos sugeridos en este problema y representar gráficamente las funciones resultantes.

Problema 3.26 .- Una partícula se encuentra inicialmente en el estado propio más bajo de un pozo cuadrado infinito cuyas paredes están en $x = 0$ y $x = L$. Repentinamente se mueve la pared derecha hasta la posición $x = 2L$:

- ¿Cuál es la probabilidad de que, tras la expansión, la partícula se encuentre en el estado fundamental del nuevo pozo?
- ¿Cuál es la probabilidad de que la partícula se encuentre en un estado genérico $n \geq 2$ del nuevo pozo?
- ¿Se conserva el valor esperado de la energía tras la expansión del pozo?

a) Si inicialmente el pozo tiene las paredes en $x = 0$ y $x = L$, el estado inicial ($t = 0^-$) de la partícula será

$$\Psi_{t=0^-}(x) = \varphi_1^{(i)}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L} \quad x \in [0, L],$$

donde el superíndice (i) señala que nos estamos refiriendo al pozo inicial. La energía inicial del mismo es, naturalmente,

$$E_0 = E_1^{(i)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

Tras la expansión súbita, el estado $\Psi_{t=0^+}(x)$ se podrá escribir como combinación lineal de las autofunciones $\varphi_n^{(f)}(x)$ del nuevo pozo, es decir

$$\Psi_{t=0^+}(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n^{(f)}(x),$$

donde

$$\varphi_n^{(f)}(x) = \sqrt{\frac{2}{2L}} \sin \frac{n\pi x}{2L} \quad x \in [0, 2L].$$

De este modo, la probabilidad de encontrar la partícula en un estado n del nuevo pozo será $P(n) = |c_n|^2$ con

$$c_n = \left(\varphi_n^{(f)}(x), \Psi_{t=0^-}(x) \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^L \sin \frac{n\pi x}{2L} \sin \frac{\pi x}{L} dx,$$

donde la integral sólo se extiende de 0 a L puesto que $\Psi_{t=0^-}(x)$ es nula en el intervalo $[L, 2L]$.

② Consideremos primero los estados finales tales que $n = 2l$. En este caso, la integración anterior es inmediata

$$c_{2l} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{2}{L} \int_0^L \sin \frac{2l\pi x}{2L} \sin \frac{\pi x}{L} dx = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{2}{L} \int_0^L \sin \frac{l\pi x}{L} \sin \frac{\pi x}{L} dx = \frac{\delta_{l,1}}{\sqrt{2}},$$

debido a la ortonormalidad de las funciones $\sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$ en $[0, L]$. Así pues

$$c_2 = 1/\sqrt{2}, \quad c_4 = c_6 = \dots = 0$$

Sin embargo, para $n = 2l + 1$ hay que calcular la integral

$$c_{2l+1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{2}{L} \int_0^L \sin \left(\frac{(2l+1)\pi x}{2L} \right) \sin \left(\frac{\pi x}{L} \right) dx.$$

y haciendo el cambio habitual $u = x/L$

$$c_{2l+1} = \sqrt{2} \int_0^1 \sin \left(\frac{(2l+1)\pi u}{2} \right) \sin(\pi u) du = \frac{-4\sqrt{2}(-1)^l}{\pi(4l^2 + 4l - 3)}$$

obtenemos

$$c_n = -4\sqrt{2} \frac{(-1)^l}{\pi(n^2 - 4)} \quad \text{si } n = 2l + 1.$$

En definitiva

$$|c_n|^2 = \begin{cases} 1/2 & \text{si } n = 2 \\ 0 & \text{si } n = 4, 6, \dots \\ \frac{32}{\pi^2} (n^2 - 4)^{-2} & \text{si } n = 1, 3, 5, \dots \end{cases}$$

Por tanto, la probabilidad de que al medir la energía $\Psi_{t=0^+}(x)$ colapse al estado fundamental es

$$|c_1|^2 = \frac{32}{9\pi^2} \simeq 0,36025.$$

c) Inicialmente la partícula estaba en el estado fundamental de un pozo cuadrado infinito de anchura L , de modo que la energía inicial del sistema está perfectamente definida y es

$$E_{\text{ini}} = E_1^{(i)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

En la expansión no cambia la energía. Vamos a comprobarlo utilizando los coeficientes $|c_n|^2$. En primer lugar, tras la expansión del pozo la partícula ya no está en un estado estacionario del nuevo pozo, por lo que su energía ya no está perfectamente definida. El valor esperado de la energía final es

$$E_{\text{fin}} = \langle \hat{H} \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n^{(f)} = \frac{1}{2} E_2^{(f)} + \frac{32}{\pi^2} \sum_{n \text{ impar}} \frac{E_n^{(f)}}{(n^2 - 4)^2}$$

y como $E_n^{(f)} = n^2 (\pi^2 \hbar^2) / [2m (2L)^2]$ nos queda

$$\begin{aligned} E_{\text{fin}} &= \frac{1}{2} \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m (2L)^2} 2^2 + \frac{32}{\pi^2} \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m (2L)^2} \sum_{n \text{ impar}} \frac{n^2}{(n^2 - 4)^2} \\ &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{4mL^2} \left(1 + \frac{16}{\pi^2} \sum_{n \text{ impar}} \frac{n^2}{(n^2 - 4)^2} \right). \end{aligned}$$

Evaluemos ahora la suma

$$\begin{aligned} \sum_{n \text{ impar}} \frac{n^2}{(n^2 - 4)^2} &= \sum_{n \text{ impar}} \frac{n^2 - 4}{(n^2 - 4)^2} + \sum_{n \text{ impar}} \frac{4}{(n^2 - 4)^2} \\ &= \sum_{n \text{ impar}} \frac{1}{n^2 - 4} + \sum_{n \text{ impar}} \frac{4}{(n^2 - 4)^2} \end{aligned}$$

El segundo sumatorio es fácil de evaluar teniendo en cuenta la condición de normalización

$$1 = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = \frac{1}{2} + \frac{32}{\pi^2} \sum_{n \text{ impar}} \frac{1}{(n^2 - 4)^2} \Rightarrow \sum_{n \text{ impar}} \frac{1}{(n^2 - 4)^2} = \frac{\pi^2}{64}.$$

En cuanto al primero de los sumatorios:

$$\begin{aligned} \sum_{n \text{ impar}} \frac{1}{n^2 - 4} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^2 - 4} = \frac{1}{4} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{(2n+1)-2} - \frac{1}{(2n+1)+2} \right) \\ &= \frac{1}{4} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2n-1} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2n+3} \right) \\ &= \frac{1}{4} \left(\left\{ -1 + 1 + \frac{1}{3} + \frac{1}{5} + \dots \right\} - \left\{ \frac{1}{3} + \frac{1}{5} + \dots \right\} \right) = 0. \end{aligned}$$

En resumen

$$E_{\text{fin}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4mL^2} \left(1 + \frac{16}{\pi^2} \frac{\pi^2}{16} \right) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = E_{\text{ini}}.$$

De esta manera, el valor esperado de la energía de la partícula no ha variado en la expansión del pozo. Esto es algo parecido a lo que sucede con la expansión adiabática súbita de un gas perfecto. Si el recipiente que contiene el gas sufre una expansión súbita (mucho más rápida que la velocidad media de las partículas del gas), durante dicha expansión no hay interacción de las paredes con el gas y no se realiza trabajo sobre el mismo; como consecuencia, la energía interna del gas no varía. En nuestro problema, la expansión del pozo es instantánea y no afecta a la función de onda. En otras palabras, la pared en expansión no realiza trabajo sobre la partícula.

Por el contrario, en la expansión cuasiestática de un gas perfecto hay una pérdida de energía interna del gas. Ello se debe a que el gas realiza trabajo sobre la pared del recipiente. Análogamente, si en nuestro problema la expansión del pozo infinito hubiera sido muy lenta, la función de onda tendría tiempo de adaptarse a la posición de las paredes del pozo en cada instante, y la partícula permanecería siempre en el estado fundamental (en cada instante) del pozo. Una vez terminada la expansión, la partícula estaría en el estado fundamental de un pozo de anchura $2L$, y su energía sería $\hbar^2 \pi^2 / (8mL^2)$, es decir la cuarta parte de la energía inicial. La diferencia entre las energías inicial y final es el trabajo realizado por la partícula sobre la pared.

En el caso de la compresión instantánea de un pozo, no podría tratarse de la misma forma ya que, desde un punto de vista puramente matemático, la compresión dejaría parte de la función de onda inicial fuera del pozo. Como esto no es físicamente posible (la partícula no puede atravesar una pared de potencial infinita), la compresión instantánea del pozo debe producir una compresión de la función de onda, lo que equivale a realizar un trabajo sobre la partícula y aumentar su energía.

Problema 3.27 .- Sea $V(x)$ un potencial de la forma (véase la figura 3.6)

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } x < 0 \\ -V_0 & \text{si } x \in [0, a] \\ 0 & \text{si } x > a \end{cases} \quad \text{con} \quad a = 5 \sqrt{\frac{\hbar^2}{mV_0}}.$$

Calcular los valores propios E del hamiltoniano correspondiente.

El hamiltoniano correspondiente a este problema (en la representación de coordenadas) es

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

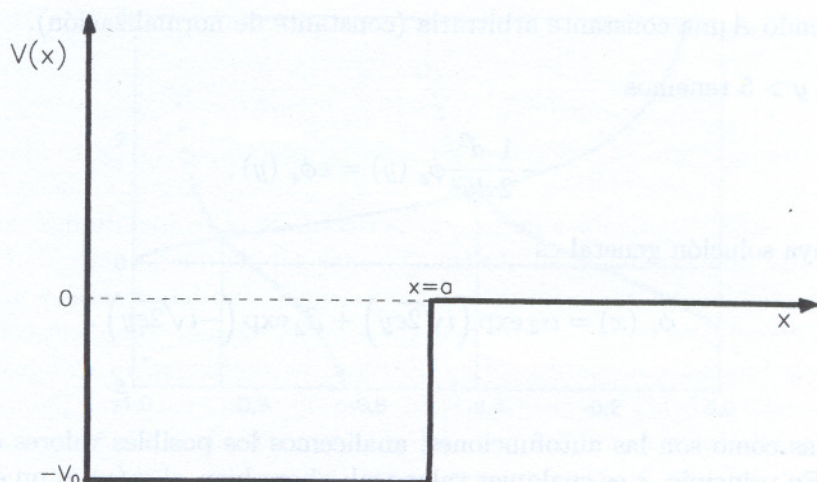


Fig. 3.6.

Es evidente que para $x \leq 0$ las funciones propias son idénticamente nulas, de modo que basta con considerar el problema en el semieje $x > 0$.

Para facilitar la discusión, definamos las dos variables adimensionales $\varepsilon = E/V_0$, $y = (mV_0/\hbar^2)^{1/2} x$. En estas nuevas variables el problema se reduce a calcular el espectro del operador

$$\hat{h} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dy^2} + v(y) \quad , \quad v(y) = \begin{cases} -1 & \text{si } y \in [0, 5] \\ 0 & \text{si } y > 5, \end{cases}$$

que es un operador hermítico cuando su dominio de operación son las funciones de $C_2(\mathbb{R}^+)$ (derivables dos veces) tales que se anulan en $y = 0$.

La autofunción $\phi_\varepsilon(y)$ con autovalor $\varepsilon \in \mathbb{R}$ tendrá formas distintas si $y \in [0, 5]$ o si $y > 5$. Así:

- $y \in [0, 5]$

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dy^2} - 1 \right) \phi_\varepsilon(y) = \varepsilon \phi_\varepsilon(y) \quad \Rightarrow \quad -\frac{d^2}{dy^2} \phi_\varepsilon(y) = 2(\varepsilon + 1) \phi_\varepsilon(y)$$

cuya solución general es

$$\phi_\varepsilon(y) = \alpha_1 \exp\left(i\sqrt{2(\varepsilon + 1)}y\right) + \beta_1 \exp\left(-i\sqrt{2(\varepsilon + 1)}y\right).$$

Como $\phi_\varepsilon(0) = 0$, por hipótesis, esto implica $\alpha_1 = -\beta_1$, de modo que la solución puede escribirse

$$\phi_\varepsilon(y) = A \sin\left(\sqrt{2(\varepsilon + 1)}y\right) \quad , \quad y \in [0, 5],$$

siendo A una constante arbitraria (constante de normalización).

- Si $y > 5$ tenemos

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dy^2} \phi_\varepsilon(y) = \varepsilon \phi_\varepsilon(y),$$

cuya solución general es

$$\phi_\varepsilon(x) = \alpha_2 \exp(i\sqrt{2\varepsilon}y) + \beta_2 \exp(-i\sqrt{2\varepsilon}y).$$

Vistas cómo son las autofunciones, analicemos los posibles valores espectrales. En principio, ε es cualquier valor real; ahora bien, si $\psi(y)$ es un estado normalizado es fácil ver que

$$\left\langle -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dy^2} \right\rangle_\psi = -\frac{1}{2} \int_0^\infty \psi^* \frac{d^2\psi}{dy^2} dy = -\frac{1}{2} \left[\psi^* \frac{d\psi}{dy} \right]_0^\infty + \frac{1}{2} \int_0^\infty \left| \frac{d\psi}{dy} \right|^2 dy > 0,$$

mientras que

$$\langle v(y) \rangle_\psi = \int_0^\infty v(y) |\psi(y)|^2 dy \geq \int_0^\infty v_{\min} |\psi(y)|^2 dy = v_{\min} = -1,$$

donde v_{\min} es el mínimo valor que toma $v(y)$. Así los valores medios $\langle \hat{h} \rangle_\psi$ son estrictamente mayores que -1 y, por lo tanto, $\varepsilon \geq -1$. Inspeccionando la forma de las autofunciones conviene distinguir entre valores de ε positivos y negativos.

a) Caso $\varepsilon \in [-1, 0)$

$$\phi_\varepsilon(y) = \alpha_2 \exp(-\sqrt{2|\varepsilon|}y) + \beta_2 \exp(\sqrt{2|\varepsilon|}y), \quad y \geq 5$$

y no queda más remedio que $\beta_2 = 0$ porque de lo contrario la función divergiría para $y \gg 0$. De esta manera la autofunción es

$$\phi_\varepsilon(y) = \begin{cases} A \sin(\sqrt{2(\varepsilon+1)}y) & \text{si } y \in [0, 5] \\ \alpha_2 \exp(-\sqrt{2|\varepsilon|}y) & \text{si } y > 5. \end{cases}$$

La función $\phi_\varepsilon(y)$ es, por hipótesis, derivable dos veces: tanto $\phi_\varepsilon(y)$ como su derivada han de ser continuas. El único problema puede surgir en $y = 5$.

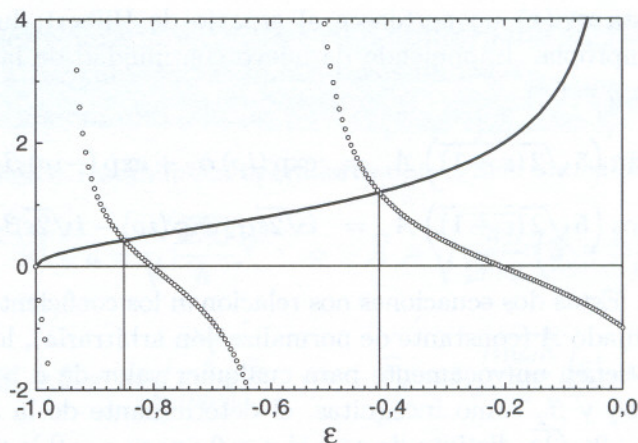


Fig. 3.7.

