

ASSIGNATURA: MECÀNICA QUÀNTICA

QUADRIMESTRE: CINQUÈ

DEPARTAMENT: ESTRUCTURA I CONSTITUENTS DE LA MATÈRIA

Objectiu: L'alumne, ja exposat als conceptes elementals de la física quàntica, coneixerà la seva formulació precisa. L'èmfasi es posa en la fonamentació dels conceptes més bàsics i en l'exposició de tècniques generals, deixant les aplicacions en estat sòlid, física atòmica i física nuclear a les respectives assignatures. No obstant la voluntat de precisió, s'evitarà en la mesura del possible l'excés de notació matemàtica.

Fonaments matemàtics de la mecànica quàntica.- Espais de Hilbert. Espai L_2 . Operadors. Autovalors i autofuncions. Distribucions, δ de Dirac i transformada de Fourier. Representació de posició i representació de moments.

Conceptes bàsics i axiomàtica de la mecànica quàntica.- Funcions d'ona i principi de superposició. Interpretació probabilística. Observables i mesures. Regles de commutació. Principi d'incertesa. Estats purs i estats mescla. Matriu densitat. El problema de la mesura a la mecànica quàntica. Evolució dels estats i dels valors esperats. Partícules idèntiques.

Problemes unidimensionals.- Generalitats. Oscil·lador harmònic. Funció de Green.

Simetries a la mecànica quàntica.- Realització de les simetries. Teorema de Wigner. Transformació dels estats i dels operadors. Grups de simetria. Trasllacions. Rotacions. Simetries discretes. Lleis de conservació. Invariància i degeneració.

Moment angular.- Valors propis del moment angular. Estats propis. Harmònics esfèrics. invariància rotacional i conservació del moment angular. Moment angular semi-enter: espí. Composició de moments angulars. Aplicació a potencial centrals.

Mètodes aproximats.- Aproximació WKB. Aplicacions. Mètodes variacionals.

BIBLIOGRAFIA:

Llibres de teoria:

E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, Wiley

F.J. Ynduráin, *Mecánica Cuántica*, Alianza Universidad Textos

Llibre de problemes:

A. Galindo i P. Pascual, *Problemas de Mecánica Cuántica*, Eudema

Llibres de consulta:

L.S. Schiff, *Quantum Mechanics*, Mc-Graw-Hill

A. Galindo i P. Pascual, *Mecánica Cuántica*, Eudema

A.S. Davydov, *Quantum Mechanics*, Pergamon Press

J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Benjamin-Cummings.

FORMA D'AVALUACIÓ:

Examen escrit. Es valoraran els exercicis resolta a classe de problemes.

I - FUNDAMENTOS MATEMATICOS DE LA MECANICA CUANTICA

Definición 1 - Se dice que un conjunto E de elementos $|f\rangle, |g\rangle, \dots$ forman un espacio lineal sobre el cuerpo de los números complejos, \mathbb{C} , cuando en el conjunto E se han definido las dos operaciones siguientes:

i) Suma: Dados dos elementos $|f\rangle, |g\rangle \in E$ existe un elemento de E, que se indica por $|f\rangle + |g\rangle$, y que se llama su suma. Esta operación satisface las reglas

$$|f\rangle + |g\rangle = |g\rangle + |f\rangle \quad (\text{propiedad conmutativa}) \quad (1)$$

$$(|f\rangle + |g\rangle) + |h\rangle = |f\rangle + (|g\rangle + |h\rangle) \quad (\text{propiedad asociativa}) \quad (2)$$

$$\text{Si } |f\rangle + |g\rangle = |f\rangle + |h\rangle \implies |g\rangle = |h\rangle \quad (3)$$

ii) Producto: Dados un número complejo $\alpha \in \mathbb{C}$ y un $|f\rangle \in E$, existe un elemento de E, que se indica por $\alpha|f\rangle$, y que se llama producto del número complejo α y del elemento $|f\rangle$. Esta operación satisface las reglas

$$\alpha(|f\rangle + |g\rangle) = \alpha|f\rangle + \alpha|g\rangle \quad (\text{propiedad distributiva}) \quad (4)$$

$$(\alpha + \beta)|f\rangle = \alpha|f\rangle + \beta|f\rangle \quad (\text{propiedad distributiva}) \quad (5)$$

$$(\alpha\beta)|f\rangle = \alpha(\beta|f\rangle) \quad (\text{propiedad asociativa}) \quad (6)$$

$$1|f\rangle = |f\rangle \quad (7)$$

Nota 1 - Se usarán indistintamente las notaciones

$$|\sum_{i=1}^N \alpha_i |f_i\rangle = \sum_{i=1}^N |\alpha_i |f_i\rangle = \sum_{i=1}^N \alpha_i |f_i\rangle \quad (8)$$

Teorema 1 - Existe en E un elemento nulo $|0\rangle \equiv 0$, que es único y que satisface

$$|f\rangle + |0\rangle = |f\rangle \quad \forall |f\rangle \in E \quad (10)$$

En efecto, si $\alpha=1$ y $\beta=0$, (5) implica que $|f\rangle = |f\rangle + 0|f\rangle$ y (3) implica que $0|f\rangle \equiv |0\rangle$ es único. Este elemento es independiente de $|f\rangle$, pues $0|g\rangle = |0\rangle$ entonces,

$$\left. \begin{aligned} |f\rangle + |g\rangle &= (|f\rangle + |0\rangle) + |g\rangle \\ |f\rangle + |g\rangle &= |f\rangle + (|g\rangle + |0\rangle) \end{aligned} \right\} \Rightarrow (|f\rangle + |g\rangle) + |0\rangle = (|f\rangle + |g\rangle) + |0\rangle \Rightarrow |0\rangle = |0\rangle$$

Nota 2 - Si $|g\rangle = |0\rangle$, entonces (1.4) implica

$$\alpha |0\rangle = 0 \tag{1}$$

Definición 2 - Dados $|f\rangle, |g\rangle \in E$ se llama diferencia y se denota por $|x\rangle = |f\rangle - |g\rangle$ a un elemento $|x\rangle \in E$ tal que $|f\rangle = |g\rangle + |x\rangle$

Nota 3 - La ecuación (1.3) implica que la diferencia es simétrica.

Definición 3 - Los elementos $|f_1\rangle, |f_2\rangle, \dots, |f_m\rangle \in E$ se dice que son linealmente independientes si

$$\sum_{i=1}^m \alpha_i |f_i\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha_i = 0 \quad \forall i = 1, 2, \dots, m \tag{2}$$

Definición 4 - Se llama espacio de Hilbert, H , a un espacio lineal en el que se ha definido una operación que hace corresponder a todo par ordenado $|f\rangle, |g\rangle \in H$ un número complejo $(f, g) \equiv \langle f | g \rangle$, llamada su producto interno. Esta operación satisface las reglas

$$\langle f | g \rangle = \langle g | f \rangle^* \tag{3}$$

$$\langle f | \alpha g \rangle = \alpha \langle f | g \rangle \tag{4}$$

$$\langle f | g + h \rangle = \langle f | g \rangle + \langle f | h \rangle \tag{5}$$

$$\langle f | f \rangle > 0 \quad \forall |f\rangle \neq 0 \tag{6}$$

Nota 4 - Son consecuencias de esta definición

$$\langle f + g | h \rangle = \langle f | h \rangle + \langle g | h \rangle \tag{7}$$

$$\langle \alpha f | g \rangle = \alpha^* \langle f | g \rangle \tag{8}$$

$$\langle f | 0 \rangle = 0 \tag{9}$$

Definición 5. - Dado un elemento $|f\rangle \in H$ se llama norma de $|f\rangle$ a

$$\|f\| = +\sqrt{\langle f|f\rangle} \quad (1)$$

Nota 5. - La norma es siempre no negativa y es nula si y sólo si $|f\rangle = 0$, como se deduce de (2.6) y (2.9)

Teorema 2. - Dados dos elementos cualesquiera $|f\rangle, |g\rangle \in H$, entonces

$$|\langle f|g\rangle| \leq \|f\| \|g\| \quad (\text{Desigualdad de Schwarz}) \quad (2)$$

En efecto si $|g\rangle = 0$ el teorema es trivial, por tanto supondremos que $|g\rangle \neq 0$. Se tiene

$$\langle f + \alpha g | f + \alpha g \rangle \geq 0 \Rightarrow |\alpha|^2 \|g\|^2 + \alpha \langle f|g\rangle + \alpha^* \langle g|f\rangle + \|f\|^2 \geq 0 \quad \forall \alpha \in \mathbb{C} \quad (3)$$

En particular es cierto para $\alpha \equiv -\langle g|f\rangle / \|g\|^2$ y entonces (3) se escribe

$$\|f\|^2 - |\langle f|g\rangle|^2 / \|g\|^2 \geq 0 \quad (4)$$

lo cual implica (2).

Nota 6. - La desigualdad es satisfecha si y sólo si $\alpha|f\rangle + \beta|g\rangle = 0$

Teorema 3. - Dados dos elementos cualesquiera $|f\rangle, |g\rangle \in H$ se cumple

$$\|f + g\| \leq \|f\| + \|g\| \quad (\text{Desigualdad de Minkowski}) \quad (5)$$

En efecto si $|f+g\rangle = 0$ la desigualdad es trivial. Sea $|f+g\rangle \neq 0$, entonces

$$\|f + g\|^2 = |\langle f+g|f+g\rangle| = |\langle f+g|f\rangle + \langle f+g|g\rangle| \leq |\langle f+g|f\rangle| + |\langle f+g|g\rangle| \leq$$

$$\leq \|f+g\| \|f\| + \|f+g\| \|g\| = \|f+g\| (\|f\| + \|g\|) \Rightarrow (5)$$

Definición 6. - Dados dos elementos $|f\rangle, |g\rangle \in H$ se llama distancia entre ellos a la cantidad no negativa

$$d(f, g) \equiv \|f - g\| \quad (6)$$

Nota 7. - El espacio de Hilbert es un espacio métrico pues la distancia definida en (3.6) satisface las condiciones que caracterizan la distancia en los espacios métricos:

$$d(|f\rangle, |g\rangle) \geq 0 \quad \text{si } |f\rangle \neq |g\rangle \quad (1)$$

$$d(|f\rangle, |g\rangle) = 0 \quad \text{si y sólo si } |f\rangle = |g\rangle$$

$$d(|f\rangle, |g\rangle) = d(|g\rangle, |f\rangle) \quad (2)$$

$$d(|f\rangle, |g\rangle) \leq d(|f\rangle, |h\rangle) + d(|h\rangle, |g\rangle) \quad (3)$$

El hecho de que el espacio de Hilbert sea un espacio métrico nos permite dotar al mismo de una topología y en particular hablar de límites y de sucesiones convergentes.

Definición 7. - Se dice que la sucesión $\{|f_m\rangle\}$, de elementos de H , converge fuertemente hacia $|f\rangle \in H$ ($|f_m\rangle \rightarrow |f\rangle$), si $\|f_m - f\| \rightarrow 0$ cuando $m \rightarrow \infty$.

Definición 8. - Se dice que la sucesión $\{|f_m\rangle\}$, de elementos de H , converge débilmente hacia $|f\rangle \in H$ ($|f_m\rangle \rightarrow |f\rangle$), si $\langle g | f_m \rangle \rightarrow \langle g | f \rangle$ para todo $|g\rangle \in H$.

Teorema 4. - Si $|f_m\rangle \rightarrow |f\rangle$ entonces $|f_m\rangle \rightarrow |f\rangle$

En efecto $\forall |g\rangle \in H$ se tiene

$$|\langle g | f_m \rangle - \langle g | f \rangle| = |\langle g | f_m - f \rangle| \leq \|g\| \|f_m - f\| \xrightarrow{m \rightarrow \infty} 0$$

Nota 8. - Si bien la convergencia fuerte implica la débil, hay sucesiones débilmente convergentes que no convergen en sentido fuerte.

Teorema 5. - Si $|f_m\rangle \rightarrow |f\rangle$, $|g_m\rangle \rightarrow |g\rangle$ entonces $\langle f_m | g_m \rangle \rightarrow \langle f | g \rangle$

En efecto

$$|\langle f | g \rangle - \langle f_m | g_m \rangle| = |\langle f - f_m | g \rangle + \langle f | g - g_m \rangle + \langle f_m - f | g - g_m \rangle| \leq$$

$$\leq \|f - f_m\| \|g\| + \|f\| \|g - g_m\| + \|f_m - f\| \|g_m - g\| \leq$$

$$\leq \|g\| \|f - f_m\| + \|f\| \|g - g_m\| + \|f_m - f\| \|g_m - g\| \xrightarrow{m \rightarrow \infty} 0$$

Definición 9. - Se dice que una sucesión $\{f_m\}$ de elementos de H converge en el sentido Cauchy si para todo $\epsilon > 0$ existe un N tal que para todo $m, n > N$ se cumple $\|f_m - f_n\| < \epsilon$.

Definición 10. - Se dice que un espacio de Hilbert es completo si para toda sucesión convergente Cauchy existe un elemento $f \in H$ tal que $f_m \rightarrow f$. Es decir que toda sucesión convergente Cauchy, converge fuertemente.

Nota 9. - Se puede probar que todo espacio de Hilbert no completo se puede completar de una forma elemental. A partir de ahora se supondrá siempre que el espacio de Hilbert es completo.

Definición 11. - Se dice que un espacio de Hilbert es separable si se puede encontrar una sucesión de elementos numerable $\{f_1, f_2, \dots, f_m, \dots\}$ de elementos de H , tal que dado un elemento cualquiera $f \in H$ y un número $\epsilon > 0$ se puede formar una combinación lineal finita g de elementos de $\{f_m\}$ tal que

$$\|f - g\| < \epsilon$$

11)

Nota 10. - A partir de ahora consideraremos espacios de Hilbert completos y separables, únicamente.

Definición 12. - Se llama variedad lineal a todo subconjunto de elementos de H que forman un espacio lineal

Definición 13. - Se llama subespacio a una variedad lineal a la que se han añadido todos sus puntos de acumulación.

Nota 11. - Danse cuenta de que dado un conjunto, S , de elementos de H , se obtiene una variedad lineal, que se dice engendrada por S , al añadir a S todas las combinaciones lineales finitas de sus elementos. Si se completa esta

variedad lineal con sus puntos de acumulaci3n se habla entonces del subespacio engendrado por S.

Definici3n 14. - Se dice que un conjunto S es completo cuando el subespacio que engendra coincide con H.

Teorema 6. - Si un conjunto S es completo, $\langle f|g \rangle = \langle f|h \rangle$ para todo $|f\rangle \in S$, entonces $|g\rangle = |h\rangle$.

En efecto, para todo $|f\rangle \in S$ se tiene $\langle f|g-h\rangle = 0$. Si $|e\rangle$ es un elemento cualquiera de la variedad lineal engendrada por S se tiene que $\langle e|g-h\rangle = 0$. Por hip3tesis existe una sucesi3n $\{|e_n\rangle\}$ de elementos de la variedad lineal engendrada por S que converge fuertemente hacia $|g-h\rangle$, por lo cual

$$\|g-h\|^2 = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle e_n | g-h \rangle = 0 \tag{1}$$

de donde $|g\rangle = |h\rangle$

Definici3n 15. - Si en H existe un conjunto completo con N elementos y no existe ninguno con menos de N elementos, se dice que el espacio de Hilbert tiene dimensi3n N. Si existe un conjunto completo con un n3mero infinito numerable de elementos y no existe ninguno con n3mero finito, entonces se dice que el espacio de Hilbert es de dimensi3n infinita numerable.

Nota 12. - Se puede probar que estas son las dos 3nicas alternativas para espacios de Hilbert completos y separables.

Definici3n 16. - Se dice que un conjunto de elementos S $\subset H$ es acotado si existe un n3mero $C > 0$ tal que para todo $|f\rangle \in S$ se cumple

$$\|f\| < C \tag{2}$$

Definici3n 17. - Se dice que un conjunto de elementos S $\subset H$ es compacto si cualquier subconjunto infinito de S, contiene una sucesi3n que converge fuertemente.

Definición 18. - Dos elementos $|f\rangle, |g\rangle \in H$ se dice que son ortogonales si

$$\langle f|g\rangle = 0$$

(1)

Definición 19. - Un conjunto, S , de elementos de H se dice que es ortogonal cuando dos elementos cualesquiera del conjunto S son ortogonales.

Definición 20. - Un conjunto, S , de elementos de H se dice que es ortonormal cuando todos sus elementos tienen norma uno y dos a dos son ortogonales.

Teorema 7. - Método de ortogonalización de Schmidt. - Dado un conjunto finito o infinito numerable, S^* , de elementos de H , existe un sistema ortonormal, \mathcal{Q} , de elementos de H , que engendra la misma variedad lineal.

En efecto sean $|f_1^*\rangle, |f_2^*\rangle, \dots, |f_m^*\rangle, \dots$ los elementos de S^* . Sea S el conjunto de elementos $|f_1\rangle, |f_2\rangle, \dots, |f_m\rangle, \dots$ que se obtiene al eliminar de S^* todos aquellos elementos que sean combinación lineal de los anteriores. Las variedades lineales engendradas por S y S^* son idénticas. A partir de los elementos $|f_m\rangle$ podemos construir

$$|g_1\rangle \equiv |f_1\rangle$$

$$|\varphi_1\rangle \equiv |g_1\rangle / \|g_1\|$$

$$|g_2\rangle \equiv |f_2\rangle - \langle \varphi_1 | f_2 \rangle |\varphi_1\rangle$$

$$|\varphi_2\rangle \equiv |g_2\rangle / \|g_2\|$$

(2)

$$|g_m\rangle \equiv |f_m\rangle - \sum_{k=1}^{m-1} \langle \varphi_k | f_m \rangle |\varphi_k\rangle$$

$$|\varphi_m\rangle \equiv |g_m\rangle / \|g_m\|$$

Este proceso quedaría frenado si se llegara a un $|g_m\rangle$ de norma nula, pero esto no puede suceder pues entonces $|f_m\rangle$ sería combinación lineal de $|f_1\rangle, \dots, |f_{m-1}\rangle$, contra lo supuesto. Es evidente que $\|\varphi_m\| = 1 \quad \forall m$. Además

$$\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = \frac{1}{\|g_2\|} \{ \langle \varphi_1 | f_2 \rangle - \langle \varphi_1 | f_2 \rangle \| \varphi_1 \|^2 \} = 0 \quad (3)$$

Supóngase que $\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$ para $i, j = 1, 2, \dots, (m-1)$, veamos que también es cierto para el valor m . Sea $j < m$

$$\begin{aligned} \langle \varphi_j | \varphi_m \rangle &= \frac{1}{\|g_m\|} \langle \varphi_j | g_m \rangle = \frac{1}{\|g_m\|} \left\{ \langle \varphi_j | f_m \rangle - \sum_{k=1}^{m-1} \langle \varphi_k | f_m \rangle \langle \varphi_j | \varphi_k \rangle \right\} \\ &= \frac{1}{\|g_m\|} \left\{ \langle \varphi_j | f_m \rangle - \langle \varphi_j | f_m \rangle \right\} = 0 \end{aligned}$$

Es decir $\{\varphi_m\}$ es un conjunto ortonormal. Es evidente que φ_m es una combinación lineal de $\langle f_1 \rangle, \langle f_2 \rangle, \dots, \langle f_m \rangle$ y $\langle f_m \rangle$ lo es de $\langle \varphi_1 \rangle, \langle \varphi_2 \rangle, \dots, \langle \varphi_m \rangle$ y por tanto la nidad lineal engendrada por \mathbb{Q} coincide con la engendrada por S y en consecuencia con la engendrada por S^* .

Teorema 8. - Sea $\{\varphi_m\}$ una sucesión de elementos ortonormales, entonces si

$$|f\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i |\varphi_i\rangle \quad (1)$$

se tiene que
$$\sum_{i=1}^{\infty} |\alpha_i|^2 < \infty \quad (2)$$

y además
$$\alpha_i = \langle \varphi_i | f \rangle \quad (3)$$

Inversamente (2) implica (1).

En efecto, sea $|S_m\rangle = \sum_{i=1}^m \alpha_i |\varphi_i\rangle$, entonces si $m > m$ se tiene

$$\|S_m - S_m\|^2 = \left\| \sum_{i=m+1}^m \alpha_i |\varphi_i\rangle \right\|^2 = \sum_{i=m+1}^m \sum_{j=m+1}^m \alpha_i^* \alpha_j \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \sum_{i=m+1}^m |\alpha_i|^2 \quad (4)$$

Por hipótesis $\|S_m - S_m\|^2 \rightarrow 0$ y por tanto $\sum_{i=m+1}^m |\alpha_i|^2 \rightarrow 0$ y (2) se cumple.

Multiplicando (1) por $|\varphi_k\rangle$ se obtiene (3). Falta probar que (2) implica (1), pero esto es inmediato pues de (4) se deduce que $\|S_m - S_m\| \rightarrow 0$ si se cumple (2) y como el espacio es completo la sucesión $\{S_m\}$ tiene un límite.

Teorema 9. - (Desigualdad de Bessel). Sea $\{\varphi_m\}$ una sucesión de vectores ortonormales entonces para todo $|f\rangle \in H$ se cumple

$$\sum_m |\langle \varphi_m | f \rangle|^2 \leq \|f\|^2 \quad (5)$$

En efecto, sea $\alpha_m \equiv \langle \varphi_m | f \rangle$ y $|S_m\rangle = \sum_{i=1}^m \alpha_i |\varphi_i\rangle$ y $|h_m\rangle = |f\rangle - |S_m\rangle$

Para $k = 1, 2, \dots, m$ se tiene

$$\alpha_k = \langle \varphi_k | f \rangle = \langle \varphi_k | s_m \rangle + \langle \varphi_k | h_m \rangle = \alpha_k + \langle \varphi_k | h_m \rangle \Rightarrow \langle \varphi_k | h_m \rangle = 0$$

Por lo tanto

$$\langle s_m | h_m \rangle = 0$$

y esto implica

$$\begin{aligned} \|f\|^2 &= \|s_m + h_m\|^2 = \|s_m\|^2 + \|h_m\|^2 = \sum_{i=1}^m |\alpha_i|^2 + \|h_m\|^2 \geq \\ &\geq \sum_{i=1}^m |\alpha_i|^2 = \sum_{i=1}^m |\langle \varphi_i | f \rangle|^2 \end{aligned}$$

para todo valor de m y (8.5) queda probada por paso al límite

Teorema 10. La condición necesaria y suficiente para que la serie ortogonal $\{|\varphi_n\rangle\}$, sea completa es que para todo $|f\rangle \in H$ se pueda escribir

$$|f\rangle = \sum_n \langle \varphi_n | f \rangle |\varphi_n\rangle \quad (1)$$

En efecto, el Teorema anterior nos permite deducir

$$\sum_n |\langle \varphi_n | f \rangle|^2 = \|f\|^2$$

y entonces el Teorema 8 nos asegura que $\sum_n \langle \varphi_n | f \rangle |\varphi_n\rangle$ define un elemento $|g\rangle \in H$. De $|g\rangle = \sum_n \langle \varphi_n | f \rangle |\varphi_n\rangle$ se deduce que $\langle \varphi_m | g \rangle = \langle \varphi_m | f \rangle$ para todo $|\varphi_m\rangle$ y en el Teorema 6 se tiene que $|g\rangle = |f\rangle$, de donde (1) queda probada. Es obvio que si (1) es cierta el sistema es completo.