Así, imponiendo la continuidad de la función y de su derivada en ese punto, $\phi_\varepsilon(5^-) = \phi_\varepsilon(5^+)$ y $\phi'_\varepsilon(5^-) = \phi'_\varepsilon(5^+)$, tenemos las dos ecuaciones

$$A \sin\left(5\sqrt{2(\varepsilon+1)}\right) - \alpha_2 \exp\left(-5\sqrt{2|\varepsilon|}\right) = 0$$

$$A\sqrt{2(\varepsilon+1)} \cos\left(5\sqrt{2(\varepsilon+1)}\right) + \alpha_2\sqrt{2|\varepsilon|} \exp\left(-5\sqrt{2|\varepsilon|}\right) = 0,$$

sistema homogéneo que liga A con α_2 . Para que $\phi_\varepsilon(y) \neq 0$, el sistema de ecuaciones ha de admitir soluciones no nulas por lo que el determinante de la matriz de los coeficientes ha de ser igual a cero:

$$\left[\sqrt{2|\varepsilon|} \sin\left(5\sqrt{2(\varepsilon+1)}\right) + \sqrt{2(\varepsilon+1)} \cos\left(5\sqrt{2(\varepsilon+1)}\right)\right] e^{-5\sqrt{2|\varepsilon|}} = 0.$$

Esto significa que

$$\sqrt{-\frac{\varepsilon+1}{\varepsilon}} = -\tan\left(5\sqrt{2(\varepsilon+1)}\right) \quad ; \quad \varepsilon \in (-1, 0).$$

Ésta es una ecuación trascendente, cuyas soluciones en el intervalo $(-1, 0)$ nos darán los primeros valores del espectro. Dibujando ambas funciones (véase la figura 3.7) vemos que sólo coinciden en $\varepsilon \simeq -0.85$ y en $\varepsilon \simeq -0.42$ (también $\varepsilon = -1$ es solución de la ecuación, pero este valor corresponde a una $\phi_\varepsilon(y)$ idénticamente nula). Estos son los dos primeros valores del espectro, que es discreto ya que la autofunción es normalizable.

b) Vayamos ahora al caso $\varepsilon \geq 0$. En este caso la autofunción es

$$\phi_\varepsilon(y) = \begin{cases} A \sin\left(\sqrt{2(\varepsilon+1)}y\right) & \text{si } y \in [0, 5] \\ \alpha_2 \exp(i\sqrt{2\varepsilon}y) + \beta_2 \exp(-i\sqrt{2\varepsilon}y) & \text{si } y > 5. \end{cases}$$

Nótese que esta $\phi_\varepsilon(x)$ no pertenece al espacio de Hilbert, luego será una autofunción impropia. Imponiendo de nuevo continuidad de la función y de su derivada en $y = 5$

$$\begin{aligned}\sin\left(5\sqrt{2(\varepsilon+1)}\right)A &= \exp(i\rho)\alpha_2 + \exp(-i\rho)\beta_2 \\ \sqrt{2(\varepsilon+1)}\cos\left(5\sqrt{2(\varepsilon+1)}\right)A &= i\sqrt{2\varepsilon}\alpha_2\exp(i\rho) - i\sqrt{2\varepsilon}\beta_2\exp(-i\rho),\end{aligned}$$

con $\rho = 5\sqrt{2\varepsilon}$. Estas dos ecuaciones nos relacionan los coeficientes A , α_2 y β_2 . Sin embargo, fijado A (constante de normalización arbitraria), los coeficientes α_2 y β_2 se obtienen unívocamente para cualquier valor de $\varepsilon > 0$ (en efecto, considerando α_2 y β_2 como incógnitas, el determinante de la matriz de los coeficientes es $-2i\sqrt{2\varepsilon}$, distinto de cero si $\varepsilon > 0$; para $\varepsilon = 0$ la única solución es $A = \alpha_2 = \beta_2 = 0$, que no es aceptable).

En definitiva, el espectro de \hat{h} consta de los dos valores espectrales discretos $\{-0.85, -0.42\}$ que hemos obtenido en (a) y de todo el intervalo continuo $(0, +\infty)$.

Volviendo a las variables físicas, los niveles energéticos discretos del potencial $V(x)$ serán

$$E_1 = -0.85V_0, \quad E_2 = -0.42V_0,$$

que corresponden a estados ligados, mientras que cualquier valor $E > 0$ será un valor propio correspondiente a un estado no ligado.

3.18.4 Oscilador armónico.

Problema 3.28 .- Dado un oscilador armónico unidimensional de masa m y frecuencia ω , cuyo hamiltoniano es

$$\hat{H}_\omega = \frac{\hat{P}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2,$$

se definen los operadores “creación” \hat{a}^\dagger y “aniquilación” (o “destrucción”) \hat{a} de la forma

$$\begin{aligned}\hat{a} &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{X} + i\sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}\hat{P}_x\right) \\ \hat{a}^\dagger &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{X} - i\sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}\hat{P}_x\right).\end{aligned}$$

a) Escribir los operadores \hat{X} , \hat{P}_x y el hamiltoniano \hat{H}_ω de un oscilador armónico en función de los operadores \hat{a}^\dagger y \hat{a} .

b) Calcular los conmutadores $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]$, $[\hat{H}_\omega, \hat{a}^\dagger]$ y $[\hat{H}_\omega, \hat{a}]$.

(a) Sumando y restando los operadores obtenemos inmediatamente

$$\hat{a}^\dagger + \hat{a} = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \hat{X} \Rightarrow \hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a})$$

$$\hat{a}^\dagger - \hat{a} = -i\sqrt{\frac{2}{m\omega\hbar}} \hat{P}_x \Rightarrow \hat{P}_x = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a})$$

Por otra parte

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{X}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar} \hat{P}_x^2 + \frac{i}{2\hbar} [\hat{X}, \hat{P}_x] = \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{X}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar} \hat{P}_x^2 - \frac{1}{2}$$

o también

$$\hat{a} \hat{a}^\dagger = \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{X}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar} \hat{P}_x^2 - \frac{i}{2\hbar} [\hat{X}, \hat{P}_x] = \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{X}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar} \hat{P}_x^2 + \frac{1}{2}$$

de modo que el hamiltoniano se puede escribir como

$$\begin{aligned} \hat{H}_\omega &= \frac{\hat{P}_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{X}^2 = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger \right) = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \\ &= \hbar\omega \left(\hat{a} \hat{a}^\dagger - \frac{1}{2} \right). \end{aligned}$$

(b) Del resultado anterior, es fácil ver que¹⁶

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a} \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a} = 1.$$

Por otra parte

$$[\hat{H}_\omega, \hat{a}^\dagger] = \hbar\omega [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hbar\omega (\hat{a}^\dagger [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] \hat{a}) = \hbar\omega \hat{a}^\dagger$$

y, análogamente,

$$[\hat{H}_\omega, \hat{a}] = \hbar\omega [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}] = \hbar\omega (\hat{a}^\dagger [\hat{a}, \hat{a}] + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}] \hat{a}) = -\hbar\omega \hat{a}.$$

¹⁶ Este mismo resultado se podría haber obtenido directamente a partir de la definición de \hat{a}^\dagger y \hat{a} y la propiedad distributiva de los conmutadores

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{1}{2\hbar} (-i[\hat{X}, \hat{P}_x] + i[\hat{P}_x, \hat{X}]) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{X}, \hat{P}_x] = 1.$$

Problema 3.29 .- Sean ϕ_n y E_n las funciones propias y los valores propios, respectivamente, del hamiltoniano de un oscilador armónico, es decir $\hat{H}_\omega \phi_n = E_n \phi_n$. Demostrar que si ϕ_n es función propia de \hat{H}_ω con valor propio E_n , entonces $\hat{a}^\dagger \phi_n$ es función propia de \hat{H}_ω con valor propio $E_n + \hbar\omega$. Asimismo, demostrar que $\hat{a} \phi_n$ es función propia de \hat{H}_ω con valor propio $E_n - \hbar\omega$.

Utilizando los resultados para los conmutadores $[\hat{H}_\omega, \hat{a}^\dagger]$ y $[\hat{H}_\omega, \hat{a}]$ que hemos obtenido anteriormente,

$$\begin{aligned}\hat{H}_\omega (\hat{a}^\dagger \phi_n) &= \hat{H}_\omega \hat{a}^\dagger \phi_n = [\hat{H}_\omega, \hat{a}^\dagger] \phi_n + \hat{a}^\dagger \hat{H}_\omega \phi_n \\ &= \hbar\omega \hat{a}^\dagger \phi_n + \hat{a}^\dagger E_n \phi_n = (E_n + \hbar\omega) (\hat{a}^\dagger \phi_n)\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}\hat{H}_\omega (\hat{a} \phi_n) &= \hat{H}_\omega \hat{a} \phi_n = [\hat{H}_\omega, \hat{a}] \phi_n + \hat{a} \hat{H}_\omega \phi_n \\ &= -\hbar\omega \hat{a} \phi_n + \hat{a} E_n \phi_n = (E_n - \hbar\omega) (\hat{a} \phi_n).\end{aligned}$$

Problema 3.30 .- Obtener el valor propio E_0 y la función de onda ϕ_0 correspondientes al estado fundamental de un oscilador armónico.

Aplicando la relación obtenida en el problema anterior al estado fundamental tenemos

$$\hat{H}_\omega (\hat{a} \phi_0) = (E_0 - \hbar\omega) \hat{a} \phi_0,$$

de modo que $\hat{a} \phi_0$ sería función propia de \hat{H}_ω con valor propio $E_0 - \hbar\omega < E_0$. ¡Pero no puede haber ninguna energía menor que la del estado fundamental! La única forma de evitar la contradicción es que $\hat{a} \phi_0 = 0$. Teniendo en cuenta la forma explícita del operador \hat{a} en representación de posiciones, $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{X} + i \sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}} \hat{P}_x \right)$, la ecuación $\hat{a} \phi_0 = 0$ se puede reescribir como una ecuación diferencial de primer orden

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d\phi_0(x)}{dx} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x \phi_0(x) = 0,$$

cuya integración es inmediata

$$\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right),$$

donde se ha introducido la constante de normalización apropiada para que $\|\phi_0\| = 1$. Nótese que esta función de onda es una gaussiana que no se anula para ningún x finito, como corresponde a la función de onda de un estado fundamental. Ahora, recordando la expresión de \hat{H}_ω en función de los operadores \hat{a}^\dagger y \hat{a} , tenemos

$$\hat{H}_\omega \phi_0 = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \phi_0 = \hbar\omega \hat{a}^\dagger (\hat{a} \phi_0) + \frac{1}{2} \hbar\omega \phi_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega \phi_0,$$

de modo que $E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$ es la energía del estado fundamental del oscilador.

Problema 3.31 .- Obtener la expresión general para los valores y vectores propios E_n y ϕ_n del oscilador armónico.

Conocemos por el problema anterior ϕ_0 y E_0 . Por otra parte, hemos visto en un problema anterior que $\hat{a}^\dagger \phi_0$ será función propia de \hat{H}_ω con valor propio $E = E_0 + \hbar\omega = (3/2)\hbar\omega$. Ahora bien

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger \phi_0 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{X} - i \sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}} \hat{P}_x \right) \phi_0 \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \phi_0(x) \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x \phi_0 + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x \phi_0 = 2 \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x \phi_0, \end{aligned}$$

donde se ha usado la expresión de $\phi_0(x)$ del problema anterior. Esta función $\hat{a}^\dagger \phi_0$ es impar y tiene un único cero (en $x = 0$). Por lo tanto, debe ser (salvo una constante de normalización) la función propia correspondiente al primer estado excitado; es decir, $\phi_1(x) = A_1 x \phi_0(x)$. Calculando la constante de normalización finalmente obtenemos

$$\phi_1(x) = \left(\frac{2^5}{\pi} \right)^{1/4} \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right)^{3/4} x \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right),$$

a la que corresponde, como hemos visto, el valor propio $E_1 = (3/2)\hbar\omega$.

Asimismo, es fácil ver que una nueva aplicación del operador \hat{a}^\dagger a esta función da lugar a una función par y con dos ceros; es decir $\hat{a}^\dagger \phi_1 = (\hat{a}^\dagger)^2 \phi_0$ debe ser (salvo normalización) la función de onda del segundo estado excitado, correspondiente a una energía $E_2 = E_1 + \hbar\omega = E_0 + 2\hbar\omega = (2 + 1/2)\hbar\omega$. Por el mismo razonamiento general puede verse que $A_n (\hat{a}^\dagger)^n \phi_0$ será la función propia correspondiente al n -ésimo estado, y su valor propio correspondiente será $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$.

La constante de normalización A_n puede calcularse o bien por integración directa o por recurrencia. Este último método es el objeto del problema siguiente.

Problema 3.32 .- Calcular $\hat{a}^\dagger \hat{a} \phi_n$, $\hat{a} \hat{a}^\dagger \phi_n$, $\hat{a}^\dagger \phi_n$ y $\hat{a} \phi_n$.

Teniendo en cuenta que $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$, resulta

$$\hat{H}_\omega \phi_n = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \phi_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \phi_n \Rightarrow \hat{a}^\dagger \hat{a} \phi_n = n \phi_n,$$

de modo que el efecto de aplicar el operador $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ a la función propia ϕ_n del hamiltoniano equivale simplemente a multiplicar dicha función por su número cuántico n . En otras palabras, ϕ_n es función propia de $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ con valor propio n . Por esta razón, al operador $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ se le denomina *operador número*. (Nótese que aunque \hat{a}^\dagger y \hat{a} no sean hermíticos, su producto $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ sí lo es, y por lo tanto sus valores propios son necesariamente reales).

Evidentemente se tiene también $\hat{a} \hat{a}^\dagger \phi_n = [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] \phi_n + \hat{a}^\dagger \hat{a} \phi_n = (n + 1) \phi_n$.

Por otra parte, hemos visto en problemas anteriores que $\phi_{n+1} = A_{n+1} \hat{a}^\dagger \phi_n$. Entonces

$$\begin{aligned} \|\phi_{n+1}\|^2 &= (\phi_{n+1}, \phi_{n+1}) = |A_{n+1}|^2 (\hat{a}^\dagger \phi_n, \hat{a}^\dagger \phi_n) \\ &= |A_{n+1}|^2 (\phi_n, \hat{a} \hat{a}^\dagger \phi_n) = |A_{n+1}|^2 (n + 1) \|\phi_n\|^2 \end{aligned}$$

de modo que $A_{n+1} = (n + 1)^{-1/2}$ si ϕ_n y ϕ_{n+1} están normalizadas. En consecuencia,

$$\phi_{n+1} = (n + 1)^{-1/2} \hat{a}^\dagger \phi_n \quad \text{o} \quad \hat{a}^\dagger \phi_n = \sqrt{n + 1} \phi_{n+1}.$$

Análogamente se demuestra que $\hat{a} \phi_n = \sqrt{n} \phi_{n-1}$.

Así pues, si partimos de un ϕ_0 normalizado, obtenemos

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \hat{a}^\dagger \phi_0 \\ \phi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{a}^\dagger \phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}^\dagger)^2 \phi_0 \\ \phi_3 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{a}^\dagger \phi_2 = \frac{1}{\sqrt{2 \times 3}} (\hat{a}^\dagger)^3 \phi_0 \\ \phi_4 &= \frac{1}{\sqrt{4}} \hat{a}^\dagger \phi_3 = \frac{1}{\sqrt{2 \times 3 \times 4}} (\hat{a}^\dagger)^4 \phi_0 \end{aligned}$$

y en general $\phi_n = (n!)^{-1/2} (\hat{a}^\dagger)^n \phi_0$.

Nota: Naturalmente, el método anterior puede ser algo tedioso si queremos calcular por iteración, a partir de ϕ_0 , las funciones propias ϕ_n para n elevado. Estas funciones propias $\phi_n(x)$ pueden obtenerse también resolviendo directamente la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico. Ésta es una ecuación diferencial de Hermite que puede resolverse por un desarrollo en serie.¹⁷ La solución general explícita puede escribirse de la forma

$$\begin{aligned}\phi_n(x) &= \frac{(-1)^n}{\pi^{1/4}(2^n n!)^{1/2}} \alpha^{(2n-1)/2} \exp(x^2/2\alpha^2) \frac{d^n}{dx^n} \exp(-x^2/\alpha^2) \\ &= \sqrt{\alpha^{-1}} \mathfrak{H}_n(x/\alpha),\end{aligned}$$

donde $\alpha = (\hbar/m\omega)^{1/2}$ es la longitud característica del oscilador, y $\mathfrak{H}_n(x)$ son las funciones de Hermite definidas en la sección 2.6 del capítulo 2.

Problema 3.33 .- A partir de la expresión anterior para las funciones propias de un oscilador armónico

$$\phi_n(x) = \frac{(-1)^n}{\pi^{1/4}(2^n n!)^{1/2}} \alpha^{(2n-1)/2} \exp(x^2/2\alpha^2) \frac{d^n}{dx^n} \exp(-x^2/\alpha^2),$$

donde $\alpha = (\hbar/m\omega)^{1/2}$, verificar explícitamente las relaciones obtenidas en el problema anterior.