Teorema 11. (Igualdad de Parseval). Si $\{|\varphi_n\rangle\}$ es un conjunto ortogonal completo y $|f\rangle, |g\rangle \in H$ entonces

$$\langle f | g \rangle = \sum_n \langle f | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | g \rangle \quad (2)$$

En efecto, por ser $\{|\varphi_n\rangle\}$ completo

$$|f\rangle = \sum_n \langle \varphi_n | f \rangle |\varphi_n\rangle, \quad |g\rangle = \sum_n \langle \varphi_n | g \rangle |\varphi_n\rangle$$

de donde se deduce (2) inmediatamente.

Definición 21. - Un conjunto de elementos $S \subset H$ se llama complejo si dados dos elementos cualesquiera $|f\rangle, |g\rangle \in S$ entonces $[|f\rangle + |g\rangle]/2 \in S$.

Teorema 12. - Sea un conjunto complejo $S \subset H$ y d el límite inferior de las normas de todos los elementos $|f\rangle \in S$, entonces si la sucesión $\{|f_m\rangle\} \in S$ tiene la propiedad de que

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \|f_m\| = d \quad (1)$$

esta sucesión es fundamental, es decir $\|f_m - f_n\| \rightarrow 0$ para $m, n \rightarrow \infty$.

En efecto si $|f\rangle$ y $|g\rangle$ son dos elementos cualquiera de H entonces

$$\|f + g\|^2 + \|f - g\|^2 = 2\|f\|^2 + 2\|g\|^2 \quad (2)$$

Elijamos ahora $|f\rangle \equiv [|f_m\rangle - |f_n\rangle]/2$, $|g\rangle \equiv [|f_m\rangle + |f_n\rangle]/2$, entonces

$$\|\frac{1}{2}(f_m - f_n)\|^2 = \frac{1}{2}\|f_m\|^2 + \frac{1}{2}\|f_n\|^2 - \|\frac{1}{2}(f_m + f_n)\|^2$$

y como $\{[|f_m\rangle + |f_n\rangle]/2\} \in S$ su norma es mayor o igual que d .

$$\|\frac{1}{2}(f_m - f_n)\|^2 \leq \frac{1}{2}\|f_m\|^2 + \frac{1}{2}\|f_n\|^2 - d^2$$

de donde $\|f_m - f_n\|^2 \rightarrow 0$, para $m, n \rightarrow \infty$.

Teorema 13. - Sean L_1 y L_2 dos subespacios de L que tienen el cero como único elemento común, El conjunto de todos los elementos $|f\rangle = |g\rangle + |h\rangle$ donde $|g\rangle \in L_1$ y $|h\rangle \in L_2$ forman un subespacio, L , que se llama suma directa de L_1 y L_2 y se escribe $L = L_1 \oplus L_2$

Teorema 14. - Sea L un subespacio de H . El conjunto, M , de todos los elementos ortogonales a L forman un subespacio que se denomina subespacio ortogonal complementario de L y se designa como $H \ominus L$.

La prueba de ambos teoremas es inmediata.

Teorema 15. - $H = L \oplus (H \ominus L)$ (3)

En efecto: Sea $|f\rangle \in H$ y d la distancia de $|f\rangle$ al subespacio L , es decir el límite inferior de las normas $\|f - g\|$ para todo $|g\rangle \in L$. Existe una sucesión

$\{ |g_n\rangle \} \in L$ tal que $\|g_n - f\| \rightarrow d$ para $n \rightarrow \infty$. El conjunto de los elementos $|f\rangle - |g\rangle$ con $|g\rangle \in L$ es convexo y por lo tanto el Teorema 13 permite afirmar que la sucesión $\{ |g_n\rangle - |f\rangle \}$ es fundamental y lo mismo es cierto para $\{ |g_n\rangle \}$. Por ser L cerrado $|g_n\rangle \rightarrow |g\rangle \in L$ y por lo tanto $\|f - g\| = d$. Sea $|e\rangle$ un elemento cualquiera de L , entonces para todo α

$$|g\rangle + \alpha |e\rangle \in L, \quad \|f - g - \alpha e\| \geq d$$

y por tanto

$$\|f - g - \alpha e\|^2 = \|f - g\|^2 \geq 0 \quad \forall \alpha$$

de donde

$$-\alpha^* \langle e | f - g \rangle - \alpha \langle f - g | e \rangle + \alpha \alpha^* \|e\|^2 \geq 0 \quad \forall \alpha$$

Tomando $\alpha = \lambda \langle e | f - g \rangle$ con λ real

$$\lambda^2 \langle e | f - g \rangle^2 \|e\|^2 - 2\lambda \langle e | f - g \rangle^2 \geq 0 \quad \forall \lambda \text{ real}$$

lo cual solo puede ser cierto si $\langle e | f - g \rangle = 0 \Rightarrow (|f\rangle - |g\rangle) \in H \ominus L$. Escribiendo $|f\rangle - |g\rangle = |h\rangle$ se tiene que $|f\rangle = |g\rangle + |h\rangle$ con $|g\rangle \in L$ y $|h\rangle \in H \ominus L$, es decir que todo elemento de H se escribe como una suma de un elemento de L y otro de $H \ominus L$. Para finalizar la demostración es necesario probar que L y $H \ominus L$ no tienen más elemento común que el cero, pero esto es inmediato pues sólo el cero es ortogonal a sí mismo.

Teorema 16. - Si $H = L \oplus (H \ominus L)$ cualquier elemento $|f\rangle \in H$ se descompone en forma única en un elemento $|g\rangle \in L$ y un $|h\rangle \in H \ominus L$.

En efecto, supóngase que no fuera así

$$|f\rangle = |g_1\rangle + |h_1\rangle = |g_2\rangle + |h_2\rangle$$

de donde $|g_1\rangle - |g_2\rangle = |h_2\rangle - |h_1\rangle$, pero $|g_1\rangle - |g_2\rangle \in L$ y $|h_2\rangle - |h_1\rangle \in H \ominus L$ y por lo tanto al ser iguales $|g_1\rangle - |g_2\rangle = 0$ y $|h_2\rangle - |h_1\rangle = 0$.

Definición 22. - Si H_1 y H_2 son dos espacios de Hilbert, se llama producto directo de ambos y se designa por $H = H_1 \oplus H_2$ al conjunto de todos los elementos $|g\rangle = \{ |g_1\rangle, |g_2\rangle \}$ con $|g_1\rangle \in H_1$ y $|g_2\rangle \in H_2$. En H se define

$$\alpha |f\rangle + \beta |g\rangle \equiv \{ \alpha |f_1\rangle + \beta |g_1\rangle, \alpha |f_2\rangle + \beta |g_2\rangle \} \quad (1)$$

$$\langle f | g \rangle \equiv \langle f_1 | g_1 \rangle + \langle f_2 | g_2 \rangle$$

Se puede probar que si H_1 y H_2 son completos y separables, entonces $H = H_1 \oplus H_2$ es también completo y separable.

Ejemplo 1. - El espacio \mathcal{L}^N es un espacio de Hilbert con elementos

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix} \quad u_i \in \mathcal{L} \quad (1)$$

y definiendo

$$\alpha |u\rangle + \beta |v\rangle = \begin{pmatrix} \alpha u_1 + \beta v_1 \\ \alpha u_2 + \beta v_2 \\ \vdots \\ \alpha u_N + \beta v_N \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$\langle u | v \rangle = \sum_{i=1}^N u_i^* v_i = (u_1^*, u_2^*, \dots, u_N^*) \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_N \end{pmatrix} \quad (3)$$

Ejemplo 2. El espacio \mathcal{L}^2 es un espacio de Hilbert con elementos

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \sum_{i=1}^{\infty} |u_i|^2 < \infty \quad (4)$$

La suma y producto se definen como en el caso anterior. La desigualdad de Schwarz asegura que $\langle u | v \rangle < \infty$.

Definición 23. - Sea $[a, b]$ un intervalo finito o infinito sobre la recta real \mathbb{R} . Se indicará por $L^2(a, b)$ al conjunto de todas las funciones $f(x)$, con $a \leq x \leq b$, tales que

$$\int_a^b dx |f(x)|^2 < \infty \quad (5)$$

es decir, las funciones de cuadrado integrable.

Teorema 17. - Si $f(x), g(x) \in L^2(a, b)$, entonces $\alpha f(x) + \beta g(x) \in L^2(a, b)$

En efecto

$$\int_a^b dx |\alpha f(x) + \beta g(x)|^2 = |\alpha|^2 \int_a^b dx |f(x)|^2 + |\beta|^2 \int_a^b dx |g(x)|^2 + 2 \int_a^b dx [\operatorname{Re} \alpha f(x)] [\operatorname{Re} \beta g(x)] + 2 \int_a^b dx [\operatorname{Im} \alpha f(x)] [\operatorname{Im} \beta g(x)]$$

Pero si A y B son dos números reales $2AB \leq A^2 + B^2$, de donde

$$\int_a^b dx |\alpha f(x) + \beta g(x)|^2 \leq 2|\alpha|^2 \int_a^b dx |f(x)|^2 + 2|\beta|^2 \int_a^b dx |g(x)|^2 < \infty$$

Nota 13. - Esto permite afirmar que el conjunto de las funciones de cuadrado integrable forman un espacio lineal si se define su suma y el producto por un número complejo de la forma usual.

Teorema 18. - Si $f(x), g(x) \in L^2(a, b)$ entonces

$$\left| \int_a^b dx f^*(x) g(x) \right| < \infty \quad (1)$$

En efecto

$$\begin{aligned} \left| \int_a^b dx f^*(x) g(x) \right| &\leq \int_a^b dx |f^*(x) g(x)| = \int_a^b dx |f(x)| |g(x)| \leq \\ &\leq \frac{1}{2} \int_a^b dx |f(x)|^2 + \frac{1}{2} \int_a^b dx |g(x)|^2 < \infty \end{aligned}$$

Nota 14. - Esto permite afirmar que el espacio lineal $L^2(a, b)$ se puede convertir en un espacio de Hilbert si se define el producto como

$$(f, g) = \int_a^b dx f^*(x) g(x) \quad (2)$$

Se puede probar que $L^2(a, b)$ es completa y separable.

Definición 24. - Llamamos operador lineal A definido en un subespacio $D(A) \subset H$ a una operación A que hace corresponder a cada elemento $|f\rangle \in D(A)$ un elemento $A|f\rangle \in H$. Esta correspondencia debe ser tal que si $|f_1\rangle, |f_2\rangle \in D(A)$

$$T(\alpha_1 |f_1\rangle + \alpha_2 |f_2\rangle) = \alpha_1 T|f_1\rangle + \alpha_2 T|f_2\rangle \quad (3)$$

El subespacio $D(A)$ se llama dominio de definición de A y $R(A) \equiv A(D(A))$ recorrido de A .

Nota 15 (continuación) - En muchas ocasiones interesara $L^2(-\infty, +\infty) \equiv L^2(\mathbb{R}) \equiv L^2_{\mathbb{R}} \equiv L^2(\mathbb{R})$.

Si $\{\varphi_i(x)\}$ es una base ortonormal

$$\int_{\mathbb{R}} dx \varphi_i^*(x) \varphi_j(x) = \delta_{ij} \quad (1)$$

y además es completa entonces $\psi(x) \in L^2(\mathbb{R})$ admite el desarrollo

$$\psi(x) = \sum_{i=1}^{\infty} \psi_i \varphi_i(x) \quad (2)$$

donde ψ_i es la componente de $\psi(x)$ en la base considerada y viene dada por

$$\psi_i = \int_{\mathbb{R}} dx \varphi_i^*(x) \psi(x) \quad (3)$$

Nota 15' - Otro espacio de Hilbert útil es $L^2(\mathbb{R}^3)$ formada por aquellas funciones $\psi(\vec{x})$, $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$, de cuadrado integrable:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d\vec{x} |\psi(\vec{x})|^2 < \infty \quad (4)$$

y con producto

$$\langle \psi | \varphi \rangle \equiv \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{x} \langle \varphi^*(\vec{x}) | \psi(\vec{x}) \rangle \quad (5)$$

Este es el espacio de Hilbert de una partícula sin spin en movimiento en un espacio tridimensional.

Nota 15'' - Otro espacio de Hilbert útil es $L^2 \otimes L^2(\mathbb{R}^3)$. Sus elementos son

$$|\varphi(\vec{x})\rangle = \begin{pmatrix} \varphi_+(\vec{x}) \\ \varphi_-(\vec{x}) \end{pmatrix}, \quad \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{x} \{ |\varphi_+(\vec{x})|^2 + |\varphi_-(\vec{x})|^2 \} < \infty \quad (6)$$

y el producto escalar es definido

$$\langle \varphi | \psi \rangle \equiv \int_{\mathbb{R}^3} d^3x [\varphi_+^*(\vec{x}) \psi_+(\vec{x}) + \varphi_-^*(\vec{x}) \psi_-(\vec{x})] \quad (7)$$

Este es el espacio de Hilbert de una partícula de spin 1/2 en movimiento tridimensional.

Un operador lineal A se dice que es acotado si existe un número finito $M \geq 0$ tal que

$$\|A f\| \leq M \|f\|, \quad \forall f \in D(A) \quad (1)$$

El menor de los números M que satisfacen la desigualdad (1) se llama norma del operador A y se representa por $\|A\|$.

Nota 15.- En $L^2(a, b)$ existen operadores A tales que su dominio de definición no coincide con todo H . Así por ejemplo

i) El operador X definido en $H = L^2(\mathbb{R})$ por

$$(X\psi)(x) = x\psi(x) \quad (2)$$

tiene como dominio

$$D(X) = \left\{ \psi \in H : \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, x^2 |\psi(x)|^2 < \infty \right\} \quad (3)$$

ii) El operador P definido en $H = L^2(\mathbb{R})$ por

$$(P\psi)(x) = -i \frac{d\psi(x)}{dx} \quad (4)$$

tiene como dominio

$$D(P) = \left\{ \psi \in H : \psi \text{ absolutamente continuo, } \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left| \frac{d\psi(x)}{dx} \right|^2 < \infty \right\} \quad (5)$$

Se puede probar que $D(X)$ y $D(P)$ son densos en H . Veamos, por ejemplo, que P no es acotado. Consideremos las funciones $\psi_m(x) = e^{-mx^2}$. Entonces

$$(P\psi_m)(x) = 2imx e^{-mx^2} \Rightarrow$$

$$\|P\psi_m\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, 4m^2 x^2 e^{-2mx^2} = 2m \sqrt{\frac{\pi}{2m}}$$

$$\Rightarrow \|P\psi_m\| = \sqrt{2m} \|\psi_m\| \quad (6)$$

$$\|\psi_m\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, e^{-2mx^2} = \sqrt{\frac{\pi}{2m}}$$

Definición 25. Dos operadores T_1 y T_2 se dice que son iguales si $D(T_1) = D(T_2)$ y $T_1 |f\rangle = T_2 |f\rangle$ para todo $|f\rangle \in D(T_1) = D(T_2)$

Definición 26. Se denomina operador cero, O , a un operador que hace corresponder a todo $|f\rangle \in H$ al elemento nulo. Se denomina operador unidad, I , a un operador que hace corresponder a todo $|f\rangle \in H$ el elemento $|f\rangle$.

Teorema 19. Si $\langle f | I | f \rangle = 0$ para todo $|f\rangle \in H$ entonces $T = O$

En efecto

$$0 = \langle f + g | T | f + g \rangle = \langle f | T | f \rangle + \langle f | T | g \rangle + \langle g | T | f \rangle + \langle g | T | g \rangle \Rightarrow$$

$$\langle f | T | g \rangle + \langle g | T | f \rangle = 0 \quad (1)$$

Partiendo de $|f\rangle + i|g\rangle$ se obtiene

$$\langle f | T | g \rangle - \langle g | T | f \rangle = 0 \quad (2)$$

De donde $\langle f | T | g \rangle = 0 \quad \forall |f\rangle, |g\rangle \in H$. Tomando $|f\rangle = T|g\rangle$ se tiene $\|Tg\|^2 = 0$ y tanto $T|g\rangle = 0$, lo que implica $T = O$.

Definición 27. Se define la suma de operadores, el producto de operadores y el producto de un operador por un número complejo mediante las relaciones

$$(T_1 + T_2) |f\rangle = T_1 |f\rangle + T_2 |f\rangle \quad (3)$$

$$(T_1 T_2) |f\rangle = T_1 (T_2 |f\rangle) \quad (4)$$

$$(\alpha T) |f\rangle = \alpha (T |f\rangle) \quad (5)$$

En consecuencia $T_1 + T_2$ está únicamente definido en $D(T_1) \cap D(T_2)$ y $T_1 T_2$ está sólo definido en $R(T_2) \cap D(T_1)$.

Definición 28. Un operador A , se dice que es continuo en $|f_0\rangle \in D(A)$, si para toda sucesión $\{|f_n\rangle\} \in D(A)$, tal que $|f_n\rangle \rightarrow |f_0\rangle$, se tiene que $A|f_n\rangle \rightarrow A|f_0\rangle$. Se puede probar que si A es continuo en $|f_0\rangle$ lo es para todo $|f\rangle \in D(A)$. Además si A es acotado y $D(A) = H$, entonces A es un operador continuo.

Nota 16 - Consideremos $L^2(a, b)$ y la sucesión de elementos $f_m(x) = (\sin mx)/m$, que converge hacia cero para $m \rightarrow \infty$. Sea $D \equiv -i d/dx$, entonces $(Df_m)(x) = \cos mx$ y como la sucesión $(Df_m)(x)$ no converge hacia cero entonces D no es un operador continuo.

Nota 17 - Consideremos el espacio de Hilbert \mathbb{C}^N introducido en el Ejemplo 1. En este espacio podemos introducir una base ortonormal completa formada por los vectores $|\hat{e}_1\rangle, |\hat{e}_2\rangle, \dots, |\hat{e}_N\rangle$, definidos como

$$|\hat{e}_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\hat{e}_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \dots, \quad |\hat{e}_N\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

que obviamente cumplen

$$\langle \hat{e}_i | \hat{e}_j \rangle = \delta_{ij} \quad (2)$$

Introduzcamos

$$\langle \hat{e}_1 | = | 1, 0, 0, \dots, 0 |$$

$$\langle \hat{e}_2 | = | 0, 1, 0, \dots, 0 |$$

$$\langle \hat{e}_N | = | 0, 0, 0, \dots, 1 |$$

esto es los triquetos de los vectores (1). Todo elemento $|u\rangle \in \mathbb{C}^N$ se puede escribir

$$|u\rangle = \sum_{i=1}^N u_i |\hat{e}_i\rangle \quad (4)$$

y simularmente

$$\langle u | = \sum_{i=1}^N u_i^* \langle \hat{e}_i | \quad (5)$$

para que $\langle u | v \rangle$ coincida con la definición dada antes.

$$\langle u | v \rangle = \sum_{i=1}^N u_i^* v_i \quad (6)$$

Notemos que

$$\sum_{i=1}^N |\hat{e}_i\rangle \langle \hat{e}_i | = I \quad (7)$$

donde I es la matriz identidad.

Definir un operador en este espacio es equivalente a introducir una matriz A , cuyos elementos en la base considerada son

$$A_{ij} = \langle \hat{e}_i | A | \hat{e}_j \rangle \tag{1}$$

Notar que

$$\begin{aligned} A |u\rangle &= \sum_{i=1}^N u_i A | \hat{e}_i \rangle = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N u_i | \hat{e}_j \rangle \langle \hat{e}_j | A | \hat{e}_i \rangle = \sum_{j=1}^N \left(\sum_{i=1}^N A_{ji} u_i \right) | \hat{e}_j \rangle \\ &\equiv \sum_{j=1}^N v_j | \hat{e}_j \rangle = |v\rangle \end{aligned} \tag{2}$$

Obviamente A esta definido, en este caso, sobre todo el espacio de Hilbert y además A es un operador acotado. Recordemos algunas propiedades de las matrices

i) Si $A|u\rangle = 0$ se cumple sólo para $|u\rangle = 0$, entonces se puede definir la matriz inversa, A^{-1} , tal que

$$A^{-1} A = A A^{-1} = I \tag{3}$$

Recordar

$$(\alpha A)^{-1} = (1/\alpha) A^{-1}, \quad (A_1 A_2)^{-1} = A_2^{-1} A_1^{-1}, \quad (A^{-1})^{-1} = A \tag{4}$$

ii) Dada una matriz A se llama matriz adjunta, A^+ , una matriz tal que

$$\langle u | A | v \rangle = \langle v | A^+ | u \rangle^* \quad , \quad \forall |u\rangle, |v\rangle \in \mathbb{C}^N \tag{5}$$

En la base considerada

$$(A^+)_{ij} = (A_{ji})^* \tag{6}$$

Notar que

$$(\alpha A)^+ = \alpha^* A^+ \quad , \quad (A_1 A_2)^+ = A_2^+ A_1^+ \quad , \quad (A^+)^+ = A \tag{7}$$

iii) Una matriz A se llama autoadjunta si

$$A^+ = A \tag{8}$$

que equivale a imponer

$$\langle u | A | v \rangle = \langle v | A | u \rangle^* \quad \forall |u\rangle, |v\rangle \in \mathbb{C}^N \tag{9}$$

iv) Una matriz U se llama unitaria si

$$UU^+ = U^+U = I$$

u)

Recordemos que la condición necesaria y suficiente para que la matriz U sea unitaria es que transforme todo sistema ortonormal completo en otro sistema ortonormal completo.

En efecto sea U una matriz unitaria y $\{|\varphi_i\rangle\}$ $i=1,2,\dots,N$ un sistema ortonormal completo. Definamos $|\psi_i\rangle \equiv U|\varphi_i\rangle$, entonces

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \langle U\varphi_i | U\varphi_j \rangle = \langle \varphi_i | U^+U|\varphi_j \rangle = \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$$

y por tanto $\{|\psi_i\rangle\}$ $i=1,2,\dots,N$ forman un sistema ortonormal completo. Supongamos ahora que $\{|\varphi_i\rangle\}$ y $\{|\psi_i\rangle\}$ son dos sistemas ortonormales completos y que $|\psi_i\rangle = U|\varphi_i\rangle$, entonces

$$\delta_{ij} = \langle \psi_i | \psi_j \rangle = \langle U\varphi_i | U\varphi_j \rangle = \langle \varphi_i | U^+U|\varphi_j \rangle \Rightarrow \langle \varphi_i | U^+U - I |\varphi_j \rangle = 0 \quad \forall i,j=1,\dots,N$$

y por tanto U es unitaria.

Dos operadores A_1 y A_2 se dice que son unitariamente equivalentes si existe una matriz unitaria U tal que

$$A_1 = UA_2U^+$$

b)

v) Un operador A se dice que es positivo si $\langle u | Au \rangle \geq 0$ para todo $|u\rangle \in \mathbb{C}^N$ y se escribe $A \geq 0$. Notar que

$$A^+A \geq 0, \quad A^+A \geq 0 \quad (3)$$

vi) Sea H_1 y $H_2 = \mathbb{C}^N \ominus H_1$ dos subespacios de \mathbb{C}^N , entonces todo $|u\rangle \in \mathbb{C}^N$ se puede escribir de forma única como $|u\rangle = |u_1\rangle + |u_2\rangle$ con $|u_i\rangle \in H_i$ ($i=1,2$). La transformación $P_i: |u\rangle = |u_i\rangle$ se llama operada de proyección o proyector sobre el subespacio H_i .

La transformación P es un proyector si y sólo si

$$P^+ = P, \quad P^2 = P$$

(4)

Em efecto si P es un proyecton sobre H_1 , entonces todo $|u\rangle \in \mathbb{C}^N$ se puede escribir como $|u\rangle = |u_1\rangle + |u_2\rangle$, con $|u_1\rangle \in H_1$ y $|u_2\rangle \in H_2 \equiv \mathbb{C}^N \ominus H_1$.
 Entomus para todo $|u\rangle, |v\rangle \in \mathbb{C}^N$ se tiene

$$\langle v | P | u \rangle = \langle v_1 + v_2 | P | u_1 + u_2 \rangle = \langle v_1 + v_2 | u_1 \rangle = \langle v_1 | u_1 \rangle = \langle v_1 | u_1 + u_2 \rangle = \langle P v | u \rangle$$

es decir $P = P^\dagger$. Por otra parte para todo $|u\rangle \in \mathbb{C}^N$

$$P^2 |u\rangle = P P |u\rangle = P |u_1\rangle = P |u\rangle$$

y por tanto $P^2 = P$. Supongamos que P cumple las condiciones (1P.1), veamos que es un proyecton. Todo $|u\rangle \in \mathbb{C}^N$ se puede escribir como $|u\rangle = P |u\rangle + (I - P) |u\rangle$, donde $P |u\rangle \in R(P)$. Veamos que $(I - P) |u\rangle \in \mathbb{C}^N - R(P)$, en efecto

$$\langle P |u\rangle | (I - P) |u\rangle \rangle = \langle u | P (I - P) |u\rangle \rangle = \langle u | P - P^2 |u\rangle \rangle = 0$$

y por tanto P es un proyecton sobre $R(P)$.

Notan que si P es un proyecton

$$I \geq P \geq 0 \tag{1}$$

Em efecto por ser P un proyecton $\langle u | P |u\rangle = \langle u | P P |u\rangle = \langle P |u\rangle | P |u\rangle \rangle \geq 0$ y como $(I - P)$ es tambien un proyecton $\langle u | (I - P) |u\rangle \geq 0$ y (1) se sigue.

Nota 18 - Continuemus pensando en \mathbb{C}^N . Consideremos un operador A , si existe al menos un elemento $|u\rangle \in \mathbb{C}^N$, no nulo, tal que

$$(A - \lambda I) |u\rangle = 0 \tag{2}$$

entonces se dice que el número complejo λ es un valor propio de A . Dado un valor propio λ de A , el conjunto de todos los $|u\rangle \neq 0$ para los que (2) se satisface se denominan los elementos propios o vectores propios de A correspondientes al valor propio λ y forman un subespacio. Si este subespacio es de dimensión r se dice que λ es r veces degenerado. Notan que los valores propios vienen dados por las N raíces de la ecuación secular

$$\det | A_{ij} - \lambda \delta_{ij} | = 0 \tag{3}$$

Nota 19. - Veamos algunas propiedades de los valores propios de un operador A definido en \mathcal{H}^N .

i) Si A es un operador normal (i.e. $AA^* = A^*A$) y $(A - \lambda I)\mu = 0$ con $\mu \neq 0$ entonces $(A^* - \lambda^* I)\mu = 0$

En efecto

$$0 = \|(A - \lambda I)\mu\|^2 = \langle (A - \lambda I)\mu | (A - \lambda I)\mu \rangle = \langle \mu | (A^* - \lambda^* I)(A - \lambda I)\mu \rangle = \\ = \langle \mu | (A^* - \lambda^* I)(A^* - \lambda^* I)\mu \rangle = \langle (A^* - \lambda^* I)\mu | (A^* - \lambda^* I)\mu \rangle = \|(A^* - \lambda^* I)\mu\|^2$$

que es lo que se quería demostrar.

ii) Si A es normal los elementos propios correspondientes a valores propios distintos son ortogonales

En efecto si $\lambda_1 \neq \lambda_2$ son valores propios entonces existen elementos μ_1 y μ_2 , no nulos, tales que $A\mu_1 = \lambda_1\mu_1$ y $A\mu_2 = \lambda_2\mu_2$. Se tiene entonces

$$\lambda_1 \langle \mu_2 | \mu_1 \rangle = \langle \mu_2 | A\mu_1 \rangle = \langle A^*\mu_2 | \mu_1 \rangle = \langle \lambda_2^* \mu_2 | \mu_1 \rangle = \lambda_2^* \langle \mu_2 | \mu_1 \rangle$$

de donde $\langle \mu_2 | \mu_1 \rangle = 0$ que es lo que queríamos probar

iii) Si $A = A^*$ los valores propios son reales y los elementos propios correspondientes a valores propios distintos son ortogonales. Esto es consecuencia inmediata de las propiedades i) y ii)

iv) Si $UU^* = U^*U = I$ entonces es inmediato ver que todos los valores propios son de módulo uno y que los vectores propios correspondientes a valores propios distintos son ortogonales

Nota 20 - Todo lo mencionado Notas 17, 18 y 19 se puede extender, en general, a espacios de Hilbert arbitrarios si bien se debe tener sumo cuidado en el hecho de que los operadores pueden no ser acotados y que su dominio de definición y su dominio de valores no coinciden, en general, con todo el espacio de Hilbert. Así por ejemplo consideremos un operador A , se puede probar que si $\overline{D(A)} = H$ entonces existe el operador adjunto A^* :

$$\langle \varphi | A\psi \rangle = \langle A^*\varphi | \psi \rangle \quad \text{para } \forall \psi \in D(A), \forall \varphi \in D(A^*) \quad (1)$$

Nota 19'. Si A es un operador autoadjunto, consideremos sus valores propios a_m ($m \leq N$) y denotemos por $|a_{mi}\rangle$ los vectores propios correspondientes al valor propio a_m , donde $i=1, 2, \dots, d(m)$. Tiene en cuenta la posible degeneración. Siempre se puede elegir

$$\langle a_{im} | a_{jm} \rangle = \delta_{ij} \delta_{mm} \quad (1)$$

y entonces los $\{|a_{im}\rangle\}$ forman una base y se puede introducir la resolución o descomposición espectral de A que se escribe

$$A = \sum_m \sum_{i=1}^{d(m)} a_m |a_{mi}\rangle \langle a_{mi}| \quad (2)$$

Definiendo el proyector correspondiente a a_m como

$$E(a_m) \equiv \sum_{i=1}^{d(m)} |a_{mi}\rangle \langle a_{mi}| \quad (3)$$

se puede escribir

$$A = \sum_m a_m E(a_m) \quad (4)$$

La descomposición espectral permite definir una función de un operador A a través de

$$f(A) = \sum_m f(a_m) E(a_m) \quad (5)$$

Nota 19''. Si $f(x)$ es tal que se pueda escribir

$$f(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} f^{(m)}(0) x^m \quad (6)$$

y si A es un operador arbitrario se define $f(A)$ mediante

$$f(A) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} f^{(m)}(0) A^m \quad (7)$$

Se define el commutador de dos operadores como

$$[A, B] \equiv AB - BA \quad (8)$$

Notar que si $[A, B] = 0$ entonces

$$e^{A+B} = e^A e^B \quad \text{si } [A, B] = 0 \quad (9)$$

Ejemplo. Un operador A autoadjunto en \mathbb{Q}^3 es

$$A = \begin{vmatrix} 3/2 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 3/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad (1)$$

Sus valores propios son

$$a_1 = 2 \quad d(1) = 1 \quad |a_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{vmatrix} \quad (2)$$

$$a_2 = 1 \quad d(2) = 2 \quad |a_{21}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{vmatrix}, \quad |a_{22}\rangle = \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{vmatrix}$$

$$E(a_1) = |a_1\rangle\langle a_1| = \begin{vmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad E(a_2) = \sum_{i=1}^2 |a_{2i}\rangle\langle a_{2i}| = \begin{vmatrix} 1/2 & -1/2 & 0 \\ -1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad (3)$$

$$A = 2E(a_1) + E(a_2) \quad (4)$$

Consideremos una segunda matriz autoadjunta

$$B = \begin{vmatrix} 2 & -1 & -1/\sqrt{2} \\ -1 & 2 & 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 3 \end{vmatrix} \quad [A, B] = 0$$

Se tiene que

$$b_1 = 1 \quad |b_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{vmatrix} \quad d(1) = 1$$

$$b_2 = 2 \quad |b_2\rangle = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 \\ -1 \\ \sqrt{2} \end{vmatrix} \quad d(2) = 1$$

$$b_3 = 4 \quad |b_3\rangle = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 \\ -1 \\ -\sqrt{2} \end{vmatrix} \quad d(3) = 1$$

como

$$|a_1\rangle = |b_1\rangle, \quad |a_{21}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|b_2\rangle + |b_3\rangle), \quad |a_{22}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|b_2\rangle - |b_3\rangle)$$

entonces $\{|b_i\rangle\}$ es una base de vectores propios comunes a A y B. Mitan

que

$$A = 2|b_1\rangle\langle b_1| + |b_2\rangle\langle b_2| + |b_3\rangle\langle b_3|$$

$$B = |b_1\rangle\langle b_1| + 2|b_2\rangle\langle b_2| + 4|b_3\rangle\langle b_3|$$

y

$$A = \frac{1}{3} B^2 - 2B + \frac{11}{3} I$$

Se dice que A es simétrico o hermítico si $A \subseteq A^+$ y solo decimos que es autoadjunto si $A = A^+$. En general no distinguiremos entre operadores simétrico y autoadjuntos, así bien la distinción es muy importante.

Dado A y $\lambda \in \mathbb{F}$, se dice que λ pertenece al conjunto resolvente $\rho(A)$ si: $R(A - \lambda I) = H$, existe $(\lambda I - R)^{-1} \equiv R_\lambda(A)$ (operador resolvente de A en λ) y es acotado. El conjunto $\rho(A)$ es abierto. Su complemento $\mathbb{F} - \rho(A) \equiv \sigma(A)$ es cerrado, y se denomina espectro de A . Se puede probar que si A es un operador autoadjunto, $A^+ = A$, entonces se puede probar que

$$\sigma(A) = \sigma_p(A) \cup \sigma_c(A) \subset \mathbb{R} \qquad \sigma_p(A) \cap \sigma_c(A) = \emptyset$$

$$\sigma_p(A) = \text{espectro puntual} \qquad \sigma_c(A) = \text{espectro continuo}$$

Para los puntos $\lambda \in \sigma_p(A)$ la ecuación $(A - \lambda I)|\psi\rangle = 0$ tiene solución no nula $|\psi\rangle \in H$; λ diése valor propio de A y $|\psi\rangle$ vector propio. Si $\lambda \in \sigma_c(A)$ entonces $R(\lambda - IA) = H$, existe $R_\lambda(A)$ y este operador no es acotado. En este caso no es posible hallar un $|\psi\rangle \in H$ tal que $(A - \lambda I)|\psi\rangle = 0$. Para un operador autoadjunto se puede probar que si además es completamente continuo, esto es si transforma todo conjunto acotado en un conjunto compacto, entonces el espectro $\sigma(A) = \sigma_p(A)$, pues $\sigma_c(A) = \emptyset$. Esto es lo que sucede para todas los operadores autoadjuntos definidos en $H = \mathbb{F}^N$. En el caso de operadores autoadjuntos completamente continuos en los que ya hemos dicho que $\sigma(A) = \sigma_p(A)$, se puede probar que el conjunto $\{|\lambda_m; \alpha\rangle\}$ caracterizado por

$$A |\lambda_m; \alpha\rangle = \lambda_m |\lambda_m; \alpha\rangle \tag{2}$$

donde $\lambda_m \in \sigma_p(A)$ y α indica un índice para caracterizar la posible degeneración del vector propio λ_m se puede elegir siempre ortonormal y probar que es completo.

Esto es para todo $|\psi\rangle \in H$

$$|\psi\rangle = \sum_{\lambda_m \in \sigma_p(A)} \sum_{\alpha \in I(\lambda_m)} \langle \lambda_m; \alpha | \psi \rangle |\lambda_m; \alpha\rangle \tag{3}$$

donde $I(\lambda_m)$ nos indica la multiplicidad de λ_m . (*)

Nota 21.- Consideremos lo que puede suceder en casos de operadores autoadjuntos no completamente continuos, y para ello consideraremos el operador

37/001

(*) Para operadores autoadjuntos compactos (o completamente continuos) se puede probar que todo valor propio no nulo tiene multiplicidad finita, que sólo el 0 puede tener a lo sumo multiplicidad numerable infinita, que el espectro puntual es discreto, salvo a lo sumo con el 0 como punto de acumulación.

$P \equiv -i \frac{d}{dx}$ definido en $L_{\infty}^2 \equiv L^2(-\infty, +\infty)$ con dominio

$$D(P) = \left\{ \psi \in L_{\infty}^2 : \psi \text{ absolutamente continua, } \int_{\mathbb{R}} dx |\frac{d\psi(x)}{dx}|^2 < \infty \right\} \quad (1)$$

que contiene al conjunto $C_0^{\infty}(\mathbb{R})$ de funciones infinitamente derivables con soporte compacto, y es, por tanto, denso en L_{∞}^2 . Ya hemos visto en la Nota 15 que P no es acotado. Es fácil probar que P es simétrico ($P \subseteq P^{\dagger}$) pues para todo par de funciones $\psi, \varphi \in D(P)$ se cumple

$$\langle \psi | P | \varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \psi^*(x) \left(-i \frac{d\varphi(x)}{dx} \right) = \int_{\mathbb{R}} dx \left(-i \frac{d\psi(x)}{dx} \right)^* \varphi(x) = \langle P \psi | \varphi \rangle \quad (2)$$

donde se ha usado a modo una integración por partes y utilizado que, con la caracterización (1) de $D(P)$, ψ, φ se anulan en los límites $-\infty, +\infty$ del intervalo de integración. Para probar que P es autoadjunto bastará demostrar que $D(P^{\dagger}) \subseteq D(P)$. En efecto considérese una función $\psi \in D(P^{\dagger})$ y defínase $\psi_1 = P^{\dagger} \psi$; entonces

$$\langle \psi | P | \varphi \rangle = \langle \psi_1 | \varphi \rangle, \quad \forall \varphi \in D(P) \quad (3)$$

se puede escribir

$$\langle \psi | P | \varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \psi_1^*(x) \varphi(x) = i \int_{\mathbb{R}} dx \left\{ \frac{d}{dx} \left[i \int_0^x dt \psi_1(t) + C \right]^* \right\} \varphi(x)$$

donde C es una constante arbitraria. Eslogiendo $\varphi \in C_0^{\infty}(\mathbb{R})$, integrando por partes y teniendo en cuenta que φ se anula fuera de un intervalo finito, se obtiene

$$\int_{\mathbb{R}} dx \left[\psi(x) - i \int_0^x dt \psi_1(t) - C \right]^* \left[-i \frac{d\varphi(x)}{dx} \right] = 0, \quad \forall \varphi \in C_0^{\infty}(\mathbb{R}) \quad (4)$$

y por ser C_0^{∞} denso en L_{∞}^2 , el primer factor de (4) debe ser constante y, por tanto, con una elección conveniente C_0 de C se puede escribir así cualquiera que

$$\psi(x) = C_0 + i \int_0^x dt \psi_1(t) \quad (5)$$

de donde $\psi_1(x) = -i \frac{d\psi(x)}{dx}$. Con esto ha quedado probado que $D(P^{\dagger}) \subseteq D(P)$ y que $P = P^{\dagger}$, es decir el operador considerado es autoadjunto.

La ecuación correspondiente a (19.2) para este operador es

$$(P\psi)(x) = -i \frac{d\psi(x)}{dx} = \lambda \psi(x) \quad \lambda = \lambda^* \quad (1)$$

La solución de esta ecuación es

$$\psi_\lambda(x) = N e^{i\lambda x} \quad (2)$$

donde N es una constante arbitraria no-nula. Esta función $\psi_\lambda(x) \notin L^2_{\infty}$ y por tanto para este operador el espectro puntual σ_p es vacío, y no tenemos una expresión equivalente a (21.3) en el marco de los espacios de Hilbert.

Nota 22. - Una cosa análoga sucede con el operador \tilde{X} definido en L^2_{∞} por

$$(\tilde{X}\psi)(x) = x\psi(x) \quad (3)$$

con dominio

$$D(\tilde{X}) = \left\{ \psi \in L^2_{\infty} : \int_{\mathbb{R}} dx x^2 |\psi(x)|^2 < \infty \right\} \quad (4)$$

que es denso en L^2_{∞} . El operador \tilde{X} es simétrico ($\tilde{X} \subseteq \tilde{X}^+$), puesto que para todo par de funciones $\psi, \varphi \in L^2_{\infty}$ se cumple

$$\langle \psi | \tilde{X} | \varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \psi^*(x) x \varphi(x) = \int_{\mathbb{R}} dx [x \psi(x)]^* \varphi(x) = \langle \tilde{X}\psi | \varphi \rangle \quad (5)$$

Una forma de probar que \tilde{X} es también autoadjunto es demostrar que $D(\tilde{X}^+) \subseteq D(\tilde{X})$. Considerese una función $\psi \in D(\tilde{X}^+)$ y definamos $\psi_1 = \tilde{X}^+ \psi$; entonces

$$\langle \psi | \tilde{X} | \varphi \rangle = \langle \psi_1 | \varphi \rangle, \quad \forall \varphi \in D(\tilde{X}) \quad (6)$$

Luego

$$\int_{\mathbb{R}} dx [x \psi^*(x) - \psi_1^*(x)] \varphi(x) = 0 \quad \forall \varphi \in D(\tilde{X}) \quad (7)$$

Como $D(\tilde{X})$ es denso en L^2_{∞} , (7) exige que, casi doquiera, $\psi_1(x) = x\psi(x)$. Por tanto, $\psi \in D(\tilde{X})$ y $\psi_1 = \tilde{X}\psi$, con lo cual el carácter autoadjunto de \tilde{X} ha quedado probado.

La ecuación correspondiente a (19.2) para este operador es

$$(\mathcal{L}\psi)(x) = x\psi(x) = \lambda\psi(x)$$

$$\lambda = x^2$$

(1)

que no tiene ninguna solución en L^2_{∞} y por tanto $\sigma_p(\mathcal{L}) = \emptyset$ y de nuevo no se puede hallar en este caso una expresión del tipo (21.3)

Nota 23. Sería deseable disponer de generalizaciones de (21.3) que fueran válidas para operadores autoadjuntos A no necesariamente compactos. Veremos que esto puede lograrse, en algún sentido a especificar más adelante, introduciendo una generalización del concepto de función: las distribuciones, concepto introducido rigurosamente por L. Schwartz en 1957, pero usado por los físicos desde finales del siglo XIX. No pretendemos hacer ninguna introducción rigurosa de las distribuciones. Uno de los ejemplos más simples de distribuciones es la de Heaviside

$$\theta(x-a) = \begin{cases} 1 & x > a \\ 0 & x < a \end{cases} \quad (2)$$

Esta es la llamada función de Heaviside o función paso. Usaremos la palabra "función" pero en realidad no es ninguna función sino una distribución.

Nota 24. Sea $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ se define su Transformada de Fourier como

$$(F\psi)(k) = \hat{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x) e^{-ikx} \quad (3)$$

Se puede probar que esta transformación integral transforma funciones de $L^2(\mathbb{R})$ en funciones de $L^2(\mathbb{R})$. Además su inversa existe y viene dada por

$$\psi(x) = (F^{-1}\hat{\psi})(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \hat{\psi}(k) e^{ikx} \quad (4)$$

En general si $\psi(x)$ es una función totalmente arbitraria (3) y (4) carecen de sentido en $L^2(\mathbb{R})$, sin embargo en el marco de la teoría de distribuciones se puede dar sentido mucho más amplio a estas transformaciones.

Nota 25. - Consideremos (24.4) y tomemos $\hat{f}(k) = 1/\sqrt{2\pi}$. Para dar sentido a esta integral la suponemos extendida al intervalo $[-K, +K]$ y despues tomamos el límite $K \rightarrow \infty$

$$\frac{1}{2\pi} \lim_{K \rightarrow \infty} \int_{-K}^{+K} dx e^{ikx} = \lim_{K \rightarrow \infty} \frac{\sin Kx}{\pi x} = \delta(x) \tag{1}$$

donde $\delta(x)$ es la llamada distribución o función delta de Dirac y se escribe

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ikx} \tag{2}$$

En realidad el límite de (1) no existe en el espacio de funciones y (1) y (2) carecen de sentido. Las distribuciones escritas de esta forma carecen de sentido y solo pueden usarse en expresiones integrales. En realidad la definición correcta es

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x-a) \varphi(x) = \varphi(a) \tag{3}$$

donde $\varphi(x)$ es una función de prueba suficientemente regular. Teniendo en cuenta que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\sin \mu x}{\pi x} = 1, \quad \forall \mu > 0 \tag{4}$$

es evidente, de (3), que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x) = 1 \tag{5}$$

de acuerdo con (4). Se puede pensar la $\delta(x)$ como una función tal que $\delta(0) = \infty$ y $\delta(x \neq 0) = 0$ y que cumple (5).