Escribiendo el operador y la autofunción ϕ_n explícitamente en representación de coordenadas

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger \phi_n(x) &= \frac{(-1)^n \alpha^{(2n-1)/2}}{\pi^{1/4}(2^{n+1} n!)^{1/2}} \left(\frac{1}{\alpha} x - \alpha \frac{d}{dx} \right) \left[e^{x^2/2\alpha^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2/\alpha^2} \right] \\ &= \frac{(-1)^n \alpha^{(2n-1)/2}}{\pi^{1/4}(2^{n+1} n!)^{1/2}} \left[\frac{x}{\alpha} e^{x^2/2\alpha^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2/\alpha^2} \right] \\ &\quad - \frac{(-1)^n \alpha^{(2n-1)/2}}{\pi^{1/4}(2^{n+1} n!)^{1/2}} e^{x^2/2\alpha^2} \left[\frac{x}{\alpha} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2/\alpha^2} + \alpha \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} e^{-x^2/\alpha^2} \right] \\ &= \frac{(-1)^{n+1} \alpha^{(2n-1)/2}}{\pi^{1/4}(2^{n+1} n!)^{1/2}} \alpha e^{x^2/2\alpha^2} \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} e^{-x^2/\alpha^2} \\ &= \sqrt{n+1} \phi_{n+1}(x).\end{aligned}$$

¹⁷ Véase cualquier libro de ecuaciones diferenciales ordinarias.

Problema 3.34 .- Sea $\{\phi_n\}$ la base constituida por los vectores propios del hamiltoniano del oscilador armónico.

a) Obtener la representación matricial de \hat{a}^\dagger , \hat{a} , \hat{X} y \hat{P}_x en dicha base.

b) Obtener la representación matricial de \hat{X}^2 y \hat{P}_x^2 .

c) Calcular $\langle \hat{X} \rangle$, $\langle \hat{P}_x \rangle$, $\Delta \hat{X}$ y $\Delta \hat{P}_x$ para el n -ésimo estado estacionario de un oscilador armónico y verificar que se satisface el principio de incertidumbre.

a) Aplicando resultados anteriores y la ortogonalidad de los vectores de la base

$$\hat{a}_{rs}^\dagger \equiv (\phi_r, \hat{a}^\dagger \phi_s) = \sqrt{s+1} (\phi_r, \phi_{s+1}) = \sqrt{s+1} \delta_{r,s+1}$$

$$\hat{a}_{rs} \equiv (\phi_r, \hat{a} \phi_s) = \sqrt{s} (\phi_r, \phi_{s-1}) = \sqrt{s} \delta_{r,s-1}$$

$$X_{rs} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a})_{rs} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{s+1} \delta_{r,s+1} + \sqrt{s} \delta_{r,s-1})$$

$$P_{rs} = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a})_{rs} = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\sqrt{s+1} \delta_{r,s+1} - \sqrt{s} \delta_{r,s-1}).$$

Podemos escribir los resultados anteriores en forma matricial

$$(\hat{a}^\dagger) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (\hat{a}) = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$(\hat{X}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$(\hat{P}_x) = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

b) Por la regla de multiplicación de matrices

$$\begin{aligned}
 X_{rs}^2 &= \sum_l X_{rl} X_{ls} \\
 &= \sum_l \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\sqrt{l+1} \delta_{r,l+1} + \sqrt{l} \delta_{r,l-1} \right) \left(\sqrt{s+1} \delta_{l,s+1} + \sqrt{s} \delta_{l,s-1} \right) \\
 &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\sqrt{s(s-1)} \delta_{r,s-2} + (2s+1) \delta_{r,s} + \sqrt{(s+1)(s+2)} \delta_{r,s+2} \right).
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 P_{rs}^2 &= \sum_l P_{rl} P_{ls} \\
 &= -\sum_l \frac{m\omega\hbar}{2} \left(\sqrt{l+1} \delta_{r,l+1} - \sqrt{l} \delta_{r,l-1} \right) \left(\sqrt{s+1} \delta_{l,s+1} - \sqrt{s} \delta_{l,s-1} \right) \\
 &= -\frac{m\omega\hbar}{2} \left(\sqrt{s(s-1)} \delta_{r,s-2} - (2s+1) \delta_{r,s} + \sqrt{(s+1)(s+2)} \delta_{r,s+2} \right).
 \end{aligned}$$

Otra forma de obtener estos resultados es la siguiente:

$$\begin{aligned}
 (\hat{a}^\dagger)_{rs}^2 &= (\phi_r, \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \phi_s) = \sqrt{s+1} (\phi_r, \hat{a}^\dagger \phi_{s+1}) \\
 &= \sqrt{s+1} \sqrt{s+2} (\phi_r, \phi_{s+2}) = \sqrt{(s+1)(s+2)} \delta_{r,s+2} \\
 (\hat{a})_{rs}^2 &= (\phi_r, \hat{a} \hat{a} \phi_s) = \sqrt{s} (\phi_r, \hat{a} \phi_{s-1}) \\
 &= \sqrt{s} \sqrt{s-1} (\phi_r, \phi_{s-2}) = \sqrt{s(s-1)} \delta_{r,s-2}
 \end{aligned}$$

y entonces

$$\begin{aligned}
 X_{rs}^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left((\hat{a}^\dagger + \hat{a}) (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \right)_{rs} \\
 &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left((\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger + (\hat{a})^2 \right)_{rs} \\
 &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\sqrt{s(s-1)} \delta_{r,s-2} + (2s+1) \delta_{r,s} + \sqrt{(s+1)(s+2)} \delta_{r,s+2} \right),
 \end{aligned}$$

y de modo análogo se obtiene P_{rs}^2 .

c) Para $r = s = n$, tenemos

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{X} \rangle_n &= X_{nn} = 0 \\
 \langle \hat{X}^2 \rangle_n &= X_{nn}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+1) = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) \\
 \Delta \hat{X} &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)}.
 \end{aligned}$$

y para el momento lineal

$$\begin{aligned}\langle \hat{P}_x \rangle_n &= P_{nn} = 0 \\ \langle \hat{P}_x^2 \rangle_n &= P_{nn}^2 = \frac{m\omega\hbar}{2} (2n+1) = m\omega\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \\ \Delta \hat{P}_x &= \sqrt{m\omega\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)}.\end{aligned}$$

Por tanto,

$$\Delta \hat{X} \cdot \Delta \hat{P}_x = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \geq \frac{1}{2} \hbar.$$

Problema 3.35 .- Calcular los valores y vectores propios de los operadores \hat{a} y \hat{a}^\dagger .

a) Por resolución directa de la correspondiente ecuación diferencial de primer orden.

b) Como combinación lineal de estados estacionarios del oscilador armónico.

a) Antes de nada hay que tener en cuenta que ni \hat{a} ni \hat{a}^\dagger son operadores hermíticos y, por lo tanto, sus valores propios no tienen por qué ser reales. Entonces, llamando $z \in \mathbb{C}$ a un valor propio de \hat{a} y $\xi_z(x)$ a su vector propio correspondiente, la ecuación que debe satisfacerse es

$$\hat{a}\xi_z(x) = z\xi_z(x) \Rightarrow \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d\xi_z(x)}{dx} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x\xi_z(x) = z\xi_z(x),$$

cuya solución es inmediata

$$\xi_z(x) = A \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} zx \right),$$

siendo A una constante de normalización. Esta solución $\xi_z(x)$ existe para cualquier z complejo, con lo que \hat{a} tiene un espectro continuo que llena todo el campo complejo. Nótese que si $z = z_0$ es real, la función $\xi_{z_0}(x)$ es una función gaussiana centrada en $x_0 = z_0 \sqrt{2\hbar/m\omega}$ y anchura $\Delta x = \sqrt{2\hbar/m\omega}$.

Por otra parte, llamemos z_+ a un posible valor propio del operador \hat{a}^\dagger y sea $\xi_z^+(x)$ su función propia correspondiente. Entonces

$$\hat{a}^\dagger \xi_z^+(x) = z_+ \xi_z^+(x) \Rightarrow \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d\xi_z^+(x)}{dx} - \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x \xi_z^+(x) = z_+ \xi_z^+(x),$$

con solución

$$\xi_z^+(x) = A \exp \left(\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} z_+ x \right).$$

Esta función no sólo no es integrable sino que se hace infinita para $x \rightarrow \pm\infty$. Así pues, el operador \hat{a}^\dagger no tiene funciones propias dentro del espacio de Hilbert.

b) Escribamos $\xi_z(x)$ como combinación lineal de las funciones propias ϕ_n del hamiltoniano del oscilador; es decir

$$\xi_z(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \phi_n(x) \quad \text{con} \quad \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = 1.$$

Para que sea autofunción de \hat{a} con autovalor z se ha de cumplir que $\hat{a}\xi_z(x) = z\xi_z(x)$, por lo tanto,

$$\hat{a} \sum_{n=0}^{\infty} c_n \phi_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \hat{a} \phi_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{n} c_n \phi_{n-1}(x) = z \sum_{n=0}^{\infty} c_n \phi_n(x).$$

Cambiando los índices del penúltimo sumatorio tendremos la igualdad

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n+1} c_{n+1} \phi_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} z c_n \phi_n(x).$$

Pero si dos vectores son iguales, deben coincidir sus coordenadas. Como consecuencia

$$\sqrt{n+1} c_{n+1} = z c_n; \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

o bien

$$c_{n+1} = \frac{z}{\sqrt{n+1}} c_n \Rightarrow c_n = \frac{z}{\sqrt{n}} c_{n-1},$$

que nos da una ley de recurrencia para las coordenadas del autovector. Evidentemente $c_0 \neq 0$ puesto que de lo contrario todos los índices serían nulos. Así

$$c_1 = \frac{z}{\sqrt{1}} c_0, \quad c_2 = \frac{z^2}{\sqrt{2 \times 1}} c_0, \quad c_3 = \frac{z^3}{\sqrt{3 \times 2 \times 1}} c_0$$

y, en general,

$$c_n = \frac{z^n}{\sqrt{n!}} c_0.$$

Imponiendo la condición de normalización de $\xi_z(x)$ obtenemos el valor de c_0 :

$$\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad 1 = |c_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|z|^{2n}}{n!} = |c_0|^2 \exp(|z|^2).$$

En definitiva, un autovector normalizado de \hat{a} con autovalor z tiene la forma

$$\xi_z(x) = \exp(-|z|^2/2) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \phi_n(x),$$

y la serie converge para cualquier valor de z real o complejo. Así, obtenemos de nuevo que el espectro del operador \hat{a} es continuo y llena el campo complejo. (Nótese también que $\xi_0(x) = \phi_0(x)$). A los autovectores de \hat{a} se les denomina *estados coherentes*.

Si $\xi_z^+(x)$ es autovector normalizado de \hat{a}^\dagger con autovalor z_+ y lo escribimos en la base de las funciones propias ϕ_n

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger \xi_z^+(x) &= z_+ \xi_z^+(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \hat{a}^\dagger \phi_n(x) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n+1} c_n \phi_{n+1}(x) = z_+ \sum_{n=0}^{\infty} c_n \phi_n(x). \end{aligned}$$

Por tanto,

$$\sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{n} c_{n-1} \phi_n(x) = z_+ \sum_{n=0}^{\infty} c_n \phi_n(x)$$

que nunca se cumple a no ser que $c_0 = c_1 = \dots = 0$. Por tanto, llegamos de nuevo a la conclusión de que no hay funciones propias (normalizables) del operador \hat{a}^\dagger . ¡Nótese, como se ve en este caso, que los autovalores de un operador no tienen por qué ser los complejos conjugados de los de su adjunto!

Problema 3.36 .- Obtener la evolución temporal de los valores medios $\langle \hat{a}^\dagger \rangle$ y $\langle \hat{a} \rangle$.

A partir de la ecuación para la evolución temporal de los valores medios, obtenemos

$$\frac{d\langle \hat{a}^\dagger \rangle_t}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}_\omega, \hat{a}^\dagger] \rangle = i\omega \langle \hat{a}^\dagger \rangle_t \quad \Rightarrow \quad \langle \hat{a}^\dagger \rangle_t = \langle \hat{a}^\dagger \rangle_0 \exp(+i\omega t)$$

y, análogamente,

$$\frac{d\langle\hat{a}\rangle_t}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}_\omega, \hat{a}] \rangle = -i\omega \langle\hat{a}\rangle_t \Rightarrow \langle\hat{a}\rangle_t = \langle\hat{a}\rangle_0 \exp(-i\omega t).$$

Problema 3.37 .- Obtener la expresión explícita para $\langle\hat{X}\rangle_t$ y $\langle\hat{P}_x\rangle_t$ para un oscilador armónico.

a) Por aplicación directa del teorema de Ehrenfest.

b) A partir de $\langle\hat{a}^\dagger\rangle_t$ y $\langle\hat{a}\rangle_t$.

a) Por la primera ecuación de Ehrenfest

$$\frac{d\langle\hat{X}\rangle_t}{dt} = \frac{\langle\hat{P}_x\rangle_t}{m}.$$

Derivando una vez más con respecto a t

$$\frac{d^2\langle\hat{X}\rangle_t}{dt^2} = \frac{1}{m} \frac{d\langle\hat{P}_x\rangle_t}{dt} = -\omega^2 \langle\hat{X}\rangle_t,$$

e integrando,

$$\langle\hat{X}\rangle_t = \langle\hat{X}\rangle_0 \cos \omega t + \frac{\langle\hat{P}_x\rangle_0}{m\omega} \sin \omega t.$$

Análogamente, utilizando la segunda ecuación de Ehrenfest,

$$\frac{d\langle\hat{P}_x\rangle_t}{dt} = - \left\langle \frac{d(\frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2)}{d\hat{X}} \right\rangle = -m\omega^2 \langle\hat{X}\rangle_t$$

obtenemos

$$\frac{d^2\langle\hat{P}_x\rangle_t}{dt^2} = -m\omega^2 \frac{d\langle\hat{X}\rangle_t}{dt} = -\omega^2 \langle\hat{P}_x\rangle_t,$$

de donde se integra la evolución temporal de $\langle\hat{P}_x\rangle_t$:

$$\langle\hat{P}_x\rangle_t = \langle\hat{P}_x\rangle_0 \cos \omega t + m\omega \langle\hat{X}\rangle_0 \sin \omega t.$$

b) Escribiendo \hat{X} y \hat{P}_x en función de \hat{a}^\dagger y \hat{a}

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{X} \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \hat{a}^\dagger + \hat{a} \rangle \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\langle \hat{a}^\dagger \rangle_0 \exp(+i\omega t) + \langle \hat{a} \rangle_0 \exp(-i\omega t) \right) \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\langle \hat{a}^\dagger \rangle_0 + \langle \hat{a} \rangle_0 \right) \cos \omega t + i \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\langle \hat{a}^\dagger \rangle_0 - \langle \hat{a} \rangle_0 \right) \sin \omega t \\
 &= \langle \hat{X} \rangle_0 \cos \omega t + \frac{\langle \hat{P}_x \rangle_0}{m\omega} \sin \omega t.
 \end{aligned}$$

De modo parecido se obtiene $\langle \hat{P}_x \rangle_t$.

Problema 3.38 .- Un oscilador armónico cuántico de frecuencia ω se encuentra inicialmente en un estado coherente

$$\Psi(x, 0) = \xi_z(x) = e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \phi_n(x) \quad \text{con } z \in \mathbb{R}^+.$$

a) Calcular la función de onda $\Psi(x, t)$ en cualquier instante posterior y demostrar que es una función propia de \hat{a} .

b) A partir del resultado anterior, obtener $\langle \hat{X} \rangle_t$ y $(\Delta \hat{X})_t$.

c) Calcular $\langle \hat{H} \rangle_t$ y $(\Delta \hat{H})_t$.

a) Ya hemos visto en un problema anterior que el estado $\xi_z(x)$ es autoestado de \hat{a} con valor propio z . Ahora, teniendo en cuenta que los valores de la energía para el oscilador son $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$, el estado del oscilador en un instante t será

$$\begin{aligned}
 \Psi(x, t) &= e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \phi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \\
 &= e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \phi_n(x) e^{-in\omega t} e^{-i\omega t/2},
 \end{aligned}$$

que también puede escribirse

$$\Psi(x, t) = e^{-i\omega t/2} e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ze^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} \phi_n(x) \equiv \xi_{z(t)}(x),$$

donde hemos llamado $z(t) \equiv ze^{-i\omega t}$. Es decir, $\Psi(x, t) \equiv \xi_{z(t)}(x)$ es función propia de \hat{a} con valor propio $ze^{-i\omega t}$.

(b) Por el resultado anterior

$$\langle \hat{a} \rangle_t = \left(\xi_{z(t)}, \hat{a} \xi_{z(t)} \right) = \left(\xi_{z(t)}, z(t) \xi_{z(t)} \right) = z(t) \left(\xi_{z(t)}, \xi_{z(t)} \right) = z(t)$$

$$\langle \hat{a}^\dagger \rangle_t = \left(\xi_{z(t)}, \hat{a}^\dagger \xi_{z(t)} \right) = \left(\hat{a} \xi_{z(t)}, \xi_{z(t)} \right) = z^*(t) \left(\xi_{z(t)}, \xi_{z(t)} \right) = z^*(t)$$

$$\langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle_t = \left(\xi_{z(t)}, \hat{a}^\dagger \hat{a} \xi_{z(t)} \right) = \left(\hat{a} \xi_{z(t)}, \hat{a} \xi_{z(t)} \right) = |z(t)|^2 \left(\xi_{z(t)}, \xi_{z(t)} \right) = |z(t)|^2$$

$$\langle \hat{a} \hat{a}^\dagger \rangle_t = \left\langle \left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger \right] + \hat{a}^\dagger \hat{a} \right\rangle_t = 1 + |z(t)|^2.$$

Por tanto,

$$\langle \hat{X} \rangle_t = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \hat{a}^\dagger + \hat{a} \rangle_t = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (z^*(t) + z(t)) = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} z \cos \omega t.$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{X}^2 \rangle_t &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left\langle (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \right\rangle_t = \frac{\hbar}{2m\omega} \left\langle (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^2 \right\rangle_t \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left((z^*(t))^2 + 1 + 2|z(t)|^2 + (z(t))^2 \right) \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} (1 + 4z^2 \cos^2 \omega t) = \frac{\hbar}{2m\omega} + \langle \hat{X} \rangle_t^2. \end{aligned}$$

Entonces

$$(\Delta \hat{X})_t = \sqrt{\langle \hat{X}^2 \rangle_t - \langle \hat{X} \rangle_t^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}.$$

Así, pues, el valor esperado de la posición oscila en el tiempo con frecuencia ω pero la desviación típica permanece constante en el tiempo. La forma de la función de onda $\xi_{z(t)}(x)$ es una gaussiana y se desplaza como un todo sin cambiar su forma.

(c) Evidentemente, basta con calcular $\langle \hat{H}_\omega \rangle$ y $\Delta \hat{H}$ para $t = 0$, ya que la energía es una constante del movimiento. Entonces

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}_\omega \rangle &= \left(\xi_z, \hat{H}_\omega \xi_z \right) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} (\xi_z, \xi_z) + \hbar\omega \left(\xi_z, \hat{a}^\dagger \hat{a} \xi_z \right) = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + |z|^2 \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{H}_\omega^2 \rangle &= (\xi_z, \hat{H}_\omega^2 \xi_z) = (\hat{H}_\omega \xi_z, \hat{H}_\omega \xi_z) \\
 &= \hbar^2 \omega^2 (\hat{a}^\dagger \hat{a} \xi_z, \hat{a}^\dagger \hat{a} \xi_z) + \frac{\hbar^2 \omega^2}{4} (\xi_z, \xi_z) \\
 &\quad + \frac{\hbar^2 \omega^2}{2} (\xi_z, \hat{a}^\dagger \hat{a} \xi_z) + \frac{\hbar^2 \omega^2}{2} (\hat{a}^\dagger \hat{a} \xi_z, \xi_z).
 \end{aligned}$$

Pero

$$(\hat{a}^\dagger \hat{a} \xi_z, \hat{a}^\dagger \hat{a} \xi_z) = |z|^2 (\hat{a}^\dagger \xi_z, \hat{a}^\dagger \xi_z) = |z|^2 (\xi_z, \hat{a} \hat{a}^\dagger \xi_z) = |z|^2 (|z|^2 + 1),$$

de modo que

$$\langle \hat{H}_\omega^2 \rangle = \hbar^2 \omega^2 \left(|z|^4 + 2|z|^2 + \frac{3}{4} \right)$$

y finalmente

$$\Delta \hat{H} = \sqrt{\langle \hat{H}_\omega^2 \rangle - \langle \hat{H}_\omega \rangle^2} = \hbar \omega \sqrt{|z|^2 + \frac{1}{2}}.$$

Nota: En este problema hemos considerado que el parámetro z que define el estado coherente es real y positivo. Los resultados pueden generalizarse a cualquier valor complejo $z = |z| e^{i\delta}$. En este caso, es fácil ver que el argumento del número complejo se transforma en una simple fase en todas las dependencias temporales armónicas.

Problema 3.39 .- Obtener la ecuación para la evolución temporal del estado cuántico de un oscilador armónico en la representación de momentos a partir de la ecuación correspondiente en el espacio de posiciones.

La evolución en el espacio de posiciones obedece a la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t},$$

que se obtiene a partir del hamiltoniano clásico y la asignación estándar $x \rightarrow \hat{X} = x$ y $p \rightarrow \hat{P}_x = -i\hbar \partial / \partial x$. Multiplicando la ecuación anterior por $\exp(-ipx/\hbar)$ e integrando, obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \exp(-ipx/\hbar) dx + \frac{1}{2} m \omega^2 \int x^2 \Psi(x, t) \exp(-ipx/\hbar) dx =$$

$$= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int \Psi(x, t) \exp(-ipx/\hbar) dx.$$

Veamos qué representan cada uno de los términos de esta ecuación. Integrando por partes el primer sumando y suponiendo que $\Psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$

$$\begin{aligned} & \int \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} e^{-ipx/\hbar} dx = \\ &= \left[\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \exp(-ipx/\hbar) \right]_{-\infty}^{+\infty} + \frac{ip}{\hbar} \int \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \exp(-ipx/\hbar) dx \\ &= \frac{ip}{\hbar} \Psi(x, t) \exp(-ipx/\hbar) \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \left(\frac{ip}{\hbar} \right)^2 \int \Psi(x, t) \exp(-ipx/\hbar) dx \\ &= -\frac{p^2}{\hbar^2} \int \Psi(x, t) \exp(-ipx/\hbar) dx. \end{aligned}$$

Por otra parte, la integral del segundo sumando es

$$\begin{aligned} \int x^2 \Psi(x, t) e^{-ipx/\hbar} dx &= \int \Psi(x, t) \left[-\hbar^2 \frac{\partial^2 \exp(-ipx/\hbar)}{\partial p^2} \right] dx \\ &= -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial p^2} \int \Psi(x, t) \exp(-ipx/\hbar) dx \\ &= -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial p^2} \tilde{\Psi}(p, t). \end{aligned}$$

donde

$$\tilde{\Psi}(p, t) = \int \Psi(x, t) \exp(-ipx/\hbar) dx$$

es la transformada de Fourier de la función $\Psi(x, t)$. En resumen, la ecuación se puede escribir como

$$\frac{1}{2m} p^2 \tilde{\Psi}(p, t) - \frac{1}{2} m \omega^2 \hbar^2 \frac{\partial^2 \tilde{\Psi}(p, t)}{\partial p^2} = i\hbar \frac{\partial \tilde{\Psi}(p, t)}{\partial t},$$

que es la ecuación que buscábamos.

A este mismo resultado habríamos llegado a partir del hamiltoniano clásico y la asignación $x \rightarrow \hat{X} = i\hbar \partial/\partial p$ y $p \rightarrow \hat{P}_x = p$.

Nótese que, en este caso concreto de un oscilador armónico, las ecuaciones para $\Psi(x, t)$ y $\tilde{\Psi}(p, t)$ tienen, en esencia, la misma forma. Por lo tanto, todos los resultados que obtengamos en una representación se pueden traducir directamente a la otra.

Problema 3.40 .- Un oscilador armónico de masa m se encuentra inicialmente en un estado dado por la función de onda

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_0(x) + \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1(x),$$

siendo $\phi_0(x)$ las función propia del estado fundamental y $\phi_1(x)$ la del primer estado excitado del oscilador. ¿Cuál es la probabilidad de encontrar el valor p en una medida del momento? ¿Cuál es el valor p más probable? ¿Cuál es el valor esperado $\langle \hat{P}_x \rangle$?

Sabemos que $\phi_n(x) = \sqrt{\alpha^{-1}}\mathfrak{H}_n(x/\alpha)$, donde \mathfrak{H}_n es la n -ésima función de Hermite y α la longitud característica del oscilador. En concreto,

$$\mathfrak{H}_0(u) = \frac{1}{\pi^{1/4}}e^{-u^2/2}, \quad \mathfrak{H}_1(u) = \frac{\sqrt{2}u}{\pi^{1/4}}e^{-u^2/2} = \sqrt{2}u\mathfrak{H}_0(u).$$

De esta forma

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \left(1 + \sqrt{2}\frac{x}{\alpha} \right) \mathfrak{H}_0\left(\frac{x}{\alpha}\right),$$

y su forma de Fourier será

$$\tilde{\Psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \left(1 + \sqrt{2}\frac{x}{\alpha} \right) \mathfrak{H}_0\left(\frac{x}{\alpha}\right) \exp\left(-i\frac{px}{\hbar}\right) dx.$$

Haciendo el cambio de variable $u = x/\alpha$ y $q = p\alpha/\hbar$ nos queda

$$\tilde{\Psi}(p) = \tilde{\chi}(q) = \sqrt{\frac{\alpha}{4\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(1 + \sqrt{2}u \right) \mathfrak{H}_0(u) \exp(-iqu) du$$

y sustituyendo

$$\tilde{\chi}(q) = \frac{1}{2\pi^{3/4}} \sqrt{\frac{\alpha}{\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(1 + \sqrt{2}u \right) e^{-u^2/2} \exp(-iqu) du.$$

Ya que $\exp(-iqu) = \cos(qu) + i \sin(qu)$, y teniendo en cuenta la paridad del integrando, obtenemos

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}(q) &= \frac{1}{\pi^{3/4}} \sqrt{\frac{\alpha}{\hbar}} \int_0^{+\infty} e^{-u^2/2} \cos(qu) du \\ &\quad + \frac{i}{\pi^{3/4}} \sqrt{\frac{2\alpha}{\hbar}} \int_0^{+\infty} u e^{-u^2/2} \sin(qu) du. \end{aligned}$$

Las dos integrales son

$$\begin{aligned}\int_0^{+\infty} e^{-u^2/2} \cos(qu) du &= \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-q^2/2} \\ \int_0^{+\infty} u e^{-u^2/2} \sin(qu) du &= -\frac{d}{dq} \int_0^{+\infty} e^{-u^2/2} \cos(qu) du = \sqrt{\frac{\pi}{2}} q e^{-q^2/2},\end{aligned}$$

por lo que

$$\tilde{\chi}(q) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \sqrt{\frac{\alpha}{2\hbar}} (1 + i\sqrt{2}q) e^{-q^2/2}$$

y así

$$|\tilde{\chi}(q)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\alpha}{2\hbar} (1 + 2q^2) e^{-q^2}.$$

Deshaciendo los cambios de variable, la distribución de probabilidad asociada a una medida del momento es

$$|\tilde{\Psi}(p)|^2 = \frac{\alpha}{2\hbar\sqrt{\pi}} \left(1 + 2\frac{\alpha^2 p^2}{\hbar^2}\right) \exp\left(-\frac{\alpha^2 p^2}{\hbar^2}\right).$$

Esta distribución alcanza su máximo valor (medida más probable) en aquel valor p_{\max} que anule su primera derivada. Dicho valor es

$$p_{\max} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{\alpha}.$$

Por último $\langle \hat{P}_x \rangle = 0$. Esto se puede ver directamente atendiendo a que la distribución $|\tilde{\Psi}(p)|^2$ es una función par. Otra manera de comprobarlo es darse cuenta de que $\Psi(x, 0)$ es una función real. Nótese que la medida más probable no coincide con el valor medio de la medida.

Problema 3.41 .- Una partícula de masa m sometida a un potencial armónico $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$ viene descrita en el instante $t = 0$ por la función de onda

$$\Psi(x, 0) = A \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^n \phi_n(x),$$

siendo $\phi_n(x)$ la n -ésima función propia normalizada del oscilador armónico correspondiente al estado de energía $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$.

- a) Calcular la constante de normalización A .
 b) Escribir la expresión de $\Psi(x, t)$ para todo instante $t > 0$.
 c) Demostrar que $|\Psi(x, t)|^2$ es una función periódica en el tiempo y calcular su periodo.
 d) Calcular el valor esperado $\langle E \rangle$ de la energía de la partícula.

a) La constante A se obtiene de la condición de normalización

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, 0) \Psi(x, 0) dx.$$

Como $\Psi(x, 0)$ está escrito como una combinación lineal (infinita) de los autoestados de la energía del oscilador

$$1 = |A|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^{2n} = |A|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n}.$$

La suma que aparece es la suma de una progresión geométrica infinita de razón $r = 1/2$, cuyo resultado $(1 - r)^{-1}$ es bien conocido. Así,

$$1 = |A|^2 \frac{1}{1 - \frac{1}{2}} = 2A^2 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

b) La expresión de $\Psi(x, t)$ es inmediata:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^n \phi_n(x) \exp(-iE_n t / \hbar),$$

y recordando que $E_n = (n + 1/2) \hbar \omega$

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^n \phi_n(x) \exp \left(-i\omega t \left(n + \frac{1}{2} \right) \right) \\ &= \frac{e^{-i\omega t/2}}{\sqrt{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{2}} \right)^n \phi_n(x). \end{aligned}$$

c) De la evolución temporal de las funciones propias

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{e^{i\omega t}}{\sqrt{2}} \right)^n \phi_n(x) \right] \left[\sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{2}} \right)^m \phi_m(x) \right]$$

(recuérdese que las funciones propias del oscilador son reales). Así,

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} \sum_{n,m} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^{n+m} \phi_n(x) \phi_m(x) \exp(i\omega(n - m)t).$$

En esta suma, por cada término n , m hay un correspondiente m, n ; por tanto, reuniendo estos términos dos a dos la suma queda

$$|\Psi(x, t)|^2 = \sum_{n>m} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^{n+m} \phi_n(x) \phi_m(x) \cos[(m-n)\omega t],$$

quedando así de manifiesto que la densidad de probabilidad es real. Toda la dependencia temporal está incluida en los cosenos que aparecen en todos los términos del sumatorio. Estos factores son de la forma $\cos K\omega t$ donde K es un número natural. Cada término del sumatorio tiene un periodo

$$T_K = \frac{2\pi}{\omega} \frac{1}{K}$$

y, por tanto, $T = 2\pi/\omega$ será un periodo común de todos ellos y la densidad de probabilidad oscila con la frecuencia del oscilador ω .

d) El valor esperado de la energía, naturalmente independiente del tiempo, es inmediato:

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \left| \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^n \right|^2 E_n = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2} \right)^n \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega.$$

Si separamos términos

$$\frac{\langle \hat{H} \rangle}{\hbar \omega} = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2} \right)^n n + \frac{1}{4} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2} \right)^n = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n}{2^n} + \frac{1}{2},$$

puesto que el segundo sumatorio ya lo hemos calculado anteriormente. En cuanto al primero hay varias formas de calcularlo. Veamos una muy general.