Nota 26. - Propiedades importantes y fácilmente demostrables de la $\delta(x)$ son

i) $\delta(-x) = \delta(x)$ (6)

ii) $x \delta(x) = 0$ (7)

iii) $\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$ (8)

iv) $\delta[f(x)] = \sum_{i=1}^N \frac{1}{|f'(x_i)|} \delta(x-x_i)$ (9)
 donde x_i son las raíces reales simples de $f(x) = 0$

$$v) \int_{-b}^{+a} dx \delta(x-a) \delta(x-b) = \delta(a-b) \quad (1)$$

$$vi) \varphi(x) \delta(x-y) = \varphi(y) \delta(x-y) \quad (2)$$

La delta de Dirac aparece con frecuencia en las aplicaciones como distribución límite de una sucesión de funciones. Así por ejemplo

$$\delta(x) = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{\sin \lambda x}{\pi x} \quad (3)$$

$$= \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \sqrt{\lambda/\pi} e^{-\lambda x^2} \quad (4)$$

$$= \lim_{\epsilon \neq 0} (\pi \epsilon^2)^{-1/2} e^{-x^2/\epsilon^2} \quad (5)$$

$$= \lim_{\epsilon \neq 0} \frac{\epsilon}{\pi} \frac{1}{x^2 + \epsilon^2} \quad (6)$$

Nota 27.- En física aparecen frecuentemente otras distribuciones. Ya hemos mencionado antes la función de Heaviside $\Theta(x)$ (24.2), que cumple

$$\frac{d}{dx} \Theta(x-a) = \delta(x-a) \quad (7)$$

Se pueden definir la derivada n-ésima de $\delta(x-a)$ como

$$\int_{-b}^{+a} dx \delta^{(n)}(x-a) \varphi(x) = (-1)^n \varphi^{(n)}(a) \quad (8)$$

Si definimos la parte principal

$$P \int_{-a}^{+a} dx \frac{1}{x} f(x) = \lim_{\epsilon \neq 0} \int_{|x| \geq \epsilon} dx \frac{1}{x} f(x) \quad (9)$$

entonces

$$\lim_{\epsilon \neq 0} \frac{1}{x \pm i\epsilon} = P \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x) \quad (10)$$

Notar que si bien toda distribución es infinitamente derivable, hay operaciones inexistentes. Por ejemplo $\delta(x) \cdot \delta(x)$ no está definida dentro del marco de la teoría de distribuciones.

Nota 28 - Usando estas propiedades es fácil comprobar (24.4)

$$\begin{aligned} (\mathcal{F}^{-1} \hat{\psi})(x) &:= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \hat{\psi}(k) e^{ikx} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ikx} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \psi(y) e^{-iky} = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dy \psi(y) \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ik(x-y)} = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \psi(y) \delta(x-y) = \psi(x) \end{aligned}$$

Nota 29 - Supongamos dos funciones $\psi(x)$ y $\varphi(x)$ y sus transformadas de Fourier $\hat{\psi}(k)$ y $\hat{\varphi}(k)$. Se tiene

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \hat{\psi}^*(k) \hat{\varphi}(k) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \psi^*(x) e^{+ikx} \varphi(y) e^{-iky} = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \psi^*(x) \varphi(y) \delta(x-y) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \varphi(x) \end{aligned} \quad (1)$$

y por tanto la transformada de Fourier mantiene los productos escalares

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \langle \hat{\psi} | \hat{\varphi} \rangle \quad (2)$$

Nota 30 - En las Notas 22 y 21 hemos estudiado los operadores \hat{X} y D y hemos probado que para ambos $\sigma_p = \emptyset$. Consideremos de nuevo las ecuaciones

$$(\hat{X} \psi)(x) = a \psi(x) \quad (3)$$

$$(\hat{P} \psi)(x) = p \psi(x)$$

que no tenían soluciones dentro de $L^2(\mathbb{R})$, pero que sí tienen soluciones en el marco de la teoría de distribuciones

$$\psi_a(x) = \delta(x-a) \quad (4)$$

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx}$$

Con las normalizaciones elegidas

$$\langle a | a' \rangle = (\psi_a, \psi_{a'}) = \delta(a-a') \quad (5)$$

$$\langle p | p' \rangle = (\psi_p, \psi_{p'}) = \delta(p-p')$$

que son generalizaciones de las expresiones que expresan las propiedades de ortogonalización de los vectores propios en el caso del espacio puntual. Ahora podemos escribir

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda \psi(\lambda) \delta(x-\lambda) \quad (1)$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda \hat{\psi}(\lambda) e^{i\lambda x}$$

que no son más que las generalizaciones de (21.3) para el espectro continuo. A la vista de esto surge de forma natural la cuestión de si para cualquier operador autoadjunto A y para cualquier $|\psi\rangle \in H$ podemos escribir

$$|\psi\rangle = \sum_{\lambda_n \in \sigma_p(A)} \sum_{\alpha \in I(\lambda_n)} |\lambda_n; \alpha\rangle \langle \lambda_n; \alpha | \psi\rangle + \int_{\sigma_c(A)} d\lambda \sum_{\alpha \in I(\lambda)} |\lambda; \alpha\rangle \langle \lambda; \alpha | \psi\rangle \quad (2)$$

donde $|\lambda_n; \alpha\rangle$, $\alpha \in I(\lambda_n)$ es una base ortonormal en el subespacio propio $M_{\lambda_n}(A) \subseteq H$ de dimensión el cardinal $\text{card } I(\lambda_n)$; y $|\lambda; \alpha\rangle$, $\alpha \in I(\lambda)$, es una base ortonormal en el "subespacio" propio generalizado correspondiente a $\lambda \in \sigma_c(A)$ y de dimensión $\text{card } I(\lambda)$. La respuesta a esta pregunta es afirmativa para todo operador autoadjunto que carezca de espectro singularmente continuo.

Nota 30 - En este sentido generalizado se tiene

$$\sum_{\lambda_n \in \sigma_p(A)} \sum_{\alpha \in I(\lambda_n)} |\lambda_n; \alpha\rangle \langle \lambda_n; \alpha| + \int_{\sigma_c(A)} d\lambda \sum_{\alpha \in I(\lambda)} |\lambda; \alpha\rangle \langle \lambda; \alpha| = I \quad (3)$$

Nota 31 - En problemas de física unidimensionales el operador \hat{X} se identifica con el operador posición y sus estados propios vienen determinados por la ecuación

$$\hat{X}|x\rangle = x|x\rangle \quad (4)$$

donde x tiene dimensiones de longitud y $x \in \mathbb{R}$. Sea $|\psi\rangle$ un elemento del espacio de Hilbert se define su representación en el espacio de las posiciones

como

$$\psi(x) \equiv \langle x | \psi \rangle \quad (1)$$

Notan que esto es consistente pues

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

donde hemos usado (28.3), esto es

$$\int_{-a}^{+a} dx |x\rangle \langle x| = I \quad (3)$$

El operador

$$P = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (4)$$

se identifica con el operador momento siendo \hbar la constante de Planck reducida ($\hbar \equiv h/2\pi$), lo cual hace que P tenga las dimensiones correctas del momento.

En la representación de momentos

$$\hat{\psi}(p) \equiv \langle p | \psi \rangle = \int_{-a}^{+a} dx \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-a}^{+a} dx e^{-ipx/\hbar} \psi(x) \quad (5)$$

ya que

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad (6)$$

Definición 29. - Se llama operador integral de Hilbert-Schmidt a un operador lineal, K , tal que hace corresponder ~~de~~ toda función $f(x) \in L^2(\mathbb{R})$ una función $g(x)$ definida por

$$g(x) \equiv \int_{\mathbb{R}} dy K(x, y) f(y) \quad (1)$$

y además

$$\int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} dx dy |K(x, y)|^2 < \infty \quad (2)$$

Entonces se puede probar que $g(x) \in L^2(\mathbb{R})$ y que el operador K es acotado. Es fácil ver que la condición que asegura que K es autoadjunto es

$$K(x, y) = K^*(y, x) \quad (3)$$

II.- CONCEPTOS BÁSICOS Y AXIOMÁTICA DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

Postulado I : A cada sistema físico que se pretenda describir en el marco de la Mecánica Cuántica se le hace corresponder un espacio de Hilbert completo y separable. Un estado puro de este sistema físico en un instante de tiempo t se representa por un rayo unidad $|\Psi(t)\rangle_R$ en el espacio de Hilbert correspondiente. Un elemento $|\Psi(t)\rangle$ del rayo $|\Psi(t)\rangle_R$ se llamará vector estado o ket.

Los estados puros son aquellos para los que tenemos la información máxima posible, si preparamos un sistema cuántico controlando el mayor número posible de observables compatibles independientes (preparación maximal), obtendremos así un estado para el sistema del que disponemos de la mayor información cuántica posible. Tal estado recibe el nombre de estado puro; en caso contrario, cuando la preparación no es maximal, se hablará de estado mezcla y estudiaremos su caracterización matemática más adelante.

Fijado un conjunto maximal de magnitudes compatibles, se pueden preparar el sistema en ciertos estados puros que, según veremos más adelante, están representados por kets ortogonales y forman una base ortogonal completa para el espacio de Hilbert del sistema. Tomando otro conjunto maximal para la preparación de estados puros, éstos estarán, pues, representados por kets combinación lineal de los anteriores. No significa esto, sin embargo, que cualquier vector unidad de este espacio de Hilbert represente un estado puro del sistema. Esto será únicamente cierto si no existen reglas de selección que restrinjan la validez del principio de superposición lineal. Si $|\psi_1\rangle$ y $|\psi_2\rangle$ son dos vectores, representativos de estados puros distintos, y hacemos su superposición lineal $|\psi\rangle = \alpha_1 |\psi_1\rangle + \alpha_2 |\psi_2\rangle$, $|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 = 1$, no podemos a priori asegurar que $|\psi\rangle$ represente un estado puro, si $\alpha_1, \alpha_2 \neq 0$, pues para ello sería necesario que existiera una preparación maximal que lo preparara. Hay al menos dos cantidades $Q = \sum_{i=1}^N q_i$, donde q_i es la carga, y $(-1)^S$ donde $S = \sum_{i=1}^N s_i$, siendo s_i el spin de la partícula i , que se conservan rigurosamente en cualquier proceso físico. No existen por tanto sistemas en un estado puro que sean superposición lineal de estados con números cuánticos de selección distintos. Una vez fijado el sistema físico $(-1)^S$ y el sistema definidos

y el espacio se llama espacio de Hilbert coherente. Dentro de un espacio de Hilbert coherente la correspondencia $\text{estado} \leftrightarrow \text{estado puro es biunívoca}$.

Al realizar una medida de una cierta magnitud física se obtiene un resultado que se expresa mediante un número real y unas ciertas unidades. En los espacios de Hilbert los operadores con espectro real son los operadores autoadjuntos. Esto conduce a

Postulado II - Cada observable de un sistema físico se representa en el formalismo matemático de la Mecánica cuántica mediante un operador lineal autoadjunto que actúa en el espacio de Hilbert del sistema físico considerada

La justificación de este postulado viene dada por la interpretación estadística de la medición en el contexto del formalismo.

Postulado III - Si un sistema físico se encuentra en un estado puro descrito por un vector normalizado $|\psi\rangle$, entonces la probabilidad de que al medir un observable A resulte un valor λ perteneciente a un intervalo de valores $\Delta \in \mathbb{R}$ viene dada por

$$P_{A,\psi}(\Delta) = \sum_{a_n \in \Delta} \sum_{i=1}^{d(a_n)} |\langle a_{ni} | \psi \rangle|^2 \quad (1)$$

$$= \int_{\Delta \cap \sigma_c(A)} dA \sum_{a \in I(a)} |\langle a; \alpha | \psi \rangle|^2 \equiv \langle \psi | E(\Delta) | \psi \rangle$$

Es obvio que

$$P_{A,\psi}(\mathbb{R}) = 1 \quad (2)$$

Si a pertenece al espectro continuo de A entonces se define una densidad de probabilidad

$$P_{A,\psi}(a) = \lim_{\Delta a \rightarrow 0} P_{A,\psi}(\{A^i : |a^i - a| < \Delta a/2\}) = \sum_{a \in I(a)} |\langle a; \alpha | \psi \rangle|^2 \quad (3)$$

Con este postulado hemos abandonado el determinismo en el proceso de medida: con un estado totalmente determinado y un observable perfectamente definido no se obtiene, en general, un resultado bien determinado sino una distribución probabi-

lista de resultados posibles

Consideremos un sistema físico en el estado puro descrito por el vector normalizado $|\psi\rangle$, entonces de acuerdo con lo dicho, el valor medio o esperado de A en el estado $|\psi\rangle$ viene dado por

$$\langle A \rangle_\psi = \sum_{a_m} a_m P_{A,\psi}(a_m) \quad (1)$$

donde para simplificar la notación hemos supuesto que A tiene solo espectro puntual.

Entonces

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_\psi &= \sum_{a_m} a_m \sum_{i=1}^{d(a_m)} | \langle a_{m,i} | \psi \rangle |^2 = \sum_{m,i} a_m \langle \psi | a_{m,i} \rangle \langle a_{m,i} | \psi \rangle = \\ &= \sum_{m,i} \langle \psi | a_{m,i} \rangle \langle a_{m,i} | A | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \end{aligned} \quad (2)$$

La dispersión cuadrática media o indeterminación del observable A en el estado puro representado por el vector normalizado $|\psi\rangle$ se define como

$$\begin{aligned} \Delta_\psi A &\equiv \left[\langle \psi | (A - \langle A \rangle_\psi)^2 | \psi \rangle \right]^{1/2} = \\ &= \left[\langle \psi | A^2 | \psi \rangle - \langle \psi | A | \psi \rangle^2 \right]^{1/2} = \| (A - \langle A \rangle_\psi) | \psi \rangle \| \end{aligned} \quad (3)$$

Es evidente que $\Delta_\psi A = 0$ si y solo si $(A - \langle A \rangle_\psi) | \psi \rangle = 0$ y por tanto

$\Delta_\psi A = 0$ si y solo si $|\psi\rangle$ es un estado propio del operador A . Esto es así si existe un a_m tal que

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{d(a_m)} c_i | a_{m,i} \rangle \quad (4)$$

Consideremos dos observables A y B y un estado puro caracterizado por un vector normalizado $|\psi\rangle$. Introduzcamos

$$A' \equiv A - \langle A \rangle_\psi, \quad B' \equiv B - \langle B \rangle_\psi \quad (5)$$

entonces

$$\| (A' + i\lambda B') | \psi \rangle \|^2 \geq 0 \quad \forall \lambda \in \mathbb{R} \quad (6)$$

que implica

$$\langle \psi | (A' - i\lambda B') (A' + i\lambda B') | \psi \rangle = \langle \psi | A'^2 + \lambda^2 B'^2 + i\lambda [A', B'] | \psi \rangle \geq 0 \quad (7)$$

y como $[A', B'] = [A, B]$ se obtiene

$$(\Delta_\psi A)^2 + \lambda^2 (\Delta_\psi B)^2 - \lambda \langle \psi | i[A, B] | \psi \rangle \geq 0 \quad \forall \lambda \in \mathbb{R} \quad (1)$$

Notar que como $i[A, B]$ es autoadjunto $\langle \psi | i[A, B] | \psi \rangle$ es real. Para que (1) se cumpla para todo λ

$$\langle \psi | i[A, B] | \psi \rangle^2 - 4(\Delta_\psi A)^2 (\Delta_\psi B)^2 \geq 0$$

que puede escribirse como

$$\Delta_\psi A \cdot \Delta_\psi B \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | i[A, B] | \psi \rangle| \quad (2)$$

Esta desigualdad se conoce con el nombre de relación de indeterminación y es la expresión matemática del principio de indeterminación de Heisenberg

Respecto de la relación de indeterminación, podemos preguntarnos cuándo, dados dos observables A, B existe una base ortonormal de vectores libres de dispersión simultáneamente para A y para B . Como tales vectores han de ser propios de A y B , si ambos operadores A, B son acotados y de espectros puramente puntuales es fácil ver que existirá dicha base si y sólo si esta base diagonaliza a la vez a ambos operadores, esto es, si $[A, B] = 0$. En tal caso diremos que A, B son observables compatibles. En general diremos que dos observables son compatibles si:

$$[A, B] = 0 \quad (3)$$

Consideremos un sistema físico y un observable A del mismo; según lo dicho, los vectores propios de A , $\{|a; \alpha\rangle\}$, forman un conjunto ortonormal completo, siendo $A|a; \alpha\rangle = a|a; \alpha\rangle$. En general, algunos de los subespacios $M_a(A)$ engendrados por todos los vectores propios $|a; \alpha\rangle$, un a fijo, tendrán dimensión mayor que uno. Teniendo en cuenta lo anteriormente expuesto, dado otro observable B que commute con A , existirá una base común $\{|a, b; \beta\rangle\}$ con $A|a, b; \beta\rangle = a|a, b; \beta\rangle$ y $B|a, b; \beta\rangle = b|a, b; \beta\rangle$. Si los espacios M_{ab} engendrados a partir de $|a, b; \beta\rangle$, un a y b fijos, son todos ellos ya unidimensionales, el parámetro β es superfluo y escribiremos la base como $\{|a, b\rangle\}$. Cuando esto ocurra diremos que los observables A, B forman un conjunto completo de observables que conmutan (CCOC) y en este caso el conjunto de los vectores propios simultáneos de A, B forman una base ortonormal única. Al decir única se entiende que cada elemento de la base queda fijado salvo una fase. Si estos observables A, B no tienen una base ortonormal común, es decir, si alguno

de los subespacios $M_{a,b}$ es de dimensión mayor que uno, entonces es posible que exista un tercer observable C , compatible con A, B , de forma que C permita distinguir vectores con los mismos números cuánticos a, b . Si este procedimiento puede repetirse tanto como haga falta, llegaremos a un conjunto de observables compatibles A, B, C, \dots tales que los subespacios $M_{a,b,c,\dots}$ sean unidimensionales. Para un sistema físico se dice que el sistema de observables A, B, C, \dots forman un C.C.O.C. si:

- i) Los operadores correspondientes a estas observables son compatibles
- ii) La base formada por los vectores propios simultáneos es única, salvo fases
- iii) El sistema no es redundante, es decir ii) falla si se elimina algún observable del C.C.O.C.

En relación con el número de observables de un C.C.O.C. para un sistema físico dado, son la propia naturaleza de éste y las posibilidades experimentales las que dictan dicho número. Si, por ejemplo, se considera un electrón libre, las tres componentes $\{P_x, P_y, P_z\}$ del observable momento son compatibles, hecho que recogerá la teoría asociando operadores que conmutan dos a dos, y, por tanto, pueden formar parte de un C.C.O.C. El problema que se plantea es averiguar si este C.C.O.C. contiene algún otro observable que no sea función de P_x, P_y, P_z . En los primeros años de la Mecánica Cuántica se creía que no había ningún otro observable independiente en el sentido de que, dados los valores propios de P_x, P_y, P_z el estado quedaba totalmente fijado. La situación experimental (efecto Zeeman, estructura fina, etc) nos ha demostrado que esto no es cierto, y hoy día se sabe, en el caso de electrones, que los subespacios $M_{\vec{p}}$ son bidimensionales. Entonces un C.C.O.C. viene caracterizado no sólo por \vec{P} , sino también por una de las componentes, digamos S_z , de un operador anticommutante \vec{S} , que se llama spin y que no tiene análogo clásico. Como veremos más adelante, los valores propios de S_z , para electrones, son $\pm \hbar/2$. Fijado pues \vec{p} y S_z el vector propio común $|\vec{p}, S_z\rangle$ queda totalmente determinado, salvo normalización y fase. Sólo los desarrollos experimentales futuros nos permitirán afirmar si realmente $\{\vec{P}, S_z\}$ forman un C.C.O.C.

Considera el estado

$$|a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |+\rangle + |-\rangle \} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

Obrámené

$$P_{S_z, \alpha}^{(|\psi\rangle)} (\pm \hbar/2) = |\langle \pm 1 \alpha | \psi \rangle|^2 = 1/2 \quad (1)$$

Parece pues que este estado α está menos determinado que los estados $1 \rightarrow$ o $1 \rightarrow$ en los que conocíamos el resultado de esta medida con probabilidad uno. Esto no es así pues si hubiéramos medido $S_x^{(|\psi\rangle)}$ habríamos obtenido

$$P_{S_x, \alpha}^{(|\psi\rangle)} (1 \rightarrow \hbar/2) = |\langle 1 \rightarrow | \alpha \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (1, 1) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 = 1 \quad (2)$$

$$P_{S_x, \alpha}^{(|\psi\rangle)} (1 \leftarrow \hbar/2) = |\langle 1 \leftarrow | \alpha \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (1, -1) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 = 0$$

y el estado $|\alpha\rangle$ está totalmente determinado. Así es para todos los estados puros, es decir para todos los kets del espacio de Hilbert.

Ya hemos dicho repetidamente que si del estado de un sistema físico se tiene información maximal, es decir, si se ha hecho una preparación en la que se han fijado los valores de un C.C.O.C, se dice que el sistema se halla en un estado puro, que queda descrito mediante un vector normalizado $|\psi\rangle$, totalmente determinado salvo fase.

Para poder incluir en el desarrollo teórico estados sobre los que sólo se tiene una información parcial es necesario introducir los estados mezcla. Un ejemplo de un estado mezcla es aquel en el que se sabe que hay unas probabilidades $p_1, p_2, \dots, p_n, \dots$ de que el sistema se halla, respectivamente, en los estados puros representados por los vectores normalizados no paralelos $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_n\rangle, \dots$, ni necesariamente ortogonales. En realidad se puede probar que todo estado mezcla es de este tipo.