Consideremos el sumatorio

$$s(A) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n}{A^n} \quad ; \quad A > 1.$$

Evidentemente,

$$\begin{aligned} s(A) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n}{A^n} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n-1}{A^n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{A^n} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n-1}{A^n} + \frac{1}{1 - (1/A)} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n-1}{A^n} + \frac{A}{A-1}, \end{aligned}$$

y, formalmente, podemos escribir

$$\begin{aligned}\int s(A) dA &= \int \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{n-1}{A^n} \right) dA + \int \frac{A}{A-1} dA \\ &= \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \int \frac{(n-1) dA}{A^n} \right\} + \int \frac{A}{A-1} dA.\end{aligned}$$

Efectuando la primera primitiva,

$$\begin{aligned}\int s(A) dA &= \left\{ -A \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{A^n} \right\} + \int \frac{A}{A-1} dA \\ &= -\frac{A^2}{A-1} + \int \frac{A}{A-1} dA.\end{aligned}$$

Por tanto,

$$\begin{aligned}s(A) &= \frac{d}{dA} \left\{ -\frac{A^2}{A-1} + \int \frac{A}{A-1} dA \right\} \\ &= \frac{A}{A-1} - \frac{d}{dA} \left(\frac{A^2}{A-1} \right) = \frac{A}{(A-1)^2}.\end{aligned}$$

En nuestro caso $s(2) = 2$, por lo que nos queda finalmente

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{3}{2} \hbar \omega.$$

Problema 3.42 .- Hallar las funciones propias y valores propios de la energía para un oscilador armónico truncado cuyo potencial es

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ \frac{1}{2} k x^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 & x > 0. \end{cases}$$

La función de onda en la región $x < 0$ es idénticamente nula. Por otro lado, en la región $x > 0$ la función de onda de energía E ha de verificar la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo de un oscilador armónico de frecuencia ω . Las únicas soluciones acotadas son, precisamente, las autofunciones $\sqrt{\alpha^{-1}} \mathfrak{H}_n(x/\alpha)$ del oscilador armónico *completo*, donde $\mathfrak{H}_n(u)$ es la n -ésima función de Hermite y α la longitud característica del oscilador. Ahora

bien, por continuidad en $x = 0$, sólo son admisibles las soluciones con n impar, pues se anulan en dicho punto. En definitiva, los niveles de energía son

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

(esto es, los niveles energéticos impares del oscilador armónico completo) y las autofunciones correspondientes

$$\phi_n(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ \sqrt{2/\alpha} \mathfrak{H}_{2n+1}(x/\alpha) & x > 0, \end{cases}$$

donde el prefactor $\sqrt{2}$ se incluye a efectos de normalización.

3.18.5 Reflexión y transmisión por escalones y barreras cuadradas.

Problema 3.43 .- Sea un potencial escalón de altura V_0 (esto es, el potencial es igual a 0 si $x < 0$ e igual a V_0 si $x > 0$). Calcular la función de onda de los estados estacionarios de dicho potencial correspondientes a valores de la energía $E < V_0$. Interpretar físicamente estas funciones de onda.

La ecuación de Schrödinger estacionaria para este potencial puede escribirse en la forma

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V_0\theta(x) - E] \psi(x),$$

siendo $\theta(x)$ la función escalón de Heaviside (es decir, $\theta(x) = 0$ si $x < 0$; $\theta(x) = 1$ si $x > 0$). La solución general de la ecuación para $E < V_0$ es

$$\psi_E(x) = \begin{cases} A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) & \text{si } x \leq 0 \\ C \exp(-qx) + D \exp(qx) & \text{si } x \geq 0, \end{cases}$$

con $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ y $q = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$. Sin embargo, es evidente que D debe ser nula pues de lo contrario la función tomaría un valor infinito para $x \rightarrow \infty$. Por otra parte, puesto que no hay discontinuidades infinitas de potencial, la función $\psi_E(x)$ y su derivada primera deben ser continuas en toda la recta real, y en particular en $x = 0$. Imponiendo estas condiciones de “empalme”, obtenemos

$$\psi_E(x = 0^-) = \psi_E(x = 0^+) \Rightarrow A + B = C$$

$$\psi'_E(x=0^-) = \psi'_E(x=0^+) \Rightarrow ik(A-B) = -qC.$$

Tenemos así dos ecuaciones para calcular las tres constantes A , B y C . Puesto que las funciones no son normalizables, una de estas constantes (por ejemplo, la A) es arbitraria, y lo realmente importantes son los dos cocientes B/A , C/A . En definitiva, tenemos dos ecuaciones para determinar estos dos cocientes, y esto da una solución única para cada valor de la energía E : el espectro es no degenerado. La solución del sistema es

$$\frac{B}{A} = \frac{1 - iq/k}{1 + iq/k} = \frac{\sqrt{E} - i\sqrt{V_0 - E}}{\sqrt{E} + i\sqrt{V_0 - E}}$$

$$\frac{C}{A} = \frac{2}{1 + iq/k} = \frac{2}{\sqrt{E} + i\sqrt{V_0 - E}}.$$

En resumen, la función de onda en la región $x < 0$ consta de dos componentes superpuestas: una onda plana incidente $A \exp(ikx)$ y una onda plana reflejada $B \exp(-ikx)$, de igual intensidad que la incidente puesto que es inmediato ver que $|B/A| = 1$. En la región $x > 0$ la función de onda es una onda penetrante cuya amplitud se amortigua a medida que x aumenta.

Podríamos estar tentados a interpretar esta función como la función de onda que describe a una partícula que incide por la izquierda sobre el escalón y penetra ligeramente en éste. Pero la función de onda de una partícula en movimiento debería ser un paquete normalizado y localizado cuyo centro se desplaza con el tiempo. Sin embargo, en este problema estamos tratando con una función no normalizable y, además, estacionaria: no hay aquí nada que dependa del tiempo.

Una interpretación más correcta es la siguiente. Imaginemos que desde la izquierda llega un haz poco intenso de partículas de masa m con momento $p = \sqrt{2mE}$ bastante bien definido. (Decimos que el haz es poco denso para que no haya interacción entre las partículas del mismo). Una vez que el haz es reflejado por el escalón y se alcanza el régimen estacionario (esto es, una vez que tengamos un flujo continuo de partículas incidentes y el correspondiente flujo de partículas reflejadas), el estado cuántico de cada partícula del haz es muy aproximadamente el dado por $\psi_E(x)$. Entonces $|\psi_E(x)|^2 dx$ será proporcional a la densidad (número de partículas por unidad de longitud) del haz en el intervalo $[x, x + dx]$.

Nótese que la función de onda para $x < 0$ puede escribirse alternativamente en la forma

$$\psi_E(x < 0) \propto \cos(kx) - (q/k) \sin(kx) = F \cos(kx + \delta),$$

con $\delta = \arctan(q/k)$, que es una onda estacionaria cuyo valor varía periódicamente en el espacio. Por consiguiente, la densidad del haz también varía con periodo espacial $l = 2\pi/k$. Éste es un fenómeno de interferencia cuántica entre la componente $\psi_{\text{inc}}(x) = A \exp(ikx)$, que puede interpretarse como la función de onda de un haz incidente monoenergético, y la componente $\psi_{\text{ref}}(x) = B \exp(-ikx)$, que correspondería a un haz reflejado. Puesto que ambos haces tienen la misma amplitud (en módulo), su interferencia da lugar a la onda estacionaria $F \cos(kx + \delta)$, que es esencialmente real (como ya sabemos, siempre podemos multiplicar la función de ondas por una constante de módulo unidad de tal manera que la constante F sea real).

La corriente de probabilidad del haz incidente es

$$J_{\text{inc}} = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi_{\text{inc}}(x) \frac{d\psi_{\text{inc}}^*(x)}{dx} - \psi_{\text{inc}}^*(x) \frac{d\psi_{\text{inc}}(x)}{dx} \right) = \frac{\hbar k}{m} |A|^2$$

y, análogamente, la correspondiente al haz reflejado es

$$J_{\text{ref}} = -\frac{\hbar k}{m} |B|^2$$

Puesto que hemos visto que $|B| = |A|$, la corriente de probabilidad total a la izquierda del escalón es $J_{\text{inc}} + J_{\text{ref}} = 0$, como corresponde a una función de onda total esencialmente real.

La función de onda a la derecha del escalón (es decir, para $x > 0$) también es esencialmente real y la corriente de probabilidad es también nula. Esto es obligado, pues, en un problema estacionario, J no puede depender de x . En efecto, en un caso estacionario $\partial \rho(x)/\partial t = 0$ y la ecuación de continuidad implica entonces $dJ(x)/dx = 0$. Por otra parte, existe una cierta probabilidad de encontrar partículas dentro del escalón; es decir, un detector situado en un punto $x > 0$ podría detectar ocasionalmente alguna partícula. No obstante, en el momento que la detectásemos, la función de onda colapsaría y desaparecería la interferencia entre el haz incidente y el reflejado.

Problema 3.44 .- Calcular e interpretar las funciones de onda estacionarias para el mismo potencial escalón del problema anterior, pero para $E > V_0$.

En este caso, la solución para $x > 0$ ya no es una suma de exponenciales reales sino una combinación de ondas planas

$$\psi_E(x) = \begin{cases} A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) & \text{si } x \leq 0 \\ C \exp(iqx) + D \exp(-iqx) & \text{si } x \geq 0, \end{cases}$$

siendo en este caso $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ y $q = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$. Matemáticamente no hay ahora ninguna razón para eliminar *a priori* cualquiera de las constantes que aquí aparecen, puesto que la función se mantiene siempre finita. No obstante, al imponer ahora las condiciones de empalme obtendríamos un sistema de dos ecuaciones para calcular tres cocientes B/A , C/A y D/A . Existe así una indeterminación y la solución no es única para cada E . Esto corresponde al hecho de que el autovalor E es doblemente degenerado. Así, de entre todas las soluciones del sistema podremos escoger dos linealmente independientes, y todas las demás serán combinaciones lineales de ellas.

Estas dos funciones independientes pueden escogerse imponiendo ciertas condiciones asintóticas que tienen su reflejo en la interpretación física. Si, como antes, interpretamos las ondas planas $\exp(ikx)$ y $\exp(-ikx)$ como ondas que viajan hacia la derecha y hacia la izquierda, respectivamente, parece que para $x > 0$ no debería haber ninguna onda viajando hacia la izquierda, pues no hay nada en el infinito que refleje las partículas. Por consiguiente, suponemos que si las partículas inciden sobre el escalón desde la izquierda, tendremos ondas que viajan hacia la derecha (incidente) y hacia la izquierda (reflejada) para $x < 0$, pero sólo tendremos una onda que viaja hacia la derecha (transmitida) para $x > 0$. En definitiva, esto supone que $D = 0$ y A , B y C son distintas de cero.¹⁸

En resumen, haciendo $D = 0$, las condiciones de empalme en $x = 0$ son ahora

$$\psi_E(x = 0^-) = \psi_E(x = 0^+) \Rightarrow A + B = C$$

$$\psi'_E(x = 0^-) = \psi'_E(x = 0^+) \Rightarrow ik(A - B) = iqC,$$

y así

$$\frac{B}{A} = \frac{k - q}{k + q} = \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}}, \quad \frac{C}{A} = \frac{2k}{k + q} = \frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}}.$$

¹⁸ Alternativamente, podríamos considerar el caso de un haz de partículas que proceden desde la derecha del escalón. Entonces tendríamos onda incidente y reflejada para $x > 0$ (la discontinuidad del escalón refleja parte de la onda a pesar de que $E > V_0$) y sólo una onda transmitida hacia la izquierda para $x < 0$. Es decir, tendríamos $A = 0$ y B , C y D distintas de cero.

Nótese que ahora $|B/A| < 1$ y la intensidad del haz reflejado es menor que la del haz incidente. Por lo tanto, su interferencia no puede dar lugar a una onda puramente estacionaria y real. Así pues, habrá una corriente neta de probabilidad. El cociente entre las corrientes de probabilidad reflejada e incidente es el **coeficiente de reflexión** \mathcal{R} ,

$$\mathcal{R} = \left| \frac{J_{\text{ref}}}{J_{\text{inc}}} \right| = \frac{(\hbar k/m) |B|^2}{(\hbar k/m) |A|^2} = \left| \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}} \right|^2.$$

Análogamente, el cociente entre la corriente de probabilidad transmitida e incidente es el **coeficiente de transmisión** \mathcal{T}

$$\mathcal{T} = \left| \frac{J_{\text{tr}}}{J_{\text{inc}}} \right| = \frac{(\hbar q/m) |C|^2}{(\hbar k/m) |A|^2} = \frac{\sqrt{E - V_0}}{\sqrt{E}} \left| \frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}} \right|^2.$$

Nótese que

$$\mathcal{R} + \mathcal{T} = \left| \frac{B}{A} \right|^2 + \frac{q}{k} \left| \frac{C}{A} \right|^2 = 1.$$

Problema 3.45 .- Una partícula de masa m se mueve a lo largo del eje OX bajo la acción de una barrera de potencial de anchura a y altura V_0 , esto es

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } x \in [-a/2, a/2] \\ 0 & \text{si } x \notin [-a/2, a/2]. \end{cases}$$

Calcular los estados estacionarios para este sistema con energía $E < V_0$. Calcular asimismo el coeficiente de transmisión de la barrera.

La solución general de la ecuación de Schrödinger es

$$\psi_E(x) = \begin{cases} A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) & \text{si } x \leq -a/2 \\ C \exp(qx) + D \exp(-qx) & \text{si } x \in [-a/2, a/2] \\ F \exp(ikx) + G \exp(-ikx) & \text{si } x \geq a/2, \end{cases}$$

con $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ y $q = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$. Nótese que ahora la exponencial real creciente sólo existe en una región acotada, por lo que la función es siempre finita. Las condiciones de empalme (continuidad de la función y de la derivada primera) en $x = -a/2$ y $x = a/2$ proporcionan cuatro ecuaciones

para calcular los cinco cocientes B/A , C/A , D/A , F/A y G/A . De nuevo el sistema está indeterminado y tiene infinitas soluciones para cada valor E de la energía, que es doblemente degenerado. De estas soluciones, podemos elegir dos linealmente independientes imponiendo distintas condiciones asintóticas. Si suponemos que el problema corresponde a un haz de partículas que inciden desde la izquierda, podemos admitir que a la derecha de la barrera sólo hay un haz transmitido, $F \exp(ikx)$, de partículas que viajan hacia la derecha y no hay ninguna partícula que viaje hacia la izquierda, es decir, $G = 0$. Con esto, las condiciones de continuidad de la función y su derivada en $x = -a/2$ y $x = a/2$ dan lugar al sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} A \exp\left(-\frac{ika}{2}\right) + B \exp\left(\frac{ika}{2}\right) &= C \exp\left(-\frac{qa}{2}\right) + D \exp\left(\frac{qa}{2}\right) \\ ik \left[A \exp\left(-\frac{ika}{2}\right) - B \exp\left(\frac{ika}{2}\right) \right] &= q \left[C \exp\left(-\frac{qa}{2}\right) - D \exp\left(\frac{qa}{2}\right) \right] \\ C \exp\left(\frac{qa}{2}\right) + D \exp\left(-\frac{qa}{2}\right) &= F \exp\left(\frac{ika}{2}\right) \\ q \left[C \exp\left(\frac{qa}{2}\right) - D \exp\left(-\frac{qa}{2}\right) \right] &= ikF \exp\left(\frac{ika}{2}\right), \end{aligned}$$

cuya solución es

$$\frac{B}{A} = \frac{e^{-ika} (k^2 + q^2) \sinh qa}{2iqk \cosh qa + (k^2 - q^2) \sinh qa}$$

$$\frac{C}{A} = \frac{ik (q + ik) e^{-(q+ik)a/2}}{2iqk \cosh qa + (k^2 - q^2) \sinh qa}$$

$$\frac{D}{A} = \frac{ik (q - ik) e^{(q+ik)a/2}}{2iqk \cosh qa + (k^2 - q^2) \sinh qa}$$

$$\frac{F}{A} = \frac{2iqke^{-ika}}{2iqk \cosh qa + (k^2 - q^2) \sinh qa}.$$

El coeficiente de transmisión es entonces

$$\begin{aligned} T &= \frac{J_{tr}}{J_{inc}} = \frac{(\hbar k/m)}{(\hbar k/m)} \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \frac{4q^2 k^2}{4q^2 k^2 + (k^2 + q^2)^2 \sinh^2 qa} \\ &= \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4(V_0 - E)E} \sinh^2 \left(\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} a \right)}. \end{aligned}$$

Problema 3.46 .- A partir del resultado del problema anterior, obtener una fórmula aproximada para el coeficiente de transmisión de una barrera cuadrada de gran anchura.

Suponiendo que $a \gg \sqrt{\hbar^2/2m(V_0 - E)}$ y teniendo en cuenta que

$$x \gg 1 \Rightarrow \sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2} \approx \frac{e^x}{2}$$

el coeficiente de transmisión será

$$\begin{aligned} T &\approx \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{16(V_0 - E)E} \exp\left(2\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}a\right)} \\ &\approx \frac{16(V_0 - E)E}{V_0^2} \exp\left(-2\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}a\right), \end{aligned}$$

pues el 1 en el denominador es despreciable frente al término con la exponencial. Por otra parte, el factor preexponencial es máximo para $E = V_0/2$, con valor 4. Es decir, el factor preexponencial es del orden de la unidad, siempre que la energía E no esté muy próxima a 0 o a V_0 . En definitiva, podemos escribir la expresión aproximada

$$T \approx \exp\left(-2\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}a\right).$$

Nota: Éste es un caso particular de la llamada **fórmula de Gamow**

$$T \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} p(x) dx\right) \quad \text{con} \quad p(x) = \sqrt{2m(V(x) - E)}$$

para una barrera de altura $V(x)$ variable, siendo x_0 y x_1 las raíces de la ecuación $V(x) = E$ (esto es, son los puntos de retroceso clásicos).

Problema 3.47 .- Un haz de partículas libres de energía E incide desde la izquierda sobre una barrera de potencial de altura $V_0 < E$ y anchura a (véase la figura 3.8) ¿Existe alguna energía E para la

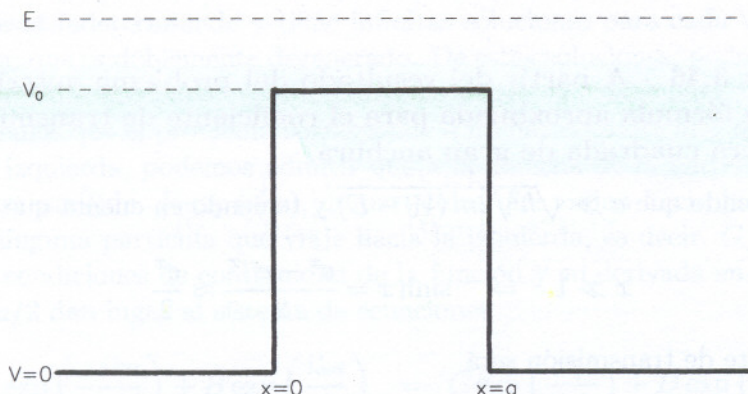


Fig. 3.8.

que todas las partículas superarán la barrera sin que haya partículas reflejadas?

Planteemos, como es habitual, las ecuaciones que surgen de las condiciones de empalme del problema. Supongamos que los límites de la barrera están en $x = 0$ y $x = a$. Entonces, las soluciones de la ecuación de Schrödinger en las 3 regiones (región I: $x < 0$; región II: $0 < x < a$; región III: $x > a$) en que se puede dividir el potencial son:

$$\begin{aligned} x < 0 \quad V = 0: \quad \psi_I(x) &= A \exp(ik_I x) + B \exp(-ik_I x) \\ 0 < x < a \quad V = V_0: \quad \psi_{II}(x) &= C \exp(ik_{II} x) + D \exp(-ik_{II} x) \\ x > a \quad V = 0: \quad \psi_{III}(x) &= F \exp(ik_{III} x) \end{aligned}$$

siendo $k_I = k_{III} = \sqrt{2mE}/\hbar$ y $k_{II} = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$. Las condiciones de empalme son entonces

$$\begin{aligned} \psi_I(0) &= \psi_{II}(0) \Rightarrow A + B = C + D \\ \psi'_I(0) &= \psi'_{II}(0) \Rightarrow ik_I(A - B) = ik_{II}(C - D) \\ \psi_{II}(a) &= \psi_{III}(a) \Rightarrow C \exp(ik_{II}a) + D \exp(-ik_{II}a) = F \exp(ik_I a) \\ \psi'_{II}(a) &= \psi'_{III}(a) \Rightarrow ik_{II}(C \exp(ik_{II}a) - D \exp(-ik_{II}a)) = ik_I F \exp(ik_I a) \end{aligned}$$

A partir de estas cuatro ecuaciones podríamos calcular los cuatro cocientes B/A , C/A , D/A y F/A . En particular $\mathcal{R} = |B/A|^2$ es el coeficiente de reflexión, y el coeficiente de transmisión es $\mathcal{T} = 1 - \mathcal{R}$. Podríamos entonces hallar la expresión general de \mathcal{R} y ver para qué valores de la energía E es $\mathcal{R} = 0$.

Sin embargo, no hay necesidad de calcular la expresión general de \mathcal{R} para responder a la pregunta concreta que plantea el problema. Lo que queremos saber en realidad es si B puede ser nulo y esto apenas requiere cálculos. En efecto, es fácil ver que si $k_{II}a = \pi n$, entonces $\exp(\pm ik_{II}a) = \exp(i\pi n) = (-1)^n$, y las ecuaciones anteriores se transforman en

$$\begin{aligned} A + B &= C + D \\ ik_I(A - B) &= ik_{II}(C - D) \\ (-1)^n(C + D) &= F \exp(ik_I a) \\ ik_{II}(-1)^n(C - D) &= ik_I F \exp(ik_I a). \end{aligned}$$

Las 3 últimas ecuaciones implican $A - B = C + D$. Comparando con la primera, obtenemos $B = 0$ y, por lo tanto, $\mathcal{R} = 0$, $\mathcal{T} = 1$. Así pues, la condición para que \mathcal{T} sea igual a 1 es

$$k_{II}a \equiv \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} a^2 = \pi n \Rightarrow E = V_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2.$$

Si $\lambda_B = 2\pi/k_{II}$ es la longitud de onda de De Broglie de las partículas en la región II (es decir, sobre la barrera), la condición anterior puede escribirse como $a = n(\lambda_B/2)$; es decir, la anchura de la barrera a contiene un número entero de veces media longitud de onda de Broglie. Si se cumple esto, la onda reflejada en $x = a$ interferirá destructivamente con la onda reflejada en $x = 0$ y, en consecuencia, no habrá onda reflejada neta: la totalidad de la onda incidente pasará a la región III.

Problema 3.48 .- Un haz de partículas con energía cinética E incide contra una barrera de potencial cuadrada de altura $V_0 > E$. ¿Cuál debe ser la anchura a de la barrera para que la mitad de las partículas la atraviesen?

La solución exacta para el coeficiente de transmisión \mathcal{T} ha sido obtenida en un problema anterior. El resultado es

$$\mathcal{T} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4(V_0 - E)E} \sinh^2 \left(\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)a^2}{\hbar^2}} \right)}.$$

Para que sólo la mitad de las partículas atraviesen la barrera debe cumplirse que $\mathcal{T} = 1/2$. Es decir

$$\frac{V_0^2}{4(V_0 - E)E} \sinh^2 \left(\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)a^2}{\hbar^2}} \right) = 1,$$

de donde obtenemos

$$a = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \arg \sinh \frac{2\sqrt{E(V_0 - E)}}{V_0},$$

expresión que tiene una fuerte dependencia en E a través del primer factor y una dependencia menor en el segundo.

Por otra parte, para barreras altas y anchas, podemos obtener una estimación aproximada de T a partir de la fórmula de Gamow ya mencionada

$$T \simeq \exp \left\{ -2a \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \right\},$$

y en tal caso

$$T = \frac{1}{2} \Rightarrow a \simeq \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \frac{\ln 2}{2}.$$

Nota: compárense los dos valores que se han obtenido para a .

3.18.6 Otros problemas con estados no ligados.

Problema 3.49 .- Calcular el valor aproximado del coeficiente de transmisión T para una partícula de energía $E < V_0$ que incide desde la izquierda sobre una barrera de potencial de la forma (véase la figura 3.9)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 - kx & x \geq 0 \end{cases}$$

La solución exacta de este problema exigiría resolver la ecuación de Schrödinger (en la región $x \geq 0$)

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

Resolver esta ecuación diferencial no es un problema sencillo. La mejor manera para hacerlo sería replantear la ecuación de Schrödinger en la representación de momentos, resolverla (lo que es más fácil, puesto que la ecuación diferencial es de primer orden en la variable p) y luego pasar de nuevo la solución a la representación de posiciones mediante una transformada inversa de Fourier. La función obtenida es una función de Airy. Además, habría que exigir que

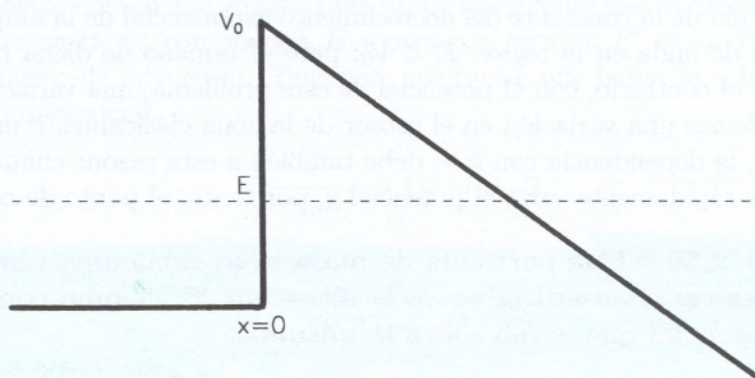


Fig. 3.9.

dicha función satisfaga la condición de empalme con la solución en la región $x < 0$ (que es, evidentemente, una onda plana).

De forma más cualitativa, resulta evidente que a partir de $x_1 = 0$ (primer punto de retroceso clásico, que es donde la partícula empieza a penetrar en el potencial) la amplitud de la función de onda disminuirá, aunque lo hará cada vez más lentamente hasta que en el punto $x_2 = (V_0 - E)/k$ (segundo punto de retroceso clásico) volverá a ser una exponencial con longitud de onda variable.

No obstante, lo que se pide en el enunciado es simplemente un valor aproximado que nos diga cómo va a depender el coeficiente de transmisión con la energía. Para ello podemos usar la fórmula de Gamow que hemos mostrado en un problema anterior:

$$T \simeq \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx \right\}.$$

Entonces

$$\begin{aligned} T &\simeq \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_0^{(V_0 - E)/k} \sqrt{2m(V_0 - kx - E)} dx \right\} \\ &\simeq \exp \left\{ -\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar k} (V_0 - E)^{3/2} \right\}. \end{aligned}$$

Como se ve, la dependencia del coeficiente de transmisión con la energía es más fuerte que en el caso de una barrera cuadrada (donde el coeficiente tiene la expresión $T \sim \exp \left\{ -\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \right\}$). La razón para ello es que,

Esto es, todas autofunciones son idénticas salvo traslación de la variable u . Ello es lógico debido a la simetría del problema (piense que la única diferencia entre una partícula con energía E y otra con energía E' es la situación del punto clásico de retroceso). Tenemos, por tanto, que hallar la solución de la ecuación diferencial

$$\left(-\frac{d^2}{du^2} + u\right) \psi(u) = 0.$$

La solución general de la misma es

$$\psi(u) = a \operatorname{Ai}(u) + b \operatorname{Bi}(u),$$

donde $\operatorname{Ai}(u)$ y $\operatorname{Bi}(u)$ son las llamadas funciones de Airy, que cumplen

$$\lim_{u \rightarrow \infty} \operatorname{Ai}(u) = 0 \quad ; \quad \lim_{u \rightarrow \infty} \operatorname{Bi}(u) = +\infty.$$

Dado que la función de ondas ha de estar acotada, $b = 0$. En definitiva

$$\phi_E(x) = a \operatorname{Ai}\left(\frac{x}{a} - \frac{2mEa^2}{\hbar^2}\right),$$

siendo a una constante arbitraria.

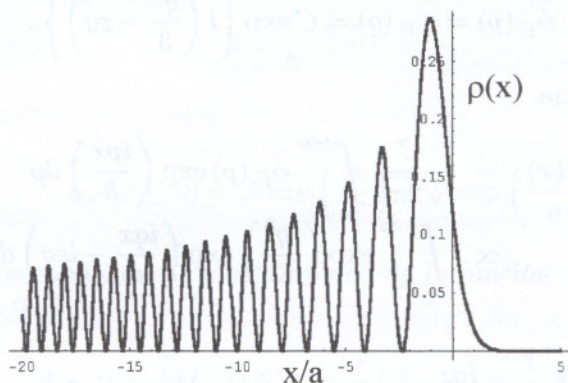


Fig. 3.10.

En la figura adjunta, Fig. 3.10, representamos $\rho(x) = |\phi_E(x)|^2$ para el caso en que $E = 0$. Nótese cómo en la región clásicamente prohibida ($x > 0$), la densidad de probabilidad disminuye exponencialmente, mientras que en la región clásicamente accesible $\rho(x)$ posee un comportamiento de onda estacionaria en el que la longitud de onda y la amplitud disminuyen a medida que $|x|$ aumenta. Esto es acorde con la siguiente interpretación

semiclásica: a medida que x disminuye, la velocidad de la partícula es mayor, por lo que la longitud de Broglie y la probabilidad de encontrar a la partícula en x disminuyen.

b) Si ahora planteamos la ecuación de Schrödinger en la representación de momentos, recordando que la asignación de operadores es $\hat{X} \rightarrow i\hbar d/dp$ y $\hat{P}_x \rightarrow p$, tendremos

$$\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{i\hbar^3}{2ma^3} \frac{d}{dp} \right) \tilde{\phi}_E(p) = E \tilde{\phi}_E(p)$$

o, lo que es lo mismo,

$$\frac{\hbar}{a} \frac{d}{dp} \tilde{\phi}_E(p) = i \frac{a^2}{\hbar^2} (p^2 - 2mE) \tilde{\phi}_E(p).$$

Si hacemos el cambio de variable $q = ap/\hbar$ la ecuación nos queda

$$\frac{d}{dq} \tilde{\phi}_E(p) = i (q^2 - \varepsilon) \tilde{\phi}_E(p),$$

donde $\varepsilon = 2ma^2E/\hbar^2$. La solución general de esta ecuación diferencial es sencilla:

$$\tilde{\phi}_E(p) = \tilde{\psi}_E(q) = C \exp \left\{ i \left(\frac{q^3}{3} - \varepsilon q \right) \right\}.$$

Como consecuencia,

$$\begin{aligned} \phi_E(x) &= \frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\phi}_E(p) \exp \left(\frac{ipx}{\hbar} \right) dp \\ &\propto \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(i \frac{q^3}{3} \right) \exp \left(\frac{iqx}{a} - i\varepsilon q \right) dq. \end{aligned}$$

Pero

$$\frac{iqx}{a} - i\varepsilon q = iq \left(\frac{x}{a} - \varepsilon \right) = iqu$$

por lo que

$$\phi_E(x) = \psi(u) \propto \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ i \left(\frac{q^3}{3} + qu \right) \right\} dq.$$

Nótese que el argumento de la exponencial es una función impar en q , luego

$$\phi_E(x) = \psi(u) \propto \int_0^{+\infty} \cos \left(\frac{q^3}{3} + qu \right) dq.$$

De hecho, puede demostrarse que la última integral es, salvo constante multiplicativa, la transformada de Fourier de la función de Airy $\text{Ai}(u)$, que fue la solución encontrada en el apartado (a).

Problema 3.51 .- Una partícula de masa m está bajo la acción del potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ \frac{\hbar^2}{2ma^3} x & \text{si } x \geq 0 \end{cases}, \quad a > 0.$$

Obtenga la función de ondas de una partícula cuya energía es $E = \hbar^2/(2ma^2)$.