Para todo valor del índice i se debe cumplir $0 \leq p_i \leq 1$, y además $\sum_i p_i = 1$. Si

$p_n = 1$ y por tanto $p_i = 0 \quad \forall i \neq n$, entonces el estado mezcla no es más que un estado puro. Se puede demostrar que todo estado mezcla se puede describir mediante un operador o matriz densidad ρ definido por

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (3)$$

siendo p_i la probabilidad de que el sistema se halla en el estado $|\psi_i\rangle$. Este operador es autoadjunto

$$\rho = \rho^\dagger \quad (4)$$

y además es positivo

$$\rho \geq 0 \quad (5)$$

pues

$$\langle \psi | \rho | \psi \rangle = \sum_i p_i \langle \psi | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \psi \rangle = \sum_i p_i |\langle \psi | \psi_i \rangle|^2 \geq 0$$

Además

$$\text{Tr}(\rho) = 1 \quad (4)$$

pues

$$\text{Tr} \rho = \sum_{i,j} p_i \langle b_j | \psi_i \rangle \langle \psi_i | b_j \rangle = \sum_{i,j} p_i \langle \psi_i | b_j \rangle \langle b_j | \psi_i \rangle = \sum_i p_i \langle \psi_i | \psi_i \rangle = \sum_i p_i = 1$$

Además

$$\rho \geq \rho^2 \quad (2)$$

Como se puede ver utilizando la representación espectral. Al ser $\rho = \rho^\dagger$ existe su descomposición espectral

$$\rho = \sum_i p_i |p_i\rangle \langle p_i| \quad (1)$$

$$p_i \geq 0 \quad \forall i, \quad \sum_i p_i = 1$$

donde $\{|p_i\rangle$ es el espectro y $\{|p_i\rangle\}$ el conjunto ortonormal formado por los vectores propios. La desigualdad (2) es consecuencia directa de $p_i \geq p_i^2$

En el caso de estados puros la matriz densidad es de la forma

$$\rho_\psi = |\psi\rangle \langle \psi| \quad (5)$$

es decir probabilidad 1 de hallarse en el estado $|\psi\rangle$. En este caso

$$\rho_\psi^2 = \rho_\psi \quad (6)$$

Si $\rho^2 = \rho$ entonces ρ es un estado puro, pues en su descomposición espectral se tiene $p_i^2 = p_i \Rightarrow p_i = 0, 1$ y si $p_j = 1$ entonces $p_i = 0 \quad \forall i \neq j$ y $\rho = |p_j\rangle \langle p_j|$

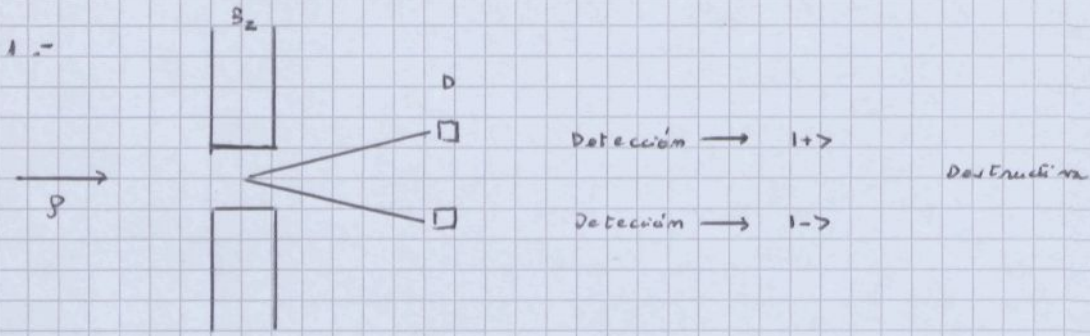
Le tiene que si A es un observable del sistema, entonces el valor medio de A en el estado ρ será el promedio estadístico, con pesos p_i , de sus valores medios en los estados puros $|\psi_i\rangle$, y, por tanto, valdrá

$$\langle A \rangle_\rho = \sum_i p_i \langle \psi_i | A | \psi_i \rangle = \text{Tr}[\rho A] \quad (7)$$

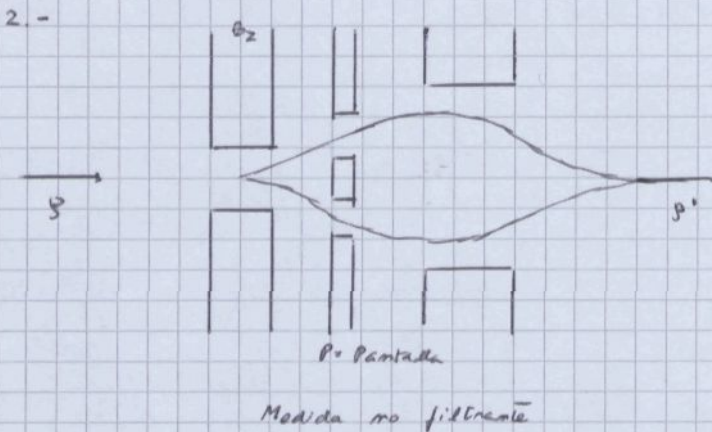
y

$$P_{A,\rho}(a_i) = \sum_j p_j \langle \psi_j | E(a_i) | \psi_j \rangle = \text{Tr}[\rho E(a_i)] \quad (8)$$

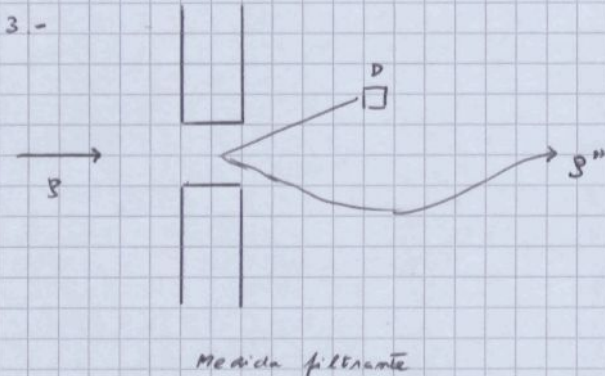
¿Qué pasa con el sistema físico después de una medida? En realidad hoy muchos tipos de medidas. Usando un Stern-Gerlach como paradigma tenemos



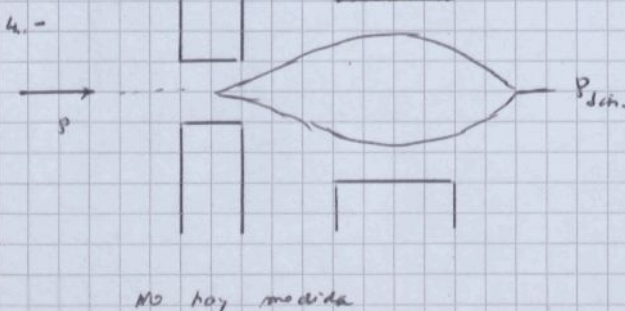
En este caso el sistema físico es destruido como sistema físico independiente, ya que no puede ser separado o aislado del detector. Son medidas destructivas y permiten, al repetir las muchas veces, obtener $P_{S_z, P}(\pm)$. No hablaremos más de estas medidas. La separación de los estados $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$ no ocurre hasta el momento de su detección.



El sistema físico cuando pasa por la pantalla interactúa con ella y la modifica. Es esta interacción con registro y/o disipación la que separa $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$.



Cuando D detecta el sistema físico esto queda destruido, pero cuando no es detectado sabemos que queda en el estado $|\downarrow\rangle$. La ausencia de detección no significa la ausencia de interacción. Así si $p = |\uparrow\rangle\langle\uparrow|$ y D no registra ninguna detección ha habido interacción con D que transforme p en $p' = |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$.



Cuando no hay ni destrucción ni interacción con el aparato este no se modifica y el Stern-Gerlach no es más que un campo magnético externo. p se modifica de acuerdo con la ecuación de Schrödinger.

Postulado IV. - Si un sistema físico se halla en el estado ρ , el estado resultante tras una medición ideal de un observable A , filtrante para los valores de un conjunto Δ , viene descrito por la matriz de densidad

$$\rho_{A,\Delta} = \frac{1}{\text{Tr}[\rho E_A(\Delta)]} \sum_{a \in \Delta} E_{M_a} \rho E_{M_a} \quad (1)$$

Si Δ se reduce a un punto a_i del espectro

$$\rho_{A,a_i} = \frac{1}{\text{Tr}[\rho E(a_i)]} E(a_i) \rho E(a_i) \quad (2)$$

si $E(a_i)$ es no degenerado entonces

$$\rho_{A,a_i} = |a_i\rangle \langle a_i| \quad (3)$$

que es el estado puro $|a_i\rangle$. Cuando la medida es no-filtrante entonces el estado final es

$$\rho_A = \sum_i E(a_i) \rho E(a_i) \quad (4)$$

y si no hay degeneración esto da

$$\rho_A = \sum_i P_{A,p}(a_i) |a_i\rangle \langle a_i| \quad (5)$$

Recordando que

$$\rho = \sum_i \sum_j E(a_i) \rho E(a_j) \quad (6)$$

queda claro como se pasa de ρ a ρ_{A,a_i} o a ρ_A . Este paso es irreversible y estocástico. El cambio (8) en el estado tras una medición ideal se llama reducción del paquete o colapso del estado. La recombinación entre este tipo de cambio irreversible, estocástico, y el cambio determinista asociado, como veremos, a la evolución temporal, es el problema crucial de la teoría de la medición en Mecánica cuántica.

Postulado V. - En el intervalo de tiempo entre dos mediciones consecutivas, los estados puros de un sistema físico siguen siendo puros, y existe en cada nueva unidad $|\Psi(t)\rangle$ algún vector estado $|\Psi(t)\rangle$ representativo de forma que la evolución viene dada por la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle \quad (7)$$

donde $H(t)$ es un observable llamado Hamiltoniano del sistema. Los observables

del sistema están representados por operadores constantes en el tiempo, salvo si los aparatos que miden aquellos presentan variación explícita con el mismo, en cuyo caso los operadores representativos deben incorporarse

Notemos que si

$$p(t) = \sum_m |\Psi_m(t)\rangle p_m \langle \Psi_m(t)| \tag{1}$$

$$i\hbar \frac{d p(t)}{dt} = \sum_m i\hbar \left\{ \frac{d |\Psi_m(t)\rangle}{dt} p_m \langle \Psi_m(t)| + |\Psi_m(t)\rangle p_m \frac{d \langle \Psi_m(t)|}{dt} \right\} = \sum_m \{ H(t) |\Psi_m(t)\rangle p_m \langle \Psi_m(t)| - |\Psi_m(t)\rangle p_m \langle \Psi_m(t)| H(t) \} \Rightarrow$$

$$i\hbar \frac{d p(t)}{dt} = [H(t), p(t)] \tag{2}$$

Se obtiene también

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \left\{ i\hbar \frac{d \langle \Psi(t) |}{dt} \right\} | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \left\{ i\hbar \frac{d | \Psi(t) \rangle}{dt} \right\} = -\langle \Psi(t) | H(t) | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | H(t) | \Psi(t) \rangle = 0$$

$$i\hbar \frac{d \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle}{dt} = 0 \tag{3}$$

es decir que en la evolución temporal la norma del vector estado no cambia.

Por otra parte la ecuación de Schrödinger es lineal y se puede probar que su integración en el intervalo $[t_0, t]$ conduce a

$$| \Psi(t) \rangle = U(t, t_0) | \Psi(t_0) \rangle \tag{4}$$

$$U(t, t_0) = U^{-1}(t_0, t) = U^\dagger(t_0, t), \quad U(t_0, t_0) = I$$

$$U(t, t_0) U(t_0, t) = I$$

De la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d U(t, t_0)}{dt} | \Psi(t_0) \rangle = H(t) U(t, t_0) | \Psi(t_0) \rangle \quad \forall | \Psi(t_0) \rangle$$

$$i\hbar \frac{d U(t, t_0)}{dt} = H(t) U(t, t_0) \tag{5}$$

que equivale a

$$U(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') U(t', t_0) \tag{6}$$

Si $H(t)$ no depende explícitamente del tiempo

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H (t-t_0)} = U(t-t_0) \tag{1}$$

Consideremos ahora un sistema conservativo, es decir, uno cuyo operador de Hamilton, u observable energía, no depende explícitamente del tiempo. Si $|\Psi(t_0)\rangle$ es un estado propio de H con valor propio E

$$H|\Psi(t_0)\rangle = E|\Psi(t_0)\rangle \tag{2}$$

se dice que $|\Psi(t_0)\rangle$ es estacionario y se tiene

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} (t-t_0) E} |\Psi(t_0)\rangle \tag{3}$$

Es decir, el estado solo cambia de fase en el transcurso del tiempo, y en cualquier instante $|\Psi(t)\rangle$ es un estado propio de H con valor propio E .

Si E pertenece al espectro puntual de H , $|\Psi(t_0)\rangle$, solución de (2) se llama estado ligado y su norma es finita. Si $E \in \sigma_c(H)$ el estado se llama estado de colisión

Para un sistema arbitrario, conservativo o no, si $A(t)$ es un observable cualquiera y $|\Psi(t)\rangle$ describe el estado del sistema, se tiene

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | A(t) | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(t) | [A(t), H(t)] | \Psi(t) \rangle + i\hbar \langle \Psi(t) | \frac{dA(t)}{dt} | \Psi(t) \rangle \tag{4}$$

Entonces diremos que un observable $A(t)$ es constante del movimiento si

$$i\hbar \frac{dA(t)}{dt} + [A(t), H(t)] = 0 \tag{5}$$

Para sistemas conservativos H es una constante del movimiento. Notar que en sistemas conservativos, es claro que una constante del movimiento A que no dependa explícitamente del tiempo conmuta con el operador H y, por tanto, se puede elegir un C.C.O.C de forma que tanto H como A formen parte del mismo. Entonces la base ortogonal de los vectores propios comunes a todos los operadores del C.C.O.C. podrá escribirse $\{|E_i, a_j, \alpha\rangle\}$ donde los índices α indican los valores propios de los otros observables del sistema. Entonces

$$P_{A, \psi}(a_m; t) = \sum_{E_i} \sum_{\alpha} |\langle E_i, a_m; \alpha | \Psi(t) \rangle|^2 \tag{6}$$

es la probabilidad de que al medir en el instante t el observable A se encuentre el valor propio $a_m \in \sigma_p(A)$. Esta probabilidad es independiente del tiempo

$$P_{A,\psi}(a_m; t) = \sum_{E_i} \sum_{\alpha} | \langle E_i, a_m; \alpha | e^{-\frac{i}{\hbar} H(t'-t)} | \psi(t') \rangle |^2 = P_{A,\psi}(a_m; t) \quad (1)$$

En mecánica cuántica el tiempo y el espacio juegan papeles muy distintos. El tiempo no es un operador, sino un parámetro. Sin embargo hay un principio de indeterminación energía-tiempo sea un sistema conservativo y un observable A que no dependa explícitamente del tiempo, para un estado cualquiera $|\psi(t)\rangle$ (4.1) conduce a

$$\Delta_{\psi} A \cdot \Delta_{\psi} H \geq \frac{1}{2} | \langle \psi(t) | [A, H] | \psi(t) \rangle | \quad (2)$$

que usando (11.4) puede escribirse

$$\Delta_{\psi} A \cdot \Delta_{\psi} H \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \right| \quad (3)$$

El tiempo

$$\tau_{\psi}(A) \equiv \frac{\Delta_{\psi} A}{\left| \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \right|} \quad (4)$$

es una estimación del intervalo de tiempo que hay que dejar transcurrir a partir de t para que la media de la distribución de valores de A se desplaze una cantidad $\Delta_{\psi} A$.

En este sentido se puede considerar $\tau_{\psi}(A)$ como un intervalo de tiempo característico de la evolución del sistema, en el instante t , con relación al observable A y $\tau_{\psi}(A)$ es una medida del tiempo mínimo que debe transcurrir para ver un cambio en el sistema al observar A . Si consideramos el conjunto de todos los observables $\{A\}$ que no dependen explícitamente del tiempo entonces podemos definir

$$\tau_{\psi} \equiv \inf_{A \in \{A\}} \tau_{\psi}(A) \quad (5)$$

y entonces

$$\tau_{\psi} \cdot \Delta_{\psi} H \geq \hbar/2 \quad (6)$$

que es la llamada relación de indeterminación energía-tiempo si $|\psi(t)\rangle$ es un estado estacionario $\Delta_{\psi} H = 0$ y por tanto (6) exige $\tau_{\psi} = \infty$, pues de acuerdo con lo dicho antes $\tau_{\psi}(A) = \infty$ para estados estacionarios pues las distribuciones de probabilidad son constantes en el tiempo. Para un sistema inestable de vida media τ , entonces $\Delta_{\psi} H \geq \hbar/2\tau$ y $\hbar/2$ suele llamarse la anchura del sistema.

Postulado VI. - Si en un sistema físico las coordenadas cartesianas de posición son q_1, q_2, \dots, q_N y p_1, p_2, \dots, p_N sus momentos conjugados correspondientes, entonces los operadores \hat{Q}_r, \hat{P}_s que representan estas observables en mecánica cuántica deben satisfacer las reglas de conmutación

$$[\hat{Q}_s, \hat{Q}_r] = 0 \quad [\hat{P}_s, \hat{P}_r] = 0 \quad [\hat{Q}_s, \hat{P}_r] = i\hbar \delta_{sr} \quad (1)$$

Si el sistema tiene un observable cuya expresión déctica es $A(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N; t)$ entonces en las explicaciones usuales de la mecánica cuántica el operador correspondiente se obtiene a partir de dicha expresión, escrita de forma conveniente, substituyendo en ella las variables q_r y p_s por los operadores \hat{Q}_r y \hat{P}_s , asociadas

Se sabe que en mecánica clásica

$$[q_r, q_s]_p = [p_r, p_s]_p = 0 \quad [q_r, p_s]_p = \delta_{rs} \quad (2)$$

$$[A, B]_p \xrightarrow{q \rightarrow \hat{Q}, p \rightarrow \hat{P}} \frac{i}{\hbar} [A, B]$$

Una posible representación de estos operadores es

$$\begin{aligned} \hat{Q} : \psi(x) &\longrightarrow x \psi(x) \\ \hat{P} : \psi(x) &\longrightarrow -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} \end{aligned} \quad \text{(Representación de posiciones)} \quad (3)$$

Una consecuencia de (1) es que

$$\Delta_{\psi} \hat{Q}_i \Delta_{\psi} \hat{P}_j \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{ij} \quad \text{(Relación de indeterminación posición-momento)} \quad (4)$$

Consideremos

$$\psi(x) \equiv (\pi \hbar \lambda)^{-1/4} \exp \left\{ -\frac{(x-a)^2}{2\hbar\lambda} \right\} \exp \left\{ \frac{ib}{\hbar} \left(x - \frac{a}{2} \right) \right\} \quad (5)$$

estos son los llamados paquetes gaussianos. Es fácil ver que

$$\langle \psi(x) | \psi(x) \rangle = 1$$

$$\langle \psi(x) | \hat{Q} | \psi(x) \rangle = a, \quad \langle \psi(x) | \hat{Q}^2 | \psi(x) \rangle = \frac{\hbar\lambda}{2} + a^2$$

$$\langle \psi(x) | \hat{P} | \psi(x) \rangle = b, \quad \langle \psi(x) | \hat{P}^2 | \psi(x) \rangle = \frac{\hbar}{2\lambda} + b^2$$

$$\Delta_{\psi} \hat{Q} = \frac{\sqrt{\hbar\lambda}}{\sqrt{2}}, \quad \Delta_{\psi} \hat{P} = \frac{\sqrt{\hbar}}{\sqrt{2\lambda}}$$

$$\Delta_{\psi} \hat{Q} \Delta_{\psi} \hat{P} = \hbar/2 \quad \text{(paquetes mínimos)}$$

$$\hat{\psi}(p) = \left(\frac{\lambda}{\pi \hbar}\right)^{1/4} \exp\left\{-\lambda(p-b)^2/2\hbar\right\} \exp\left\{-i\frac{a}{\hbar}\left(p-\frac{1}{2}b\right)\right\} \quad (1)$$

Esta es la expresión más general de los paquetes mínimos

Para una partícula no relativista la expresión de la hamiltoniana clásica es

$$H = \frac{1}{2M} \vec{p}^2 + V(\vec{x}; t) \quad (2)$$

y de acuerdo con el postulado VI

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{x}; t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\vec{x}; t) \right\} \Psi(\vec{x}; t) = H \Psi(\vec{x}; t) \quad (3)$$

donde

$$p(\vec{x}; t) = |\langle \vec{x} | \Psi(t) \rangle|^2 = |\Psi(\vec{x}; t)|^2 \quad (4)$$

es la densidad de probabilidad de hallar la partícula, en el instante t , en el punto \vec{x} .

De (3) se deduce

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*(\vec{x}; t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\vec{x}; t) \right) \Psi^*(\vec{x}; t) = H \Psi^*(\vec{x}; t) \quad (5)$$

Entonces

$$\frac{\partial}{\partial t} p(\vec{x}; t) = \Psi^*(\vec{x}; t) \frac{\partial \Psi(\vec{x}; t)}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*(\vec{x}; t)}{\partial t} \Psi(\vec{x}; t) = \frac{i}{\hbar} [\Psi^* H \Psi - (H \Psi)^* \Psi] \quad (6)$$

De aquí

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x p(\vec{x}; t) = \frac{i}{\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x [\Psi^* H \Psi - (H \Psi)^* \Psi] = 0 \quad (7)$$

Pues $H = H^*$. Esto es no hay fuentes ni sumideros de probabilidad. Notar que

$$\frac{\partial p(\vec{x}; t)}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2M} \left\{ \Psi^* \Delta \Psi - (\Delta \Psi^*) \Psi \right\}; \quad \frac{i\hbar}{2M} \vec{\nabla} \cdot \left\{ \Psi^* \vec{\nabla} \Psi - (\vec{\nabla} \Psi^*) \Psi \right\} \rightarrow$$

$$\frac{\partial p(\vec{x}; t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{x}; t) = 0 \quad (8)$$

$$p(\vec{x}; t) = |\Psi(\vec{x}; t)|^2 \quad (\text{densidad de probabilidad})$$

$$\vec{j}(\vec{x}; t) = -\frac{i\hbar}{2M} [\Psi^*(\vec{x}; t) \vec{\nabla} \Psi(\vec{x}; t) - (\vec{\nabla} \Psi^*(\vec{x}; t)) \Psi(\vec{x}; t)] \quad (\text{densidad de corriente de probabilidad})$$

Si $\Psi(\vec{x}; t)$ es real se tiene una fase independiente del tiempo $\vec{j}(\vec{x}; t) \equiv 0$.

Para estados estacionarios

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) e^{-iEt/\hbar} \Rightarrow \rho(\vec{x}), \vec{J}(\vec{x}) \quad (1)$$

entonces la ecuación de continuidad implica

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{x}) = 0 \quad (2)$$

es decir la corriente es solenoidal.

De (1) y (2)

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{x} \rangle_{\psi} = \frac{i}{\hbar} \langle [\vec{x}, H] \rangle_{\psi} \quad (3)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle_{\psi} = \frac{i}{\hbar} \langle [\vec{p}, H] \rangle_{\psi}$$

Para $H = p^2/2m + V(x)$

$$[\vec{x}, H] = \frac{1}{2m} [\vec{x}, p^2] = \frac{i\hbar}{m} \vec{p} \quad (4)$$

$$[\vec{p}, H] = i\hbar \vec{\nabla} V(\vec{x})$$

de donde

$$m \frac{d}{dt} \langle \vec{x} \rangle_{\psi} = \langle \vec{p} \rangle_{\psi} \quad (5)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle_{\psi} = - \langle \vec{\nabla} V(\vec{x}) \rangle_{\psi}$$

Estas expresiones constituyen el Teorema de Ehrenfest. Notese que estas ecuaciones no permiten afirmar que $\langle \vec{x} \rangle_{\psi}$ y $\langle \vec{p} \rangle_{\psi}$ sigan las leyes clásicas, pues para esto se requiere que

$$\langle F(\vec{x}; t) \rangle_{\psi} = F(\langle \vec{x} \rangle_{\psi}; t) \quad (6)$$

Para potenciales del tipo oscilador armónico la condición (6) es satisfecha inicialmente

Pasemos ahora a considerar las imágenes de evolución temporal. En la descripción de la evolución temporal en mecánica cuántica dada hasta ahora son los estados los que llevan el peso total de la evolución, mientras que las observables, estables en su montaje y funcionamiento, estaban representados por operadores constantes en el tiempo. Esta es la llamada imagen de Schrödinger y las cantidades a ella referidas se las añadirá en esta discusión el símbolo S . Ahora bien, puesto que lo único importante es la comparación de la teoría con los datos experimentales, y esto siempre se reduce a cálculos de elementos de matriz $\langle \Psi_2(t) | A(t) | \Psi_1(t) \rangle$, es indiferente la elección concreta de vectores $|\Psi(t)\rangle$ y operadores $A(t)$ representativos, con tal que tales cantidades no cambien

La imagen de Heisenberg se define

$$|\Psi_H(t)\rangle = U^\dagger(t, t_0) |\Psi_S(t_0)\rangle, \quad A_H(t) = U^\dagger(t, t_0) A_S(t_0) U(t, t_0) \tag{1}$$

donde $U(t, t_0)$ es el operador de evolución temporal. Entonces

$$|\tilde{\Psi}_H(t)\rangle = |\tilde{\Psi}_S(t_0)\rangle \equiv |\tilde{\Psi}_H\rangle, \quad P_H(t) = P_S(t_0) \equiv P_H \tag{2}$$

Además

$$i\hbar \frac{dA_H(t)}{dt} = [A_H(t), H_H(t)] + i\hbar \frac{\partial A_H(t)}{\partial t} \tag{3}$$

si el Hamiltoniano es constante $H_S(t) = H_S$ entonces

$$H_H(t) = H_S \tag{4}$$

y una constante del movimiento se sigue

$$\frac{d}{dt} A_H(t) = 0 \tag{5}$$

Clásicamente dos electrones son distinguibles porque siguen trayectorias distintas. En Mecánica cuántica la situación es totalmente distinta, donde sabemos que no es posible definir trayectorias como en el caso clásico. Si consideramos un sistema de partículas idénticas en un instante dado, la función de ondas representativa de su estado viene dada a través de productos de paquetes de onda individuales que generalmente se solapan; entonces, si en un instante posterior se localiza una partícula, es totalmente imposible afirmar de cuál de las partículas idénticas se trata.