Aplicando el resultado de un problema anterior, en la región $x \geq 0$ la función de ondas $\phi_E(x)$ es igual a la función de Airy $\text{Ai}(u)$. En concreto,

$$\phi_E(x \geq 0) = \text{Ai}(u) = \text{Ai}\left(\frac{x}{a} - \frac{2mEa^2}{\hbar^2}\right) = \text{Ai}\left(\frac{x}{a} - 1\right).$$

Por otro lado, en la región $x \leq 0$, la evolución de la partícula es libre; por tanto introduciendo el número de ondas,

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} = \frac{1}{a},$$

tenemos

$$\phi_E(x \leq 0) = A \exp\left(\frac{ix}{a}\right) + B \exp\left(\frac{-ix}{a}\right).$$

Aplicando las condiciones de continuidad de la función de onda y de su derivada en $x = 0$

$$A + B = \text{Ai}(-1) \quad ; \quad \frac{i}{a}(A - B) = \frac{1}{a} \text{Ai}'(-1)$$

de donde obtenemos

$$\phi_E(x \leq 0) = \text{Ai}(-1) \cos\left(\frac{x}{a}\right) + \text{Ai}'(-1) \sin\left(\frac{x}{a}\right).$$

Esto es, como era de esperar (véase la figura 3.11), $\phi_E(x \leq 0)$ es una onda estacionaria con longitud de onda $\lambda = h/\sqrt{2mE}$. (Nota: las funciones de Airy y sus derivadas están tabuladas. En concreto $\text{Ai}(-1) \simeq 0,5356$ y $\text{Ai}'(-1) \simeq -0,0102$).

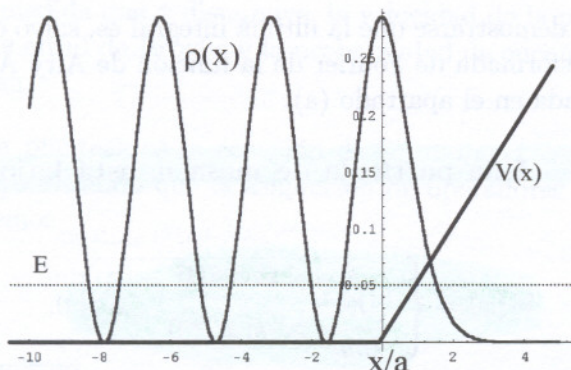


Fig. 3.11.

Problema 3.52 .- Una partícula de masa m incide desde la izquierda con energía $E < V_0$ contra una barrera de potencial de anchura a y altura V_0 centrada en el origen. Calcular la función de ondas de la partícula. Si la barrera se hace infinitamente estrecha ($a \rightarrow 0$) e infinitamente alta ($V_0 \rightarrow \infty$), pero de forma que el producto $aV_0 \equiv g$ se mantiene constante, el potencial al que está sometida esta partícula será la “barrera singular” $V(x) = g \delta(x)$. Obtener cuál será en este caso el autoestado de la partícula con energía E , tanto directamente como a partir del resultado obtenido para la barrera “no singular”.

La expresión de la función de onda para una barrera de potencial ya se ha estudiado en un problema anterior. Veamos ahora el límite en que la barrera se hace infinitamente estrecha.

Si $a \rightarrow 0$, la función de ondas del autoestado de energía E tendrá sólo dos regiones

$$\phi_E(x) = \begin{cases} A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) & \text{si } x \leq 0 \\ F \exp(ikx) & \text{si } x \geq 0 \end{cases} ; \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar.$$

Teniendo en cuenta que $V_0 = g/a$, el momento q del caso general será

$$q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{g}{a} - E \right)}$$

y, en el límite $a \rightarrow 0$,

$$q = \sqrt{\frac{2mg}{\hbar^2}} \frac{1}{\sqrt{a}} \equiv \frac{\gamma}{\sqrt{a}}.$$

De esta manera

$$\sinh qa \rightarrow \sinh \gamma \sqrt{a} \sim \gamma \sqrt{a}; \quad \cosh qa \rightarrow \cosh \gamma \sqrt{a} \sim 1; \quad k^2 \pm q^2 \rightarrow \pm \frac{\gamma^2}{a}$$

y, por tanto, los coeficientes B/A y F/A resultan ser

$$\begin{aligned} B/A &= \lim_{a \rightarrow 0} \frac{e^{-ika} (k^2 + q^2) \sinh qa}{2iqk \cosh qa + (k^2 - q^2) \sinh qa} \\ &= \lim_{a \rightarrow 0} \frac{\frac{\gamma^2}{a} \gamma \sqrt{a}}{2i \frac{\gamma k}{\sqrt{a}} - \frac{\gamma^2}{a} \gamma \sqrt{a}} = \frac{\gamma^2}{2ik - \gamma^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F/A &= \lim_{a \rightarrow 0} \frac{2iqke^{-ika}}{2iqk \cosh qa + (k^2 - q^2) \sinh qa} \\ &= \lim_{a \rightarrow 0} \frac{2i \frac{\gamma k}{\sqrt{a}}}{2i \frac{\gamma k}{\sqrt{a}} - \frac{\gamma^2}{a} \gamma \sqrt{a}} = \frac{2ik}{2ik - \gamma^2}. \end{aligned}$$

• Si resolviésemos directamente la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + g \delta(x) - E \right) \phi_E(x) = 0$$

tendríamos que la función de ondas es

$$\phi_E(x) = \begin{cases} A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) & \text{si } x \leq 0 \\ F \exp(ikx) & \text{si } x \geq 0 \end{cases}; \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar.$$

Por continuidad en $x = 0$ obtenemos

$$A + B = F. \quad (*)$$

Pero el potencial es singular en $x = 0$, por lo que no podemos imponer la continuidad en la derivada de $\phi_E(x)$. La segunda condición, que nos permitirá hallar los coeficientes B/A y F/A , se tiene que obtener directamente a partir de la ecuación de Schrödinger. Así nos queda

$$\frac{d\phi_E(x)}{dx} = \begin{cases} ikA \exp(ikx) - ikB \exp(-ikx) & \text{si } x \leq 0 \\ ikF \exp(ikx) & \text{si } x \geq 0. \end{cases}$$

Pero $d\phi_E(x)/dx$ es discontinua en $x = 0$, por lo que su segunda derivada $d^2\phi_E(x)/dx^2$ ha de obtenerse en el sentido de distribuciones, como se vio

en el caso de una barrera cuadrada, una variación de E implica simplemente una variación de la constante del decrecimiento exponencial de la amplitud de la función de onda en la región $E < V_0$; pero el tamaño de dicha región no varía. Por el contrario, con el potencial de este problema, una variación en E supone además una variación en el grosor de la zona clásicamente prohibida. Asimismo, la dependencia con k se debe también a esta razón: cuanto mayor sea k , más rápidamente varía el potencial y, por tanto, el punto de corte.

Problema 3.50 .- Una partícula de masa m se encuentra sometida a una fuerza constante dirigida en la dirección X^- . Como consecuencia, el potencial que actúa sobre la misma es

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2ma^3} x,$$

siendo a una constante con dimensiones de longitud. Hallar la función propia de una partícula con energía E mediante los dos siguientes métodos:

- Resolviendo directamente la ecuación de Schrödinger en la representación de posiciones.
- Tratando el problema en la representación de momentos.

a) En la representación de posiciones la ecuación de Schrödinger es de la forma

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\hbar^2}{2ma^3} x \right) \phi_E(x) = E \phi_E(x),$$

o bien

$$\left(-a^2 \frac{d^2}{dx^2} + \left[\frac{x}{a} - \frac{2mEa^2}{\hbar^2} \right] \right) \phi_E(x) = 0.$$

Si llamamos x_0 es el punto de retroceso clásico dado por $E = V(x_0)$ y definimos la variable adimensional

$$u = \frac{x - x_0}{a} = \frac{x}{a} - \frac{2mEa^2}{\hbar^2},$$

entonces nos queda

$$\left(-\frac{d^2}{du^2} + u \right) \phi_E(x) = 0,$$

lo que sugiere que la función de ondas depende únicamente de la variable u :

$$\phi_E(x) = \psi(u) \quad ; \quad u = \frac{x}{a} - \frac{2mEa^2}{\hbar^2}.$$

en el último problema del capítulo anterior. Recordando lo que allí se hizo podemos escribir directamente que:

$$\frac{d^2 \phi_E(x)}{dx^2} = \begin{cases} \phi_E''(x) & \text{si } x \neq 0 \\ ik(F + B - A) \delta(x) & \text{si } x = 0. \end{cases}$$

Como la delta de Dirac es nula si $x \neq a$, la ecuación de Schrödinger desarrollada es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \phi_E''(x) - \frac{\hbar^2}{2m} ik(F + B - A) \delta(x) + g \delta(x) \phi_E(0) - E \phi_E(x) = 0,$$

donde las deltas han de cancelarse. De esta forma

$$\frac{\hbar^2}{2m} ik(F + B - A) = g \phi_E(0) = gF$$

y así obtenemos la segunda ecuación que necesitábamos:

$$F + B - A = \frac{\gamma^2}{ik} F. \quad (**)$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones formado por las ecuaciones (*) y (**) obtenemos

$$\begin{aligned} B/A &= \frac{\gamma^2}{2ik - \gamma^2} \\ F/A &= \frac{2ik}{2ik - \gamma^2}, \end{aligned}$$

que coinciden con los valores que ya se habían obtenido antes.

Problema 3.53 .- Consideremos una partícula bajo la acción del potencial $V(x) = -g \delta(x)$, siendo g una constante positiva. Hállense los estados estacionarios ligados así como sus energías.

Este sistema físico puede considerarse como un pozo cuadrado muy estrecho y muy profundo. Los estados estacionarios ligados podrían obtenerse mediante un método similar al visto en el problema anterior (calcular los autoestados de un pozo cuadrado finito y, a continuación, tomar el límite de anchura nula). Sin embargo es mucho más sencillo abordar directamente el problema y tener en cuenta que las derivadas han de realizarse en sentido de distribuciones.

Sea $E < 0$ la energía de un estado estacionario ligado (si $E > 0$ nos encontramos con un autoestado no ligado de \hat{H}). Puesto que el potencial es nulo si $x \neq 0$ la función de onda la podemos escribir como

$$\phi_E(x) = C \exp(-k|x|) \quad ; \quad k = \sqrt{-2mE}/\hbar,$$

donde la constante de normalización C se obtiene a partir de

$$1 = C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-2k|x|) dx = 2C^2 \int_0^{+\infty} \exp(-2kx) dx = \frac{C^2}{k}.$$

Por tanto,

$$\phi_E(x) = \sqrt{k} \exp(-k|x|).$$

Para calcular los valores permitidos de k (y, por ende, de la energía E) tenemos que ir a la propia ecuación de Schrödinger. Derivando $\phi_E(x)$ una primera vez

$$\phi'_E(x) = \begin{cases} Ck \exp(kx) & \text{si } x \leq 0 \\ -Ck \exp(-kx) & \text{si } x \geq 0, \end{cases}$$

y volviendo a derivar

$$\phi''_E(x) = Ck^2 \exp(-k|x|) - 2Ck\delta(x).$$

La ecuación de Schrödinger del sistema es entonces

$$-\frac{\hbar^2}{2m} Ck^2 e^{-k|x|} + \frac{\hbar^2}{m} Ck\delta(x) - g\delta(x)\phi_E(x) = E\phi_E(x).$$

Dado que $\phi_E(0) = C$, al tener que compensarse las deltas de Dirac obligadamente se cumple que

$$\frac{\hbar^2 k}{m} - g = 0.$$

Por tanto

$$k = \frac{gm}{\hbar^2} \Rightarrow \sqrt{-2mE} = \frac{gm}{\hbar} \Rightarrow E = -\frac{g^2 m}{2\hbar^2}.$$

En definitiva, sólo existe un estado ligado $\phi_E(x) = \sqrt{k} \exp(-k|x|)$, con energía $E = -g^2 m / (2\hbar^2)$.

Índice de símbolos y glosario

NÚMEROS Y FUNCIONES

\emptyset : conjunto vacío.

\mathbb{R} y \mathbb{C} son los conjuntos de los números reales (recta real) y complejos (plano complejo), respectivamente.

\mathbb{R}^+ : recta real positiva, esto es $[0, \infty)$.

$\text{Re}(\dots)$ o $\text{Im}(\dots)$ son las partes real e imaginaria de la expresión encerrada entre los paréntesis.

α^* es el complejo conjugado de $\alpha \in \mathbb{C}$.

$\langle f(x) \rangle$ es el valor medio o esperado de la función $f(x)$.

$\tilde{g}(k) = \hat{\mathcal{F}}\{f(x)\}$ es la transformada de Fourier de la función $f(x)$, pág. 62.

Producto de convolución, $f * g$: Dadas dos funciones $g(x)$, $h(x) \in \mathcal{L}(\mathbb{R})$ se denomina *producto de convolución* ($g * h$) a la función

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(s) h(x-s) ds \equiv g * h(x)$$

y se cumple que $\mathcal{F}\{g * h\} = \mathcal{F}\{g\} \cdot \mathcal{F}\{h\}$; es decir, la transformada de Fourier de un producto de convolución de dos funciones es el producto ordinario de las transformadas de Fourier de las dos funciones, pág. 64.

δ_{ij} : delta de Kronecker, con valores $\delta_{ii} = 1$ y $\delta_{ij} = 0$ si $i \neq j$.

$\delta(x)$: *función* delta de Dirac, pág. 60.

$P_n(x)$ son los polinomios de Legendre, definidos en el intervalo $[-1, 1]$, pág. 25.

$L_n(x)$ son los polinomios de Laguerre, definidos en $[0, \infty)$, pág. 25.

$\mathcal{L}_n(x)$ son las funciones de Laguerre, pág. 25.

$H_n(x)$ son los polinomios de Hermite, definidos en $(-\infty, \infty)$, pág. 25.

$\mathcal{H}_n(x)$ son las funciones de Hermite, pág. 25.

ESPACIOS VECTORIALES O LINEALES

\mathcal{U} es un espacio vectorial complejo, cuyos subconjuntos denotamos por \mathcal{D} , \mathcal{R} , \mathcal{W} , \mathcal{W}_1 , \mathcal{W}_2 , etc., pág. 16.

\mathbb{E}^n : espacio euclídeo n -dimensional.

\mathbb{R}^n : espacio real n -dimensional, $\mathbb{R} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \times \dots \mathbb{R}$.

$P[a, b]$ es el espacio de los polinomios con coeficientes complejos, definidos en el intervalo $[a, b]$.

$C[a, b]$ es el espacio de las funciones continuas y acotadas, definidas en el intervalo $[a, b]$.

$C_n[a, b]$ es el espacio de las funciones continuamente derivables n veces, definidas en el intervalo $[a, b]$.

$\mathcal{L}(\mathbb{R})$: conjunto de funciones complejas de variable real definidas en \mathbb{R} que verifican $\int_{\mathbb{R}} |\phi(x)| dx < \infty$ (esto es, las funciones son absolutamente integrables en \mathbb{R}).

$\mathcal{L}^2([a, b])$: conjunto de funciones complejas de variable real definidas en el intervalo cerrado $[a, b] \in \mathbb{R}$ que verifican $\int_{[a, b]} |\phi(x)|^2 dx < \infty$ (esto es, las funciones son de cuadrado sumable en $[a, b]$).

$\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$: espacio de las funciones complejas de variable real (definidas en \mathbb{R}^n) cuyo cuadrado es sumable o integrable en \mathbb{R}^n .

\mathbb{C}_2^∞ : conjunto de las sucesiones convergentes de números complejos $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3, \dots)$, con $a_i \in \mathbb{C}$, tales que $\sum_{j=1}^\infty |a_j|^2 < \infty$.

Subespacio vectorial (o lineal) : es un subconjunto del espacio vectorial \mathcal{U} que es a su vez un espacio lineal.

$\dim(\mathcal{U})$ es la **dimensión** del espacio vectorial \mathcal{U} , pág. 18.

$\text{lin}(\mathcal{W})$ es la **envolvente lineal** de \mathcal{W} , esto es, el conjunto formado por todos los elementos de \mathcal{U} que son *combinación lineal* de elementos de \mathcal{W} (esto es, se pueden expresar como una suma *finita* de ellos), pág. 18.

\mathcal{B} es una **base lineal** de un espacio vectorial \mathcal{U} , de dimensión N , pág. 17.

(\vec{u}, \vec{v}) : **producto escalar** de los vectores \vec{u} y \vec{v} de un espacio vectorial (es un escalar, en principio $\in \mathbb{C}$) , pág. 21.

$(\phi(x), \psi(x))$: **producto escalar** de las funciones (o vectores de un espacio de funciones) ϕ y ψ (es un escalar $\in \mathbb{C}$), pág. 22.

Espacio pre-Hilbert : espacio vectorial en el que se ha definido un producto escalar, pág. 21.