Decir que un sistema consta de N partículas idénticas significa que no hay observables que permitan distinguirlos entre sí. Esto implica que si A es un observable cualquiera del sistema y P es una permutación de S_N entonces que las partículas son idénticas si y solo si

$$[A, P] = 0 \quad \forall P \in S_N \tag{6}$$

donde P es tanto la permutación como el operador que la implementa. Si indicamos por ξ_i las coordenadas de la partícula i -ésima

$$(P\psi)(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \psi(\xi_{P(1)}, \xi_{P(2)}, \dots, \xi_{P(N)}) \tag{7}$$

El operador P es unitario pues transforma bases ortonormales en bases ortonormales.

Postulado VII - Los estados puros de un sistema de partículas idénticas deben ser totalmente simétricos o antisimétricos bajo el intercambio de dos cualesquiera de ellas

Teorema de conexión spin-estadística - Los estados puros de un sistema de partículas idénticas son totalmente simétricos (antisimétricos) si su spin es entero (semi-entero)

Una consecuencia inmediata de todo esto es el principio de exclusión de Pauli

Consideremos un sistema formado por dos partículas 1 y 2 de spin 1/2. Supongamos que la partícula 1 está en el estado p_1 y la 2 en el p_2 con

$$S_i = \begin{vmatrix} \alpha_i & \beta_i \\ \beta_i^* & 1 - \alpha_i \end{vmatrix} \quad i=1,2 \tag{1}$$

Entonces el sistema completo o compuesto está en el estado

$$P = P_1 \otimes P_2 = \begin{vmatrix} \alpha_1 \alpha_2 & \alpha_1 \beta_2 & \beta_1 \alpha_2 & \beta_1 \beta_2 \\ \alpha_1 \beta_2^* & \alpha_1 (1 - \alpha_2) & \beta_1 \beta_2^* & \beta_1 (1 - \alpha_2) \\ \beta_1^* \alpha_2 & \beta_1^* \beta_2 & (1 - \alpha_1) \alpha_2 & (1 - \alpha_1) \beta_2 \\ \beta_1^* \beta_2^* & \beta_1^* (1 - \alpha_2) & (1 - \alpha_1) \beta_2^* & (1 - \alpha_1) (1 - \alpha_2) \end{vmatrix} \tag{2}$$

Para obtener p_1 a partir de P basta hacer la traza parcial

$$p = P_1 \otimes \text{Tr } P_2 = \begin{vmatrix} \alpha_1 \text{Tr}(P_2) & \beta_1 \text{Tr}(P_2) \\ \beta_1^* \text{Tr}(P_2) & (1 - \alpha_1) \text{Tr}(P_2) \end{vmatrix} \tag{3}$$

¿Qué debemos hacer en general? En muchos casos $P \neq P_1 \otimes P_2$, por ejemplo podemos tener

$$P = \frac{1}{2} [P_1 \otimes P_2 + P_1' \otimes P_2'] \quad (\text{estado entangled}) \tag{4}$$

Ahora el sistema \mathcal{H} no es describible por una matriz densidad. Noten que también los estados puros pueden ser entangled

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |\psi_1'\rangle \otimes |\psi_2'\rangle \tag{5}$$

Entonces para (6) se tiene

$$P^{(1)} = \text{Tr}_2 P = \frac{1}{2} [P_1 + P_1'] \tag{6}$$

Notar que ρ depende de 15 parámetros mientras que ρ_1 y ρ_2 dependen de 3 parámetros cada una y en tanto en general $\rho \neq \rho_1, \rho_2$. El sistema completo es mucho más complejo que el sistema de las dos partículas descriptas por separado. En esto radica la inseparabilidad cuántica.

II.- PROBLEMAS UNIDIMENSIONALES

Consideremos la ecuación de Schrödinger estacionaria unidimensional, para una partícula de masa M sin grados de libertad internas, bajo la influencia de un potencial $V(x)$

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

o equivalentemente

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + [E - U(x)] \psi(x) = 0 \quad E \equiv \frac{2ME}{\hbar^2} \quad U(x) \equiv \frac{2MV(x)}{\hbar^2} \quad (2)$$

donde E es la energía de la partícula.

Para que el problema de valores propios definido por (1) este bien formulado es preciso que $V(x)$ cumpla ciertos requisitos matemáticos, que no consideraremos en detalle. Sin embargo basta que $V(x)$ sea continuo a trozos, con discontinuidades finitas, para poder asegurar que las funciones propias $\psi_E(x)$ sean continuas, acotadas y con derivada continua.

En la práctica, sin embargo, surgirán algunos problemas en los que $V(x)$ no cumplirá estas condiciones. Por ejemplo, podrá haber zonas en que $V(x)$ sea infinito (barreras de potencial infinito), o incluso que $V(x)$ contenga en su expresión alguna delta de Dirac. En estos casos todavía la función de onda $\psi(x)$ será continua, pero no su derivada en los puntos de salto infinito del potencial. Así por ejemplo, si $V(x) = \infty$ para $x \leq a$, basta considerar el problema como el límite de aquel que en esa zona $x \leq a$, $V(x) = V_0$, lim cambian el valor, haciendo al final $V_0 \rightarrow \infty$. Teniendo en cuenta la acotación de $\psi(x)$ en la zona $x \leq a$, será necesario, como veremos que $\psi(x) = 0$ para $x \leq a$ en el límite $V_0 \rightarrow \infty$. En caso en que

$$V(x) = g \delta(x-c) + U_1(x) \quad (3)$$

siendo $U_1(x)$ regular en torno a $x=c$, la integración formal de (4.2) en $[a-\eta, a+\eta]$

$$\int_{a-\eta}^{a+\eta} \frac{d\psi}{dx} dx = \int_{a-\eta}^{a+\eta} \frac{d\psi}{dx} dx = \psi(a) \int_{a-\eta}^{a+\eta} dx U(x) + 0(\eta) = \psi(a) g + 0(\eta) \quad (4)$$

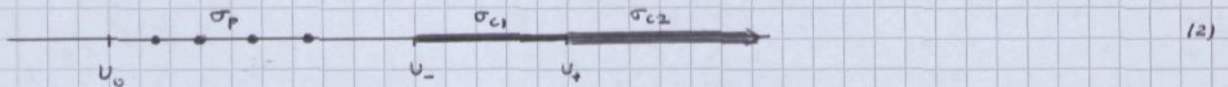
y por tanto la discontinuidad de $d\psi/dx$ en $x=c$ será $g\psi(c)$.

Para discutir las propiedades generales del espectro de energías de (1.2) supondremos que $U(x)$ es función continua a trozos sobre \mathbb{R} , es decir, continua salvo a lo sumo en un conjunto discreto de puntos en que puede tener saltos de discontinuidad finitas. Se usará además la siguiente notación

$$U_0 \equiv \inf U(x) \quad , \quad U_{\pm} = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} U(x) \quad (1)$$

Los límites U_{\pm} supondremos que existen, ya pueden ser finitos o infinitos. De ser alguno finito, admitiremos que $U(x)$ tiende hacia él más deprisa que $1/x$, más concretamente, que para $x \rightarrow \pm\infty$ (según sea el caso), $U(x) = U_{\pm} + B|x|^{-S_{\pm}}$ con B constante y $S_{\pm} > 1$. Cuando alguno de los U_{\pm} sea infinito, de ser positivo, no hay restricción sobre la rapidez de su crecimiento; pero si es negativo requeriremos $U(x) \geq -ax^2 - b$, $a, b > 0$ para todo x . Bajo estas condiciones puede demostrarse que $H = -d^2/dx^2 + U(x)$ es esencialmente autoadjunto en $C_0^{\infty}(\mathbb{R})$ ($\overline{H} = H^+$; $C_0^{\infty}(\mathbb{R}) =$ funciones infinitamente derivables y con soporte en el interior de \mathbb{R}).

Entonces se puede probar que el espectro de H es de la forma



donde hemos supuesto $U_- \leq U_+$. Antes de poder obtener la forma (2) del espectro.

i) $E > U_+$, U_+ finito.

Introduzcamos una nueva función incógnita

$$\psi(x) = \exp \left\{ \pm i k_+ x + \int_a^x dx h(x) \right\} \quad k_+ \equiv |E - U_+|^{1/2} \quad (2)$$

Para valores de x suficientemente grandes $h(x)$ satisface la ecuación

$$h'(x) \pm 2i k_+ h(x) + h^2(x) - \frac{B}{x^{S_+}} = 0 \quad (3)$$

por lo que asintóticamente $h(x) \sim x^{-S_+}$; como se ha supuesto que $S_+ > 1$, la integral en (3) tiene un límite asintótico constante. Resulta así que en este caso existen vendos pares de soluciones independientes que asintóticamente se comportan como

$$\begin{aligned} & e^{\pm i k_+ x} \quad , \quad x \rightarrow +\infty \quad , \quad E > U_+ \text{ finito} \quad , \quad k_+ \equiv |E - U_+|^{1/2} \\ & e^{\pm i k_- x} \quad , \quad x \rightarrow -\infty \quad , \quad E > U_- \text{ finito} \quad , \quad k_- \equiv |E - U_-|^{1/2} \end{aligned} \quad (5)$$

Por derivación de (3), se obtiene del mismo modo que las derivadas de estas soluciones

se comportan como las derivadas de sus formas asintóticas

ii) $E < U_+ < \infty$

Un razonamiento análogo al anterior permite probar que $\psi(x)$ tiende asintóticamente a una combinación lineal de

$$e^{\pm k_+ x}, \quad x \rightarrow +\infty, \quad E < U_+ < \infty, \quad k_+ = |E - U_+|^{1/2} \tag{11}$$

Cuando $x \rightarrow \infty$, si $E > U_-$ finito, el comportamiento asintótico es de nuevo dado en (5) y en caso contrario

$$e^{\pm k_- x}, \quad x \rightarrow -\infty, \quad E < U_- < \infty, \quad k_- = |E - U_-|^{1/2} \tag{12}$$

Análogamente para las derivadas

iii) $U(x) \rightarrow +\infty$ para $x \rightarrow +\infty$ ó $x \rightarrow -\infty$

El estudio asintótico de (1.2) permite probar que esta ecuación tiene dos soluciones linealmente independientes, digamos ψ_1 y ψ_2 , cuyos comportamientos asintóticos son (en $x \rightarrow +\infty$ ó $x \rightarrow -\infty$ según el caso)

$$\psi_{1,2}(x) \sim \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \exp \left\{ \pm \int_{x_0}^x dx' k(x') \right\}, \quad k(x) \equiv |U(x) - E|^{1/2} \tag{13}$$

(estos comportamientos están asegurados siempre que $U(x)$ sea dos veces derivable en un entorno del extremo en cuestión, y que $U'(x) = O(|U|^a)$, $0 < a < 3/2$, en dicho entorno). Asimismo

$$\psi'_{1,2}(x) \sim \pm \sqrt{k(x)} \exp \left\{ \pm \int_{x_0}^x dx' k(x') \right\}, \quad k(x) \equiv |U(x) - E|^{1/2} \tag{14}$$

iv) $U(x) \rightarrow -\infty$ para $x \rightarrow +\infty$ ó $x \rightarrow -\infty$

Al igual que arriba, y bajo las mismas condiciones sobre U , U' se tiene

$$\psi_{1,2}(x) \sim \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \exp \left\{ \pm i \int_{x_0}^x dx' k(x') \right\}, \quad k(x) \equiv |U(x) - E|^{1/2} \tag{15}$$

$$\psi'_{1,2}(x) \sim \pm i \sqrt{k(x)} \exp \left\{ \pm i \int_{x_0}^x dx' k(x') \right\}$$

Ahora ya podemos razonar que el espectro de H es de la forma representada en la (2.2)

i) $E \leq U_0$.

En este caso, $E - U(x) < 0$ y, por tanto, $\psi''/\psi > 0$ para todo valor de x . Tomando una solución decreciente en $x \rightarrow -\infty$ y prolongándola mediante (1.2), $\psi(x)$ deberá presentar siempre su convexidad hacia el eje de las x , luego no podrá tender hacia cero cuando $x \rightarrow +\infty$, y de aquí que crezca al menos exponencialmente en esta región, siendo pues inaceptable como función propia generalizada; por tanto E no pertenece al espectro.

ii) $U_0 < E < U_+$

La solución debe decrecer, exponencialmente al menos, para $x \rightarrow -\infty$. Prolongando esta solución a la región $x \rightarrow +\infty$, se encontrará, en general, una combinación lineal de funciones exponencialmente crecientes y decrecientes. Variando el valor de E en el intervalo de energías considerado, los coeficientes de esta combinación también varían, y puede suceder que existan valores de E para los que el coeficiente de la exponencial creciente se anula. El conjunto de estos valores de E pertenece al espectro puntual $\sigma_p(H)$ y es un conjunto discreto y no degenerado. Nótese que la función de onda no se anula en las regiones clásicamente inaccesibles $\{x: U(x) > E\}$, sino que existe una probabilidad de penetración.

iii) $U_- < E < U_+$

Para todos E existe en este caso una única solución que decrece, exponencialmente al menos, para $x \rightarrow +\infty$. Luego así se llama σ_c , y el espectro es continuo y no degenerado.

iv) $E > U_+$

Todas las soluciones de (1.2) son admisibles como funciones propias generalizadas, y para cada valor de E hay dos soluciones linealmente independientes; por tanto, se cubre σ_c y el espectro es continuo y doblemente degenerado.

Es evidente por ser U real que en el caso no-degenerado la fase arbitraria de la función de ondas se puede elegir siempre de tal forma que dicha función sea real: basta observar que si $\psi(x)$ es solución admisible de (1.2), también lo es $\psi^*(x)$, pues tanto E como U son reales.

Los valores de E pertenecientes a $\sigma_p(H)$ corresponden a estados ligados, van no degenerados y, como acabamos de ver, las funciones de onda correspondientes pueden tomarse reales. Se ha hecho notar que este conjunto puede ser no vacío, lo cual sucede en particular, en un potencial $U(x) \geq \min(U_+, U_-)$ para todo x . En otros casos, por ejemplo, para un oscilador armónico, puede aparecer un número infinito de estados ligados.

Una propiedad interesante de los estados ligados está relacionada con el número de sus nodos o ceros. Puede demostrarse el llamado Teorema de Sturm: Si $\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_m, \dots$ son las funciones de onda de los estados ligados con energías $E_0 < E_1 < \dots < E_m < \dots$ entonces ψ_m tiene m nodos; entre dos nodos consecutivos de ψ_m hay un nodo de ψ_{m-1} y además ψ_{m+r} se anula al menos una vez para todo $r \geq 1$. El estado ψ_0 se llama estado fundamental y es el de menor energía; $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_m, \dots$ se denominan estados excitados.

El hecho de que la energía aumenta con el número de nodos se puede entender intuitivamente mediante el siguiente razonamiento. Si $\psi(x_0) = 0$, entonces $\psi''(x_0) = 0$, y, por tanto, $\psi'(x)$ presenta un valor extremo en $x = x_0$. Esto hace muy probable una contribución importante a la energía cinética y, por tanto, a la energía del estado.

Queremos ahora estudiar el problema de la propagación, es decir, determinar $\Psi(x; t)$ a partir de la función de ondas en un instante inicial t_0 , o equivalentemente resolver la ecuación

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x; t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \Psi(x; t) \tag{1}$$

lo que, en general, es un problema arduo. Para Hamiltonianos que no dependen explícitamente del tiempo, como el aquí considerado, ya hemos visto que la evolución de los vectores estado viene regida por

$$|\Psi(t_2)\rangle = e^{-iH(t_2 - t_1)/\hbar} |\Psi(t_1)\rangle \tag{2}$$

que en la representación de posiciones corresponde a

$$\Psi(x_2; t_2) = \int_{\mathbb{R}} dx_1 G(x_2, t_2; x_1, t_1) \Psi(x_1; t_1) \tag{3}$$

$$G(x_2, t_2; x_1, t_1) \equiv \langle x_2 | e^{-iH(t_2 - t_1)/\hbar} | x_1 \rangle$$

Es evidente que

$$\lim_{t_2 \rightarrow t_1} G(x_2, t_2; x_1, t_1) = \delta(x_2 - x_1) \quad (1)$$

Consideremos primero la evolución hacia el futuro: $t_2 > t_1$. En tal caso es conveniente definir un propagador retardado

$$G_+(x_2, t_2; x_1, t_1) = \theta(t_2 - t_1) \langle x_2 | e^{-iH(t_2 - t_1)/\hbar} | x_1 \rangle \quad (2)$$

que se anula si $t_2 < t_1$, y que sustituido en (5.3) da la evolución hacia el futuro de los paquetes de ondas. Entonces (5.3) indica que $\Psi(x_2; t_2)$ es la superposición de todas las amplitudes en $(x_2; t_2)$ producidas por propagación de ondas emitidas por $(x_1; t_1)$ para todos puntos x_1 y en un instante $t_1 < t_2$; cada punto de éstas contribuye con una amplitud de probabilidad $\Psi(x_1; t_1)$, y $G_+(x_2, t_2; x_1, t_1)$ es la amplitud de la onda en $(x_2; t_2)$ producida por una fuente de tipo delta concentrada en x_1 en el instante $t_1 < t_2$.

La expresión (2) es de poca utilidad práctica, pues se trata de una expresión puramente formal, en la que el elemento de matriz que la integra es de muy difícil evaluación en los casos generales. De aquí la conveniencia de buscar una ecuación diferencial o integral para G_+ que pueda sugerir un cálculo aproximado.

Para deducir la ecuación diferencial satisfecha por el propagador retardado procederemos de la siguiente forma: supongamos por simplicidad que H tenga espectro puramente puntual, y sea $\{|E_m\rangle\}$ la base ortonormal asociada. De (2)

$$\begin{aligned} G_+(x_2, t_2; x_1, t_1) &= \theta(t_2 - t_1) \sum_m \sum_m \langle x_2 | E_m \rangle \langle E_m | e^{-iH(t_2 - t_1)/\hbar} | E_m \rangle \langle E_m | x_1 \rangle = \\ &= \theta(t_2 - t_1) \sum_m \psi_m(x_2) \psi_m^*(x_1) e^{-iE_m(t_2 - t_1)/\hbar} \end{aligned} \quad (3)$$

Teniendo en cuenta que $d\theta(t_2 - t_1)/dt_2 = \delta(t_2 - t_1)$ es inmediata comprobar

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V(x_2) \right] \right\} G_+(x_2, t_2; x_1, t_1) = i\hbar \delta(t_2 - t_1) \sum_m \psi_m(x_2) \psi_m^*(x_1) \quad (4)$$

y usando la relación de cierre

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} - \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V(x_2) \right] \right\} G_+(x_2, t_2; x_1, t_1) = i\hbar \delta(t_2 - t_1) \delta(x_2 - x_1) \quad (5)$$

Intentemos calcular $G_+(x_2, t_2; x_1, t_1)$ para la partícula libre. En este caso (6.3) se puede escribir

$$G_+^{(0)}(x_2, t_2; x_1, t_1) = \theta(t_2 - t_1) \int_{-\infty}^{+\infty} dp \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{+ipx_2/\hbar} e^{-i\frac{p^2}{2m\hbar}(t_2 - t_1)} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{-ipx_1/\hbar} =$$

$$= \theta(t_2 - t_1) \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \exp \left\{ -i \left(\frac{t_2 - t_1}{2m\hbar} p^2 - \frac{x_2 - x_1}{\hbar} p \right) \right\}$$

Tenemos en cuenta que este integral es una gaussiana

$$G_+^{(0)}(x_2, t_2; x_1, t_1) = \theta(t_2 - t_1) e^{-i\pi/4} \left\{ \frac{m}{2\pi\hbar(t_2 - t_1)} \right\}^{1/2} \exp \left\{ \frac{i m (x_2 - x_1)^2}{2\hbar(t_2 - t_1)} \right\} \quad (1)$$

que es la expresión explícita del propagador retardado libre.

Notan que si $\Psi(x; 0) = \delta(x)$, entonces $\Psi(x; t > 0) = G_+^{(0)}(x, t; 0, 0)$, y, por tanto, su densidad de probabilidad es no nula en todos los puntos, para $t > 0$. Esta densidad de probabilidad decae en cualquier punto como $1/t$. Esto es la probabilidad de encontrar la partícula en cualquier región finita del espacio decae como $1/t$ en el transcurso de su evolución libre. Notan que

$$G_+^{(0)}(x_2, t_2; x_1, t_1) \equiv G_+^{(0)}(x_2 - x_1, t_2 - t_1) \quad (2)$$

debido a la homogeneidad en el espacio y en el tiempo. Si $V(x) \neq 0$ entonces solo

$$G_+(x_2, t_2; x_1, t_1) = G_+(x_2, x_1; t_2 - t_1) \quad (3)$$

De igual forma que hemos introducido los propagadores retardados se pueden introducir los propagadores avanzados G_- , responsables de la evolución hacia el pasado, con solo sustituir en (6.2) $\theta(t_2 - t_1)$ por $\theta(t_1 - t_2)$. De su definición se sigue

$$G_-(x_2, t_2; x_1, t_1) = G_+^*(x_1, t_1; x_2, t_2) \quad (4)$$

Consideremos un hamiltoniano $H = H_0 + V$, donde H_0 es el hamiltoniano libre, entonces usando (6.5) es fácil ver que

$$\Psi(x_2, t_2) = \Psi_0(x_2, t_2) + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 G_+^{(0)}(x_2, t_2; x_1, t_1) V(x_1) \Psi(x_1, t_1) \quad (5)$$

donde $\Psi_0(x_2, t_2)$ es la solución a H_0 , y $\Psi(x, t)$ la de H .