$\|\vec{u}\|$: **norma** del vector \vec{u} de un espacio vectorial (es un escalar $\in \mathbb{R}$), pág. 18.

Espacio de Banach o espacio completo es un espacio vectorial normado, en el que toda sucesión de Cauchy es convergente, pág. 20.

Espacio de Hilbert, \mathcal{H} es un espacio lineal pre-Hilbert y de Banach bajo la norma asociada al producto escalar, pág. 23.

\mathcal{B}_F es una base ortonormal o de Fourier de un espacio de Hilbert \mathcal{H} , pág. 24.

$\mathcal{H}^{(1)} \oplus \mathcal{H}^{(2)}$ es el espacio de Hilbert **suma directa** de los dos subespacios $\mathcal{H}^{(1)}$ y $\mathcal{H}^{(2)}$, pág. 27.

$\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ es el espacio de Hilbert **producto tensorial** de los dos subespacios $\mathcal{H}^{(1)}$ y $\mathcal{H}^{(2)}$, pág. 54.

\mathcal{W}^\perp es el **complemento ortogonal** de un subespacio de Hilbert \mathcal{W} , esto es, es el conjunto de todos los vectores de \mathcal{H} que son ortogonales a todos los vectores del subespacio $\mathcal{W} \subset \mathcal{H}$, pág. 26.

OPERADORES

\hat{A} es un **operador**, esto es, una aplicación de un subespacio $\mathcal{D}(\hat{A}) \subset \mathcal{H}$ en \mathcal{H} tal que a cada vector $\vec{v} \in \mathcal{D}(\hat{A})$ le hace corresponder un segundo vector $\hat{A}\vec{v}$ que pertenece al espacio \mathcal{H} , pág. 28.

$\mathcal{D}(\hat{A})$ es el **dominio** del operador \hat{A} , esto es, el conjunto de vectores de \mathcal{H} sobre los que actúa el operador, pág. 28.

$\mathcal{R}(\hat{A})$ es el **recorrido** del operador \hat{A} , esto es, el conjunto de aquellos vectores de \mathcal{H} que son el resultado de la actuación del operador sobre los vectores de $\mathcal{D}(\hat{A})$, pág. 28.

Operador lineal es un operador de un espacio de Hilbert \mathcal{H} que, para todo $\vec{u}, \vec{v} \in \mathcal{D}(\hat{A})$ y para todo complejo α , cumple que $\hat{A}(\vec{u} + \vec{v}) = \hat{A}\vec{u} + \hat{A}\vec{v}$ y que $\hat{A}(\alpha\vec{u}) = \alpha\hat{A}\vec{u}$, pág. 29.

Suma de operadores. Sean \hat{A} y \hat{B} dos operadores lineales de un espacio de Hilbert \mathcal{H} . El operador $\hat{A} + \hat{B}$, **suma** de \hat{A} y \hat{B} , se define de la forma $(\hat{A} + \hat{B})\vec{u} = \hat{A}\vec{u} + \hat{B}\vec{u}$, siendo su dominio $\mathcal{D}(\hat{A}) \cap \mathcal{D}(\hat{B})$, pág. 29.

Producto de operadores El operador $\hat{A}\hat{B}$, **producto** o **composición** de los operadores \hat{A} y \hat{B} , se define como $(\hat{A}\hat{B})\vec{u} = \hat{A}(\hat{B}\vec{u})$ y su dominio es el subconjunto de $\mathcal{D}(\hat{B})$ formado por aquellos vectores \vec{u} tales que $\hat{B}\vec{u} \in \mathcal{D}(\hat{A})$, pág. 29.

$\|\hat{A}\|$ es la **norma** del operador \hat{A} , pág. 30.

$\mathcal{A}(\mathcal{H})$ es el conjunto de todos los operadores lineales acotados definidos en el espacio \mathcal{H} , pág. 31.

\hat{A}^\dagger es el **operador adjunto** de \hat{A} , pág. 33.

Operador hermítico o autoadjunto es el que coincide con su adjunto, $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, pág. 34.

Operador unitario es el que, al multiplicarlo por su adjunto, da como resultado el operador unidad $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}$, pág. 35.

Proyector es un operador \hat{P} hermítico e idempotente (esto es, que $\hat{P}^2 = \hat{P}\hat{P} = \hat{P}$), pág. 38.

Proyector ortogonal $\hat{P}_\mathcal{W}$ es un proyector que nos da la proyección ortogonal de cualquier vector sobre un subespacio \mathcal{W} , pág. 38.

Autovector (o vector propio) de un operador \hat{A} : se dice que un vector \vec{u} es un autovector de \hat{A} (o autofunción si estamos en un espacio de funciones) con autovalor complejo a si se cumple $\hat{A}\vec{u} = a\vec{u}$, pág. 40.

Autovalor (o valor propio) de un operador \hat{A} : el número complejo a es un autovalor de \hat{A} si existe un vector \vec{u} (autovector de \hat{A}) que verifique la ecuación de autovalores $\hat{A}\vec{u} = a\vec{u}$, pág. 40.

$\sigma_p(\hat{A})$ es el **espectro puntual** (conjunto de autovalores) del operador \hat{A} , pág. 40.

Autovalor impropio: Sea un operador lineal \hat{A} ; si existen valores complejos $\alpha \notin \sigma_p(\hat{A})$ para los que, no existiendo ningún vector \vec{u} que satisfaga estrictamente la expresión $\hat{A}\vec{u} = \alpha\vec{u}$, es posible encontrar una sucesión de vectores *normalizados* \vec{u}_n de \mathcal{H} tales que la sucesión $\{(\hat{A} - \alpha)\vec{u}_n\}$ tiende a cero, entonces se dice que el número complejo $\alpha \notin \sigma_p(\hat{A})$ es un *autovalor impropio*, pág. 40.

$\sigma_c(\hat{A})$ es el **espectro continuo** (conjunto de autovalores impropios) del operador \hat{A} , pág. 41.

$\sigma(\hat{A})$ es el **espectro** (el conjunto total de los autovalores y de los autovalores impropios) del operador \hat{A} , pág. 41. A los valores propios del espectro se les llama *valores espectrales*.

$\hat{\mathcal{F}}$ es el operador que efectúa la **transformación de Fourier** de una función dada, pág. 62.

Conmutador de dos operadores $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, pág. 124.

Operadores compatibles son los que conmutan, esto es $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$, págs. 53 y 108.

CCOC es un conjunto completo de observables (u operadores) compatibles, págs. 53 y 111.

NOTACIÓN DE DIRAC .

Vector ket se representa por $|\phi\rangle$, pág. 57.

Vector bra se representa por $\langle\phi|$, pág. 57.

Producto escalar se representa por $\langle\phi|\eta\rangle$, pág. 58.

Elemento de matriz se representa por $\langle\phi|\hat{A}|\eta\rangle$, pág. 58.

OPERADORES Y VECTORES CON SIGNIFICADO FÍSICO .

Vector o función de estado : es el que representa un estado de un sistema físico cualquiera; es un vector de un espacio de Hilbert, pág. 92.

Observable es cualquier variable dinámica A susceptible de ser medida, se representa mediante un operador lineal hermítico \hat{A} , pág. 94.

$\text{Prob}_\psi(a)$: al medir un observable A , probabilidad de obtener en dicha medida el valor a , pág. 95.

Operador de evolución temporal, $\hat{U}(t)$ es el operador que actúa en el espacio de los estados de manera que, operando sobre un estado cuántico en el instante $t = 0$, nos da el estado cuántico en el instante t : $\hat{U}(t)\psi(0) = \psi(t)$, pág. 118.

Estados con el observable bien definido : para un observable \hat{A} se dice de aquellos estados que son autoestados de \hat{A} , pág. 97.

Estados estacionarios : son los que no evolucionan físicamente en el tiempo, pues su evolución temporal es únicamente un cambio en una fase de módulo unidad, pág. 122.

Constante de movimiento es un observable cuyo valor medio es constante en el tiempo para cualquier estado (sea estacionario o no), pág. 125.

$\langle A \rangle$ o $\langle \hat{A} \rangle_\psi$ es el **valor medio o esperado** de la magnitud A (clásicamente) o del operador \hat{A} (cuánticamente, en el estado ψ), pág. 98.

$\Delta\hat{A}$ es la **desviación típica o incertidumbre** de la magnitud A ; nos da información sobre la dispersión de los resultados de la medida de A , pág. 99.

$\langle \hat{A} \rangle_t = \langle \hat{A} \rangle_{\psi_t}$ es el **valor medio** del operador \hat{A} para el estado cuántico $\psi_t = \psi(t)$, pág. 124.

\hat{H} es el operador **hamiltoniano** (los autoestados de \hat{H} se llaman autoestados de la energía, que son estados estacionarios).

\hat{K} es el operador de **energía cinética**.

\hat{V} es el operador de **energía potencial**.

\hat{X} es el operador de la **posición** en la variable x (\hat{Y} para la variable y , \hat{Z} para la variable z).

\hat{P}_x es el operador del momento lineal en la dirección x (\hat{P}_y para la dirección y , \hat{P}_z para la dirección z), pág. 130.

\hat{L} , \hat{L}^2 , \hat{L}_x , \hat{L}_y , \hat{L}_z son los operadores del **momento angular** o cinético, pág. 133.

$\hat{\Pi}$ es el operador **paridad**, pág. 83.

$\Psi(x, t)$ es la **función de onda** en la *representación de posiciones* de una partícula en una dimensión y en el instante t , pág. 139.

$\rho(x) = |\Psi(x)|^2$: **densidad de probabilidad** asociada a una medida de la posición; $\rho(x)dx$ es la probabilidad de que al medir la posición de la partícula se tenga un valor dentro del intervalo $(x, x + dx)$, pág. 139.

$J(x)$ es la **corriente de probabilidad**, $J(x) = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi(x) \frac{d\Psi^*(x)}{dx} - \Psi^*(x) \frac{d\Psi(x)}{dx} \right)$, pág. 140.

$\text{Prob}_\psi(x \in [a, b])$ es la probabilidad de encontrar a la partícula descrita por el estado ψ en el intervalo $[a, b]$, pág. 142.

$\tilde{\Psi}(p, t)$ es la **función de onda** en la *representación de momentos* de una partícula en una dimensión y en el instante t , pág. 143.

\hat{a}^+ es el **operador creación** (en el tratamiento operacional del oscilador armónico), pág. 212.

\hat{a} es el **operador destrucción** (en el tratamiento operacional del oscilador armónico), pág. 212.

h : constante de Planck $h = 6,64 \times 10^{-34}$ Js, pág. 2.

\hbar : constante de Planck racionalizada, $h/2\pi$, pág. 4.

e : carga del electrón, pág. 114.

m_e : masa del electrón, $m_e = 9.11 \times 10^{-31}$ kg, pág. 114.

μ_e : momento magnético intrínseco del electrón, pág. 114.

μ_B : magnetón de Bohr, $\mu_B = e\hbar/(2m_e) = 9.27 \times 10^{-24}$ J Tesla⁻¹, pág. 114.

g : factor giromagnético, $g_e \simeq 2$, pág. 114.

Bibliografía

Citamos, preferentemente de entre los publicados en español, aquellos textos en los que se hace una introducción matemática al formalismo de la teoría cuántica. Por ello, no incluimos en la lista muchos de los textos habituales de Mecánica Cuántica al nivel de primer ciclo de la licenciatura en CC. Físicas, pues muchos de ellos pasan casi directamente a las aplicaciones de la teoría.

LIBROS MATEMÁTICOS

- L. Abellanas y A. Galindo** *Espacios de Hilbert* (editorial Eudema, 1988): una buena referencia para la parte matemática del formalismo de la Mecánica Cuántica.
- J. M. Íñiguez** *Operadores lineales en los espacios métricos* (Academia de Ciencias de Zaragoza, 1946): un libro excelente sobre el tema.
- L. Schwartz** *Métodos matemáticos para las Ciencias Físicas* (editorial Seleccionaciones Científicas, 1969): este texto tiene capítulos sobre la teoría de distribuciones, convolución y series y transformadas de Fourier.
- A. N. Kolmogórov y S. V. Fomin** *Elementos de la teoría de funciones y del análisis funcional* (editorial Rubiños, 1975); *Elements of the Theory of Functions and Functional Analysis* (Dover, 1999): un texto completo sobre análisis en espacios funcionales.
- J. von Neumann** *Fundamentos matemáticos de la Mecánica Cuántica* (CSIC, 1991).
- P.A.M. Dirac** *Principios de Mecánica Cuántica* (editorial Ariel, 1967); *The Principles of Quantum Mechanics* (cuarta edición, Oxford University Press, 1958).

Dos libros clásicos, con dos soluciones diferentes al problema de los autovalores continuos. El libro de von Neumann es prácticamente matemático, mientras que el libro de Dirac contiene aplicaciones físicas.

LIBROS DE MECÁNICA CUÁNTICA .

D. T. Gillespie *Introducción a la Mecánica Cuántica*. (Ed. Reverté): libro conciso y claro, con un tratamiento postulacional semejante a este texto, aunque tratado de una manera más sencilla.

A. Galindo y R. Pascual *Mecánica Cuántica. Vol. I y II*. (Editorial Eudema): libro excelente y con un gran rigor matemático, que puede resultar algo difícil para los alumnos que no posean los conocimientos matemáticos (espacios de Hilbert, teoría de la medida, resolución espectral de operadores) requeridos para su lectura. Existe un volumen adicional con problemas resueltos.

A. Messiah *Mecánica Cuántica* (editorial Tecnos); *Quantum Mechanics* (Dover, 1999): un texto muy conocido, reeditado recientemente a un precio asequible en inglés y en un único volumen. Se trata de uno de los textos clásicos de la disciplina y hace bastante énfasis en los aspectos matemáticos del formalismo.

C. Cohen-Tannoudji, B. Diu y F. Lalöe *Mécanique Quantique, Tome I et II*, (Hermann, París); *Quantum Mechanics, I & II* (Wiley, New York): no está editado en español, pero es sin duda uno de los mejores y más didácticos libros de texto existentes.

LIBROS DE PROBLEMAS .

R. Fernández Álvarez-Estrada y J.L. Sánchez Gómez *100 problemas de Física Cuántica*. (Alianza Editorial, 1996): es el único libro completo de problemas en castellano. Su nivel es intermedio entre el primer y segundo ciclos.

S. Flügge *Practical Quantum Mechanics*. (Springer Verlag, Berlin).

F. Constantinescu y E. Magyari *Problems in Quantum Mechanics*. (Pergamon, Oxford).

Dos de los libros clásicos de problemas de Mecánica Cuántica. El segundo de ellos tiene una pequeña introducción teórica en cada capítulo.

TABLAS MATEMÁTICAS .

M.R. Spiegel, J. Liu y L. Abellanas : *Fórmulas y tablas de matemática aplicada* (Ed. McGraw-Hill, Serie Schaum, 2000).

CUADERNOS DE LA UNED

SERIE CIENCIAS FÍSICAS.

Este libro expone el formalismo de la Mecánica Cuántica al nivel del primer ciclo de la licenciatura en Ciencias Físicas. Se supone que el alumno está familiarizado con los conceptos claves del formalismo cuántico, aunque sin necesidad de rigor matemático. Como la Mecánica Cuántica es, en muchos casos, una herramienta para otras disciplinas, sólo se han desarrollado los aspectos metodológicos generales, pues las aplicaciones concretas se tratarán en cursos superiores.

El libro está estructurado en tres capítulos:

- Un breve capítulo introductorio, que explica la necesidad de un nuevo formalismo para la descripción del mundo subatómico.

- En el segundo se presenta la teoría de los espacios de Hilbert. Esto permitirá discutir los aspectos conceptuales del formalismo cuántico sin tener que hacer digresiones *técnicas*, que dificultarían la comprensión del mismo.

- El tercer capítulo propone el formalismo de la Mecánica Cuántica. La presentación es general, representándose los estados cuánticos mediante vectores generales de un espacio de Hilbert; además, se discuten niveles de energía degenerados, valores continuos del espectro, etc.

Se incluyen alrededor de 80 problemas resueltos, que deben trabajarse para conseguir una buena fundamentación del formalismo. Además, se han intercalado ejemplos y ejercicios que clarifican y complementan la teoría de los distintos apartados.



UNIVERSIDAD NACIONAL
DE EDUCACIÓN A DISTANCIA