De todos los potenciales unidimensionales es, sin duda, el correspondiente al oscilador armónico el más importante, pues sus características espectrales influyen en dos que, tanto en primera como en segunda cuantificación. El hamiltoniano es

$$H = \frac{1}{2M} P^2 + \frac{1}{2} k X^2, \quad k > 0 \quad (1)$$

k se denomina constante de recuperación. Introduzcamos en lugar de los operadores X y P los

$$a \equiv \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} \left(X + \frac{i}{M\omega} P \right), \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} \left(X - \frac{i}{M\omega} P \right) \quad (2)$$

donde $\omega \equiv \sqrt{k/M}$ es la frecuencia clásica del oscilador elástico. Se tiene que

$$[a, a] = 0, \quad [a^\dagger, a^\dagger] = 0, \quad [a, a^\dagger] = 1 \quad (3)$$

Estos operadores se llaman operadores de creación (a^\dagger) y de aniquilación (a), por razones que quedaran claras mas adelante. Se puede tambien introducir un operador número definido como

$$N = a^\dagger a \quad (4)$$

Notar que

$$H = \hbar\omega (a^\dagger a + 1/2) = \hbar\omega (N + 1/2) \quad (5)$$

Es evidente que el espectro de H y de N estan intimamente relacionados. De acuerdo con la discusión general el espectro de H (y por tanto de N) es discreto y no-degenerado. Indicamos por $|\mu\rangle$ el vector propio normalizado, único, salvo fase de N con valor propio μ :

$$N |\mu\rangle = \mu |\mu\rangle \quad (6)$$

Teniendo en cuenta que $N = a^\dagger a$, es evidente que $a |\mu\rangle = 0$ si y solo si $\mu = 0$

($\langle \mu | N | \mu \rangle = \| a |\mu\rangle \|^2 = \mu$). Por otra parte, $a^\dagger |\mu\rangle \neq 0$:

$$\| a^\dagger |\mu\rangle \|^2 = \langle \mu | a a^\dagger |\mu\rangle = \langle \mu | a^\dagger a + 1 |\mu\rangle = \mu + 1 \quad (7)$$

y por ser $N \geq 0$ se debe cumplir $\mu \geq 0$. De las relaciones de conmutación resulta

$$N a |\mu\rangle = (a N - a) |\mu\rangle = (\mu - 1) a |\mu\rangle \quad (8)$$

$$N a^\dagger |\mu\rangle = (a^\dagger N + a^\dagger) |\mu\rangle = (\mu + 1) a^\dagger |\mu\rangle$$

Luego $a |\mu\rangle$ es propio de N , con valor propio $\mu - 1$, si $\mu \neq 0$, y $a^\dagger |\mu\rangle$ es siempre propio de N , con valor propio $\mu + 1$. Partiendo pues del valor propio μ por aplicación reiterada

de a y a^\dagger , formaremos el conjunto de valores propios

$$--- \mu-2, \mu-1, \mu, \mu+1, \mu+2, ---$$

(4)

Como $N \geq 0$, y $a|v\rangle = 0$ si y solo si $v=0$, forzadamente μ debe ser entero no-negativo y la serie anterior vendrá $0, 1, 2, \dots$. Luego $\sigma_p(N) = \{0, 1, 2, \dots\}$ y en tanto

$$E_m = \hbar \omega (m + 1/2), \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

(12)

De lo anterior se deduce que los vectores propios normalizados son, salvo fase,

$$|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{m!}} (a^\dagger)^m |0\rangle$$

(13)

que cumplen

$$\langle m | m' \rangle = \delta_{mm'}$$

(14)

$$a|m\rangle = \sqrt{m} |m-1\rangle, \quad a^\dagger|m\rangle = \sqrt{m+1} |m+1\rangle, \quad N|m\rangle = m|m\rangle$$

(15)

Notas que

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}} (a + a^\dagger), \quad P = i \sqrt{\frac{\hbar M\omega}{2}} (a^\dagger - a)$$

(16)

Entonces

$$\langle m' | X | m \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}} \{ \sqrt{m} \delta_{m', m-1} + \sqrt{m+1} \delta_{m', m+1} \}$$

(17)

$$\langle m' | P | m \rangle = i \sqrt{\frac{\hbar M\omega}{2}} \{ \sqrt{m+1} \delta_{m', m+1} - \sqrt{m} \delta_{m', m-1} \}$$

Veamos como obtener las funciones de onda. Sabemos que $a|0\rangle = 0 \Rightarrow$

$$\langle x | a | 0 \rangle = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} \left\{ x + \frac{\hbar}{M\omega} \frac{d}{dx} \right\} \psi_0(x) = 0$$

(18)

de donde

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{x_0}} \exp \left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2 \right), \quad x_0^2 \equiv \frac{\hbar}{M\omega}$$

(19)

El primer estado excitado es

$$\langle x | 1 \rangle = \langle x | a^\dagger | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2} x_0} \left(x - x_0^2 \frac{d}{dx} \right) \langle x | 0 \rangle = \sqrt{2} \frac{x}{x_0} \psi_0(x)$$

(110)

y así sucesivamente.

$$\psi_m(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\Gamma(m) 2^m m!}} H_m(\alpha x) e^{-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2}, \quad \alpha \equiv \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}$$

$$H_m(x) = \sum_{r=0}^{\lfloor m/2 \rfloor} \frac{(-1)^r m! (2x)^{m-2r}}{r! (m-2r)!} \tag{1}$$

son los llamados polinomios de Hermite. Notemos que

$$\psi_m(-x) = (-1)^m \psi_m(x) \tag{2}$$

que es una consecuencia de que al tomarse que $V(-x) = V(x)$, las funciones propias tienen paridades bien definidas

Se puede probar fácilmente que

$$\langle 0 | \hat{x}^2 | 0 \rangle = \frac{\hbar}{2M\omega}, \quad \langle 0 | \hat{p}^2 | 0 \rangle = \frac{1}{2} \hbar M \omega \tag{3}$$

Entonces

$$\langle 0 | \frac{1}{2M} \hat{p}^2 | 0 \rangle = \frac{\hbar \omega}{4} = \frac{E_0}{2} = \frac{1}{2} \langle 0 | H | 0 \rangle \tag{4}$$

$$\langle 0 | V(\hat{x}) | 0 \rangle = \frac{1}{2} M \omega^2 \langle 0 | \hat{x}^2 | 0 \rangle = \frac{\hbar \omega}{4} = \frac{E_0}{2} \langle 0 | H | 0 \rangle$$

que es un ejemplo del teorema del virial que dice que si Ψ es un estado ligado de un sistema de Hamiltoniano $H = K + V$, $K = \hat{p}^2/2M$ entonces

$$\langle K \rangle_{\Psi} = \frac{1}{2} \langle \hat{x} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \Psi) \rangle_{\Psi} \tag{5}$$

Por otra parte $\langle 0 | X | 0 \rangle = \langle 0 | P | 0 \rangle = 0$ y de (2)

$$\Delta_0 X = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}}, \quad \Delta_0 P = \sqrt{\frac{\hbar M \omega}{2}} \tag{6}$$

y por tanto

$$\Delta_0 X \Delta_0 P = \hbar/2 \tag{7}$$

Es decir que el estado fundamental del oscilador armónico es de incertidumbre mínima. No es difícil probar que

$$\Delta_m X \Delta_m P = (m + \frac{1}{2}) \hbar \tag{8}$$

Algunos estados muy usados en aplicaciones físicas son los llamados estados coherentes, $|z\rangle$ definidos como

$$a|z\rangle = z|z\rangle \quad z \in \mathbb{C} \tag{9}$$

Para hallar estos estados expresamos $|z\rangle$ como combinación lineal de estados $|m\rangle$

$$|z\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{c_m}{\sqrt{m!}} |m\rangle \quad (1)$$

Entonces

$$a|z\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{c_m}{\sqrt{(m-1)!}} |m-1\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{c_{m+1}}{\sqrt{m!}} |m\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{z c_m}{\sqrt{m!}} |m\rangle \Rightarrow c_{m+1} = z c_m$$

de donde

$$c_m = z^m c_0 \quad (2)$$

Así los estados coherentes normalizados, son, salvo fase:

$$|z\rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{z^m}{\sqrt{m!}} |m\rangle \quad (3)$$

o equivalentemente

$$|z\rangle = e^{-|z|^2/2} e^{z a^\dagger} |0\rangle, \quad \langle z|z\rangle = 1 \quad (4)$$

La evolución temporal es

$$\begin{aligned} |z, t\rangle &= e^{-iHt/\hbar} |z\rangle = e^{-i\omega t (a^\dagger a + 1/2)} e^{-|z|^2/2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{z^m}{\sqrt{m!}} |m\rangle = \\ &= e^{-|z|^2/2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{z^m}{m!} e^{-i\omega t (m+1/2)} |m\rangle = e^{-i\omega t/2} |z e^{-i\omega t}\rangle \end{aligned} \quad (5)$$

Entonces usando (5.6)

$$\langle z, t | \hat{x} | z, t \rangle = \langle z | \hat{x} | z \rangle \cos \omega t + \frac{1}{m\omega} \langle z | \hat{p} | z \rangle \sin \omega t \quad (6)$$

$$\langle z, t | \hat{p} | z, t \rangle = \langle z | \hat{p} | z \rangle \cos \omega t - m\omega \langle z | \hat{x} | z \rangle \sin \omega t$$

y por tanto, en $|z, t\rangle$ los valores medios de los operadores posición y momento oscilan de acuerdo con las leyes clásicas. Se puede probar además que los paquetes $\langle x | z \rangle$ son siempre mínimos.

IV. SIMETRÍAS E INVARIANCIAS

Sea S un sistema físico y \mathcal{H} el espacio de Hilbert de sus estados (puros); toda transformación G que establezca una correspondencia biyectiva entre los distintos rayos unidad $|\xi\rangle_R$ de \mathcal{H} , que transforme entre sí rayos correspondientes a estados puros físicamente realizables y que conserve las probabilidades de transición

$${}_R\langle \psi | \phi \rangle_R = {}_R\langle \psi_G | \phi_G \rangle_R \quad |\xi\rangle_R \xrightarrow{G} |\xi_G\rangle_R \equiv G|\xi\rangle_R \quad (4)$$

se denomina transformación de simetría. Es evidente que dado un operador unitario o antiunitario U que transforme vectores estado (físicamente admisibles) entre sí, la correspondencia $|\psi\rangle_R \rightarrow (U|\psi\rangle)_R$ satisface (4) y define una transformación de simetría. Que el recíproco es esencialmente cierto constituye un famoso e importante teorema, llamado teorema de Wigner: "Toda transformación de simetría G entre espacios coherentes es implementable por una biyección isométrica lineal o antiunitaria U_G ". Es decir, dados $|\xi\rangle_R, |\xi_G\rangle_R$, es posible elegir ambos representantes $|\xi\rangle, |\xi_G\rangle$ tales que $|\xi_G\rangle = U_G|\xi\rangle$, y por tanto

$$\begin{aligned} \langle \psi_G | \phi_G \rangle &= \langle \psi | \phi \rangle & \text{si } U_G \text{ es unitario} \\ \langle \psi_G | \phi_G \rangle &= \langle \psi | \phi \rangle^* & \text{si } U_G \text{ es antiunitario} \end{aligned} \quad (5)$$

El último caso sólo corresponde a la inversión temporal que no estudiaremos aquí y por tanto consideraremos solo U_G que sean unitarios.

Dado un operador lineal A , interesa conocer su transformado A_G bajo una simetría G , implementable por un operador unitario U_G . El transformado A_G se define, por analogía con (1), de forma que sus elementos de matriz satisfagan

$$\langle \phi_G | A_G | \psi_G \rangle = \langle \phi | A | \psi \rangle \quad \forall |\phi\rangle, |\psi\rangle \quad (6)$$

es.

$$\begin{aligned} \langle \phi | A | \psi \rangle &= \langle \phi_G | A_G | \psi_G \rangle = \langle \phi | U_G^+ A_G U_G | \psi \rangle \Rightarrow \\ &\Rightarrow A_G = U_G A U_G^+ \end{aligned} \quad (7)$$

Se puede probar que (7), salvo fase, es la única solución posible de (6).

Un conjunto de observables $\{A_i\}$ se dice que forma un conjunto irreducible de observables si todo operador lineal que conmuta con dichos observables es necesariamente un múltiplo de la identidad.

Para un sistema de N partículas en número y tipo fijos, un conjunto irreducible de observables es $\{\bar{X}_i, \bar{P}_i, \bar{S}_i; i=1, 2, \dots, N\}$. Una simetría U_G queda totalmente determinada si especificamos como se transforman los observables de un conjunto irreducible bajo U_G . Así para un conjunto de partículas basta con un $\{\bar{X}_{i,G}, \bar{P}_{i,G}, \bar{S}_{i,G}; i=1, 2, \dots, N\}$.

Teniendo en cuenta la definición de transformación de simetría, es inmediato probar que el conjunto de todas ellas forman un grupo. En la práctica, tan sólo un pequeño subgrupo de simetrías es de interés, por estar íntimamente vinculado a realizaciones operacionales factibles en laboratorio, y condiciones e invariancias dinámicas que luego consideraremos.

Dado un grupo de simetrías G (subgrupo del grupo total), según lo dicho, cada elemento $G_i \in G$ es implementable por un operador unitario U_{G_i} unívocamente definido, salvo fase. Debido a esta ambigüedad, no se puede afirmar que los U_{G_i} dados tengan la propiedad de grupo, pues lo único que se puede asegurar es que

$$U_{G_i} U_{G_j} = w(G_i, G_j) U_{G_i G_j} \quad (1)$$

donde $w(G_i, G_j)$ es de módulo uno. En otros palabras $G \rightarrow U_G$ será una representación proyectiva unitaria de G . Para que $G \rightarrow U_G$ sea una verdadera representación es necesario que todos los factores $w(G_i, G_j)$ sean iguales a 1, lo cual, aunque deseable, no es siempre posible. En los casos que consideraremos aquí siempre se puede elegir $w = \pm 1$.

Un caso particularmente interesante es cuando el subgrupo considerado G de transformaciones de simetría es un grupo de Lie complejo que depende de m parámetros normales $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$. Dado un elemento G del grupo, en un entorno de la identidad, caracterizado por los parámetros normales $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$ de entre los U_G correspondientes podremos elegir uno de la forma

$$U(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m) \equiv \exp \left\{ -i \sum_{j=1}^m \alpha_j I_j \right\} \quad (2)$$

donde los operadores $I_j (= I_j^\dagger)$ son los llamados generadores infinitesimales del grupo. El elemento identidad corresponde a $\alpha_i = 0$, para todo i . Los conmutadores de los generadores infinitesimales definen unas constantes reales $C_{ij} = C_{ji}$, llamadas

constantes de estructura, que caracterizan el grupo \mathfrak{L} de Lie

$$[I_i, I_j] = i \sum_k c_{ijk} I_k \quad (1)$$

Si bajo una transformación infinitesimal de simetría, caracterizada por los parámetros normales $(0, 0, \dots, \delta\alpha_i, \dots, 0)$ el observable A cambia a $A + \delta_i A$ entonces las expresiones (2.2) y (4.5) conducen a

$$[A, I_i] = -i \frac{\delta_i A}{\delta\alpha_i} \quad (2)$$

Sea G un grupo de transformaciones de simetría y \hat{G} el grupo de operadores asociados, que como hemos dicho supondremos lineales. Denotemos por U_G un elemento cualquiera de \hat{G} . Si se supone que el Hamiltoniano $H(t)$ es invariante bajo los operadores $U_G \in \hat{G}$, podremos escribir, de acuerdo con la relación (1.4)

$$[H(t), U_G] = 0 \quad \forall U_G \in \hat{G} \quad (3)$$

Para sistemas conservativos e invariantes, los estados propios de H pueden caracterizarse en la forma $|\alpha, j, \mu\rangle$, donde j indica el conjunto de números necesarios para caracterizar una representación irreducible de \hat{G} , μ el conjunto de los números necesarios para distinguir los distintos vectores base de tal representación irreducible, y α los números cuánticos adicionales para caracterizar el estado, entre los cuales puede encontrarse la propia energía. Una consecuencia inmediata de (3) es que

$$H |\alpha, j, \mu\rangle = E(\alpha, j) |\alpha, j, \mu\rangle \quad (4)$$

es decir, el nivel energético caracterizado por (α, j) está d_j veces degenerado, siendo d_j la dimensión de la representación irreducible caracterizada por los números j . En efecto, en el espacio sustentado por todos los vectores con números cuánticos α, j , sede de una representación irreducible de \hat{G} , los vectores propios de H con valor propio fijo forman un subespacio estable bajo esta representación. Al ser ésta irreducible, dicho subespacio, si contiene algún vector no-nulo, debe llenar todo el espacio de la representación.

Sabemos que si en un sistema conservativo A es un observable que no depende explícitamente del tiempo y tal que $[A, H] = 0$, entonces este observable

es una constante del movimiento. Se puede afirmar, por tanto, que si H es conservativa e invariante bajo el grupo \hat{G} , todos los observables sin dependencia explícita del tiempo que se puedan construir a partir de los operadores de este grupo serán constantes del movimiento. Se ve, pues, que a cada grupo de transformaciones de simetría que dejan invariante H y que sean implementados por operadores unitarios, le corresponde un cierto número de leyes de conservación.

A continuación demostramos que la invariancia de $H(t)$ bajo el grupo \hat{G} implica que

$$[U(t, t_0), U_G] = 0 \quad \forall U_G \in \hat{G} \quad (1)$$

donde $U(t, t_0)$ es el operador de evolución temporal. En efecto, este operador es la solución de

$$U(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') U(t', t_0) \quad (2)$$

Si se multiplica esta ecuación por U_G a la izquierda y por U_G^\dagger a la derecha y se tiene en cuenta que $[U_G, H(t')] = 0$, $t_0 \leq t' \leq t$, se obtiene

$$U_G U(t, t_0) U_G^\dagger = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') U_G U(t', t_0) U_G^\dagger \quad (3)$$

Como $U(t, t_0)$ y $U_G U(t, t_0) U_G^\dagger$ satisfacen la misma ecuación integral y la solución de esta es única, son iguales, lo que demuestra (1).

Por tanto, dos estados que se deducen el uno del otro mediante una transformación $U_G \in \hat{G}$ conservan esta propiedad en el transcurso del tiempo. Nótese también que si en el instante t_0 se prepara el sistema en un estado puro representado por el vector $|\psi\rangle$, y en el instante $t > t_0$ se mide la probabilidad de que el sistema se halle en el estado $|\psi\rangle$, entonces de (1) se deduce

$$|\langle \psi | U(t, t_0) | \psi \rangle|^2 = |\langle \psi | U_G^\dagger U(t, t_0) U_G | \psi \rangle|^2 \quad (4)$$

es decir, el resultado obtenido por esta medida coincide con el que se obtendría partiendo en t_0 de $U_G |\psi\rangle$ y preguntando por la probabilidad de hallarlo, en el instante t , en $U_G |\psi\rangle$.

Consideremos las traslaciones de un sistema de N partículas en número y tipo fijos. El espacio de sus estados es, pues, coherente. Tomaremos como conjunto irreducible de observables el formado por sus posiciones \vec{r}_i , sus momentos \vec{p}_i y sus spins \vec{S}_i , $1 \leq i \leq N$. Bajo una traslación $G(\vec{a})$ caracterizada por el vector \vec{a} , los observables se transforman de acuerdo con las leyes

$$U(\vec{a}) \vec{r}_i U^\dagger(\vec{a}) = \vec{r}_i - \vec{a}$$

$$U(\vec{a}) \vec{p}_i U^\dagger(\vec{a}) = \vec{p}_i$$

$$U(\vec{a}) \vec{S}_i U^\dagger(\vec{a}) = \vec{S}_i$$

(1)

donde $U(\vec{a})$ será un operador unitario, que representa mirradualmente al grupo de Lie conexo, y simplemente conexo, de las traslaciones. La primera de estas relaciones es simple consecuencia de exigir que un estado localizado en el punto \vec{r} pase a estarlo, y con la misma "norma", en $\vec{r} + \vec{a}$, y del uso de $\langle \phi_0 | A_0 | \psi_0 \rangle = \langle \phi | A | \psi \rangle$. La segunda se obtiene de igual modo, admitiendo, por analogía dística, que el momento de una partícula no cambia bajo traslación. De las dos primeras relaciones de (1) resulta que el momento angular orbital \vec{L}_i , bajo la traslación, pasa a ser

$$U(\vec{a}) \vec{L}_i U^\dagger(\vec{a}) = \vec{L}_i - \vec{a} \times \vec{p}_i$$

(2)

Esto implica que el momento angular orbital intrínseco (es decir, con respecto al centro de masas del sistema) no cambia, y por analogía se admite que lo mismo sucede con el operador de spin.

El punto de vista adoptado aquí corresponde a traslados en \vec{a} el montaje experimental necesario para preparar el sistema. Esta interpretación operacional se puede llamar interpretación activa de la transformación de simetría. Existe otra interpretación, llamada interpretación pasiva, en la que son dos observadores distintos, relacionados entre sí por la transformación de simetría, los que contemplan el mismo montaje experimental, atribuyendo el resultado de una única preparación de ciertos estado generalmente distintos. Se tiene

$$U_G^{\text{pasiva}} = (U_G^{\text{activa}})^{-1}$$

Si se indica por \vec{D} el generador de las traslaciones, entonces de acuerdo con (3.3) y (1) se obtiene

$$[(\vec{r}_i)_j, D_k] = i\delta_{jk} \quad , \quad [\vec{p}_i, \vec{D}] = 0 \quad , \quad [\vec{S}_i, \vec{D}] = 0 \quad (1)$$

de donde se deduce que $\vec{D} = \sum_{i=1}^N \vec{p}_i / \hbar + \vec{k} I$, donde \vec{k} es un vector constante arbitrario que elegiremos igual a cero. Introduciendo $\vec{P} = \sum_{i=1}^N \vec{p}_i$

$$\vec{D} = \frac{1}{\hbar} \vec{P} \quad , \quad U(\vec{a}) = e^{-i\vec{a} \cdot \vec{D} / \hbar} \quad (2)$$

Notar que

$$(U(\vec{a}) \Psi)_{m_1, \dots, m_N}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t) = \Psi_{m_1, \dots, m_N}(\vec{r}_1 - \vec{a}, \dots, \vec{r}_N - \vec{a}; t) \quad (3)$$

donde m_i son las proyecciones de los spins individuales en una dirección arbitraria.

La ecuación (3) se deduce (sin spin y con $N=1$) inmediatamente

$$\langle \vec{x} | U(\vec{a}) | \Psi \rangle = e^{-\vec{a} \cdot \vec{\nabla}} \psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x} - \vec{a}) = \langle \vec{x} - \vec{a} | \Psi \rangle \quad (4)$$

y en tanto

$$U^\dagger(\vec{a}) | \vec{x} \rangle = U(-\vec{a}) | \vec{x} \rangle = | \vec{x} - \vec{a} \rangle \quad (5)$$

$$\Rightarrow U(\vec{a}) | \vec{x} \rangle = | \vec{x} + \vec{a} \rangle$$

En el caso anterior se ha considerado una transformación continua, en el sentido de que se podían generar por aplicaciones sucesivas de transformaciones infinitesimales.

Hay simetrías que no son continuas y una de ellas es la paridad, P , que "refleja", con respecto al origen de coordenadas, el equipo experimental de preparación de estados. El operador U_P , correspondiente a la transformación de paridad, debe ser tal que

$$U_P \vec{r}_i U_P^\dagger = -\vec{r}_i$$

$$U_P \vec{p}_i U_P^\dagger = -\vec{p}_i \quad (6)$$

$$U_P \vec{S}_i U_P^\dagger = +\vec{S}_i$$

donde se ha adoptado para \vec{S}_i la ley de transformación del momento angular orbital, deducible de las dos primeras.

El operador U_P así definido es tal que U_P^2 conmuta con todos los operadores de un conjunto irreducible de observables, y, por tanto, debe ser un múltiplo de la matriz identidad. Siendo además unitario, es evidente que $U_P^2 = e^{i\alpha} I$,

donde α es un número real. Se elegirá la fase de U_p de forma que $U_p^2 = I$ y por tanto $U_p = U_p^\dagger$; es decir, U_p es autoadjunto. Con esta elección de fase, el operador U_p es un observable con valores propios ± 1 . Al observable U_p se le llama paridad

Si para mayor sencillez, se considera una partícula A de spin S en un estado $|\vec{r}, m\rangle$, donde m es la proyección del spin (en unidades de \hbar) en una dirección fija, entonces el operador U_p actúa de forma

$$U_p |\vec{r}, m\rangle = \eta_A |\vec{r}, m\rangle \tag{1}$$

y por tanto

$$(U_p \psi)_m(\vec{r}) = \eta_A \psi_m(\vec{r}) \tag{2}$$

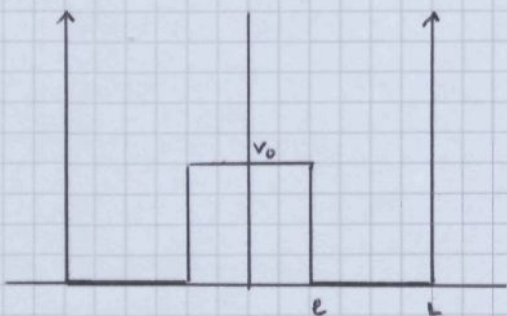
donde $\eta_A = \pm 1$, y se denomina paridad intrínseca de A . La no-dependencia del factor fase η_A de \vec{r}, m es consecuencia inmediata de lo segundo y genera relaciones de (1.6)

Si sucede que $\psi_m(-\vec{r}) = \eta_A \psi_m(\vec{r})$, entonces $\eta_A \eta_A$ recibe el nombre de paridad del estado considerado; sus valores propios posibles son ± 1 .

La generalización de (2) a un sistema de N partículas en número y tipo fijos es

$$(U_p \psi)_{m_1, \dots, m_N}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \eta_1 \dots \eta_N \psi_{m_1, \dots, m_N}(-\vec{r}_1, -\vec{r}_2, \dots, -\vec{r}_N) \tag{3}$$

donde η_i es la paridad de la partícula i .



Consideremos el pozo simétrico en una dimensión de la figura. El Hamiltoniano correspondiente es tal que

$$[H, U_p] = 0 \tag{4}$$

El estado fundamental es simétrico y sim modos. Cuando $V_0 \rightarrow \infty$ sera simplemente la suma de los estados fundamentales de los dos pozos

$$\psi_0(x, V_0 \rightarrow \infty) = A \left\{ \sin\left(\pi \frac{x-l}{L-l}\right) \theta(L-x) \theta(x-l) + \sin\left(\pi \frac{x+l}{l-L}\right) \theta(L+x) \theta(-x-l) \right\} \tag{5}$$

con energía

$$E_0(V_0 \rightarrow \infty) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{(L-l)^2} \tag{6}$$

El primer estado excitado será antisimétrico porque tiene un nodo, que debe estar en el origen. Cuando $V_0 \rightarrow \infty$ será

$$\psi_1(x, V_0 \rightarrow \infty) = A \left\{ -\sin\left(\pi \frac{x-l}{L-l}\right) \theta(L-x) \theta(x-l) + \sin\left(\pi \frac{x+l}{e-l}\right) \theta(L+x) \theta(-x-e) \right\} \quad (1)$$

con la misma energía $E_1 = E_0$. Hay una degeneración porque para $V_0 \rightarrow \infty$ son dos problemas de Mecánica Cuántica desconectados uno en $[-L, -e]$ y otro en $[e, L]$. Pero sin el límite $V_0 \rightarrow \infty$ entonces obviamente $E_1 > E_0$. Consideremos ahora los estados

$$|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_0\rangle + |\psi_1\rangle) \quad (2)$$

$$|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_0\rangle - |\psi_1\rangle)$$

Cuando $V_0 \rightarrow \infty$, $|L\rangle$ estará totalmente en $[-L, -e]$ y $|R\rangle$ totalmente en $[e, L]$; La partícula está en el pozo de la izquierda o en el de la derecha. Pero si no se hace el límite $V_0 \rightarrow \infty$ no se trata de estados estacionarios, pues si en $t=0$ $|\psi\rangle = |L\rangle$ entonces

$$\begin{aligned} |L(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ e^{-iE_0 t/\hbar} |\psi_0\rangle + e^{-iE_1 t/\hbar} |\psi_1\rangle \right\} \\ &= \frac{1}{2} e^{-iE_0 t/\hbar} \left\{ \left[1 + e^{-i(E_1 - E_0)t/\hbar} \right] |L\rangle + \left[1 - e^{-i(E_1 - E_0)t/\hbar} \right] |R\rangle \right\} \quad (2) \end{aligned}$$

y el sistema oscila entre $|L\rangle$ y $|R\rangle$ con una frecuencia

$$\nu = \frac{E_1 - E_0}{h} \quad (3)$$

Así

$$|L\left(\frac{h}{2(E_1 - E_0)}\right)\rangle = e^{-i\pi E_0/(E_1 - E_0)} |R\rangle \quad (4)$$

y la partícula ha pasado del pozo de la izquierda al de la derecha. Esto es el efecto túnel.

La molécula de amoníaco NH_3 tiene oscilaciones del átomo de hidrógeno de $\nu = 24000 \text{ MHz}$, $\lambda \approx 1 \text{ cm}$. Esto corresponde a $E_1 - E_0 \approx 10^{-23} \text{ J} \approx 10^{-4} \text{ eV}$

Si quisiéramos calcular el momento dipolar eléctrico del amoníaco en el estado fundamental

$$d_{e_0} \equiv q_N \langle \psi_0 | x | \psi_0 \rangle \quad (5)$$

donde q_N es la carga efectiva del nitrógeno. Como $|\psi_0\rangle$ es un estado propio de la paridad

$$\langle \psi_0 | x | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | U_p^2 x U_p^2 | \psi_0 \rangle = - \langle \psi_0 | x | \psi_0 \rangle \Rightarrow d_{e_0} = 0 \tag{1}$$

y el momento dipolar eléctrico sería nula. Pero en el estado $|L\rangle$

$$d_{eL} = q_N \langle L | x | L \rangle = q_N \text{Re} \langle \psi_0 | x | \psi_L \rangle \neq 0 \tag{2}$$

y esta cantidad no es nula. Es necesario tener esto en cuenta cuando se habla de momentos dipolares eléctricos de sistemas cuánticos.

Consideremos ahora las rotaciones. Sea $G(\hat{m}, \theta)$ una rotación caracterizada por un eje de giro \hat{m} y un ángulo de giro θ comprendido entre 0 y π , y medido en el sentido de la regla del tornillo. Bajo esta notación del montaje experimental, un punto P de coordenada \vec{r} unido al sistema pasa a otra posición de coordenadas \vec{r}' dada por

$$\vec{r}' = R(\hat{m}, \theta) \vec{r} \tag{3}$$

$$R_{ij}(\hat{m}, \theta) = \cos \theta \delta_{ij} + (1 - \cos \theta) \hat{m}_i \hat{m}_j - \sin \theta \epsilon_{ijk} \hat{m}_k$$

El operador unitario $U(\hat{m}, \theta)$, asociado a la rotación considerada y actuando sobre el sistema de N partículas antes introducido, debe transformar las observables de acuerdo con

$$\begin{aligned} U(\hat{m}, \theta) \vec{r}_i U^\dagger(\hat{m}, \theta) &= R^{-1}(\hat{m}, \theta) \vec{r}_i \\ U(\hat{m}, \theta) \vec{p}_i U^\dagger(\hat{m}, \theta) &= R^{-1}(\hat{m}, \theta) \vec{p}_i \\ U(\hat{m}, \theta) \vec{S}_i U^\dagger(\hat{m}, \theta) &= R^{-1}(\hat{m}, \theta) \vec{S}_i \end{aligned} \tag{4}$$

La primera de (4) es consecuencia de (3) y de (1.4), mientras que la segunda se sigue de (1.4), aceptando la ley clásica de transformación del momento de una partícula bajo rotaciones. Se ha adoptado para la ley de transformación del operador de spin la misma que para el momento angular orbital, que se puede deducir de las dos primeras.

Si se indica por \vec{I} el generador de las rotaciones, de forma que localmente

$$U(\hat{m}, \theta) = e^{-i\theta \hat{m} \cdot \vec{I}} \tag{5}$$

como

$$R_{ij}(\hat{m}, \theta) = d_{ij} + \theta \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{m}_k$$

$$\Rightarrow R_{ij}^{-1}(\hat{m}, \theta) = d_{ij} + \theta \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{m}_k \quad (1)$$

Entonces de (3.2)

$$[A_i, I_j] = i \epsilon_{ijk} A_k \quad (2)$$

donde \vec{A} es uno cualquiera de los conjuntos \vec{r}_i, \vec{p}_i y \vec{s}_i y por tanto

$$\vec{I} = \frac{1}{\hbar} \vec{J} = \frac{1}{\hbar} (\vec{L} + \vec{S}) = \frac{1}{\hbar} \sum_{i=1}^N [\vec{r}_i \times \vec{p}_i + \vec{s}_i] \quad (3)$$

es decir es proporcional al momento angular total \vec{J} . La constante vectorial aditiva arbitraria en \vec{I} debe ser nula si queremos que $U(\hat{m}, \theta) |\vec{x}\rangle = |R\vec{x}\rangle$. Comprobación (N=1)

$$[r_i, I_j] = \frac{1}{\hbar} [r_i, L_j + S_j] = \frac{1}{\hbar} [r_i, \epsilon_{jkl} r_k p_l] = \frac{1}{\hbar} \epsilon_{jkl} r_k [r_i, p_l] = i \epsilon_{jki} r_k = i \epsilon_{ijk} r_k$$

análogamente para los otros casos.

El operador unitario correspondiente a la rotación $R(\hat{m}, \theta)$ y de acuerdo a (4.5) es por tanto

$$U(\hat{m}, \theta) = \pm e^{-i\theta \hat{m} \cdot \vec{J} / \hbar} \quad (5)$$

donde el signo \pm proviene del carácter proyectivo de la asociación $R(\hat{m}, \theta) \rightarrow U(\hat{m}, \theta)$ ineludible globalmente. Se puede probar que estos operadores forman un grupo que es isomorfo al grupo de rotaciones si el sistema contiene un número par de partículas de spin semientero. Cuando el número de tales partículas es impar, entonces existe sólo un homomorfismo dos a uno entre ambos grupos. En efecto consideremos una partícula simple de spin $1/2$ con $\vec{J} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$

$$U(\hat{m}, \theta) = e^{-i\theta \hat{m} \cdot \vec{J} / \hbar} = e^{-i\theta \hat{m} \cdot \vec{\sigma} / 2}$$

$$= \cos(\theta/2) - i \hat{m} \cdot \vec{\sigma} \sin(\theta/2) \quad (6)$$

si tenemos en cuenta (2.1)

$$U[R(\hat{k}, \pi) R(\hat{k}, \pi)] = \omega U(R(\hat{k}, \pi)) U(R(\hat{k}, \pi)) =$$

$$= \omega [\cos \pi/2 - i \sigma_3 \sin \pi/2] [\cos \pi/2 - i \sigma_3 \sin \pi/2] = -\omega I$$

Por otra parte

$$U[R(\vec{e}, n)R(\vec{e}, m)] = U[R(\vec{e}, 2m)] = U(I) = I \quad (1)$$

y por tanto $w = -1$. Las representaciones del grupo de rotaciones para un sistema con un número impar de partículas de spin semientero son birracionales, es decir, es necesario hacer una rotación total de ángulo 4π para recuperar la identidad.

Veamos como se transforma la función de ondas. Empecemos considerando una partícula sin spin. Sabemos que

$$|\vec{x}\rangle \xrightarrow{R(\hat{n}, \theta)} U(\hat{n}, \theta) |\vec{x}\rangle \propto |R(\hat{n}, \theta)\vec{x}\rangle \quad (2)$$

Se puede probar que se puede elegir

$$U(\hat{n}, \theta) |\vec{x}\rangle = |R(\hat{n}, \theta)\vec{x}\rangle \quad (3)$$

y por tanto

$$[U(\hat{n}, \theta)\psi](\vec{x}) = \langle \vec{x} | U(\hat{n}, \theta) |\psi\rangle = \langle R^{-1}(\hat{n}, \theta)\vec{x} | \psi\rangle = \psi(R^{-1}(\hat{n}, \theta)\vec{x}) \quad (4)$$

Consideremos ahora una partícula con spin S y tomemos como C.C.O.C. $\{|\vec{x}, S_z\rangle\}$. La función de ondas es

$$\psi_m(\vec{x}) = \langle \vec{x}, m | \psi \rangle, \quad m = -S, -S+1, \dots, S-1, S \quad (5)$$

Entonces

$$\begin{aligned} [U(\hat{n}, \theta)\psi]_m(\vec{x}) &= \langle \vec{x}, m | U(\hat{n}, \theta) |\psi\rangle = \langle \vec{x}, m | \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \hat{n} \cdot \hat{S}\right\} \exp\left\{i \frac{c}{\hbar} \hat{n} \cdot \vec{L}\right\} |\psi\rangle \\ &= \sum_{m'} \int d^3x' \langle \vec{x}, m | \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \hat{n} \cdot \hat{S}\right\} |\vec{x}', m'\rangle \langle \vec{x}', m' | \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \hat{n} \cdot \vec{L}\right\} |\psi\rangle \\ &= \sum_{m'} \langle m | \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \hat{n} \cdot \hat{S}\right\} | m' \rangle \psi_{m'}(R^{-1}\vec{x}) \end{aligned}$$

Así:

$$D^{(S)}(R(\hat{n}, \theta)) \equiv \langle m | \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \hat{n} \cdot \hat{S}\right\} | m' \rangle \quad (6)$$

$$\begin{aligned} [U(\hat{n}, \theta)\psi]_m(\vec{x}) &= \pm \sum_{m'} D_{mm'}^{(S)} [R(\hat{n}, \theta)] \psi_{m'} [R^{-1}(\hat{n}, \theta)\vec{x}] = \\ &= \pm \left(\exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \hat{n} \cdot \hat{S}\right\} \psi \right)_m(\vec{x}) \quad (7) \end{aligned}$$

Consideremos la interacción de un neutrón con un campo magnético \vec{B} que dependamos constante y uniforme:

$$V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

$$\vec{\mu} = g_m \frac{\hbar |e|}{2M_p c} \frac{1}{\hbar} \vec{S}, \quad \vec{S} = \hbar \frac{\vec{\sigma}}{2}, \quad g_m/2 = -1.91304275(45) \quad (1)$$

donde g_m es el factor giromagnético

$$\frac{\hbar |e|}{2M_p c} = 3.152451(6(29)) \times 10^{-16} \text{ MeV T}^{-1} \quad (2)$$

Como $[\vec{L}, \vec{S}] = 0$, el problema es separable y podemos considerar el neutrón en reposo y si tomamos $\vec{B} = (0, 0, B)$ entonces

$$H = \omega S_z \quad \omega = \frac{|g_m| |e| B}{2M_p c} \quad (3)$$

Entonces

$$U(t) = \exp \left\{ -i \frac{1}{2} t \omega \sigma_z \right\} = \cos \frac{\omega t}{2} I - i \sigma_z \sin \frac{\omega t}{2} \quad (4)$$

Notar que

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | S_x | \psi(t) \rangle &= \frac{\hbar}{2} \langle \psi(0) | \left\{ \cos \frac{\omega t}{2} I + i \sigma_z \sin \frac{\omega t}{2} \right\} S_x \left\{ \cos \frac{\omega t}{2} I - i \sigma_z \sin \frac{\omega t}{2} \right\} | \psi(0) \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2} \langle \psi(0) | \left\{ \cos^2 \frac{\omega t}{2} \sigma_x + i \sin \frac{\omega t}{2} \cos \frac{\omega t}{2} [\sigma_z, \sigma_x] + \sin^2 \frac{\omega t}{2} \sigma_z \sigma_x \sigma_z \right\} | \psi(0) \rangle \\ &= \cos \omega t \langle \psi(0) | S_x | \psi(0) \rangle - \sin \omega t \langle \psi(0) | S_y | \psi(0) \rangle \end{aligned}$$

$$\langle \psi(t) | S_y | \psi(t) \rangle = \cos \omega t \langle \psi(0) | S_y | \psi(0) \rangle + \sin \omega t \langle \psi(0) | S_x | \psi(0) \rangle$$

$$\langle \psi(t) | S_z | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | S_z | \psi(0) \rangle$$

es.

$$\begin{aligned} \langle \Psi(t) | S_x | \Psi(t) \rangle &= \cos \omega t \langle \Psi(0) | S_x | \Psi(0) \rangle - \sin \omega t \langle \Psi(0) | S_y | \Psi(0) \rangle \\ \langle \Psi(t) | S_y | \Psi(t) \rangle &= \cos \omega t \langle \Psi(0) | S_y | \Psi(0) \rangle + \sin \omega t \langle \Psi(0) | S_x | \Psi(0) \rangle \\ \langle \Psi(t) | S_z | \Psi(t) \rangle &= \langle \Psi(0) | S_z | \Psi(0) \rangle \end{aligned} \quad (5)$$

Esta evolución se denomina precesión de Larmor y su periodo es

$$T_p = \frac{2\pi}{\omega} \quad (6)$$

Consideremos

$$|\Psi(0)\rangle = \alpha_+ |+\rangle + \alpha_- |-\rangle \tag{1}$$

entonces

$$|\Psi(t)\rangle = U(t) |\Psi(0)\rangle = \left\{ \cos \frac{\omega t}{2} - i \sigma_z \sin \frac{\omega t}{2} \right\} |\alpha_+ |+\rangle + \alpha_- |-\rangle \rangle$$

$$|\Psi(t)\rangle = \alpha_+ e^{-i\omega t/2} |+\rangle + \alpha_- e^{+i\omega t/2} |-\rangle \tag{2}$$

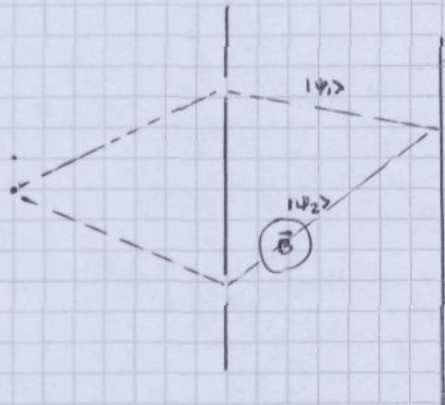
y por tanto el periodo de los estados es

$$T_c = \frac{4\pi}{\omega} = 2T_p \tag{3}$$

Notemos que

$$|\Psi(t = T_c/2)\rangle = -|\Psi(0)\rangle \tag{4}$$

Para observar esta fase se ha usado interferometría de neutrones [S.A. Werner, R. Colella, A.W. Overhauser y C.F. Eugene Phys. Rev. Lett. 35, 1053 (1975)] [H. Rauch, A. Zeilinger, G. Badurek, A. Wilfing, W. Baumgartner y U. Bonse Phys. Lett. A 54, 425 (1975)]



$$|\psi_1\rangle = \alpha_+ |+\rangle + \alpha_- |-\rangle$$

$$|\psi_2\rangle = \beta_+ e^{-i\omega t/2} |+\rangle + \beta_- e^{+i\omega t/2} |-\rangle$$

$$\langle \psi_1 + \psi_2 | \psi_1 + \psi_2 \rangle = |\alpha_+ + \beta_+ e^{-i\omega t/2}|^2 + |\alpha_- + \beta_- e^{+i\omega t/2}|^2$$

$$= |\alpha_+|^2 + |\beta_+|^2 + |\alpha_-|^2 + |\beta_-|^2 +$$

$$+ (\alpha_+ \beta_+^* + \beta_+ \alpha_+^*) \cos \omega t/2 + i(\alpha_+ \beta_+^* - \beta_+ \alpha_+^*) \sin \omega t/2$$

$$+ (\alpha_- \beta_-^* + \beta_- \alpha_-^*) \cos \omega t/2 - i(\alpha_- \beta_-^* - \beta_- \alpha_-^*) \sin \omega t/2$$

$$\langle \psi_1 + \psi_2 | \psi_1 + \psi_2 \rangle = C_1 + C_2 \cos \left(\frac{\omega t}{2} + \phi \right)$$

y para ir de un máximo de interferencia al siguiente $T = 4\pi/\omega$

V. - MOMENTO ANGULAR . POTENCIALES CENTRALES

En un sistema físico formado por N partículas con coordenadas cartesianas $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$ y momentos conjugados $\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N$, respectivamente, se define la variable dinámica momento angular orbital

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^N \vec{r}_i \times \vec{p}_i \quad (1)$$

De acuerdo con el postulado VI de cuantificación canónica, el operador correspondiente al observable momento angular orbital viene dado por

$$\vec{L} = -i\hbar \sum_{i=1}^N \vec{r}_i \times \vec{\nabla}_i \quad (2)$$

que son esencialmente autoadjuntos en $\mathcal{D}(\mathbb{R}^{3N})$ (funciones C^∞ , de decrecimiento rápido). Se encuentra inmediatamente

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k \quad (3)$$

El momento angular total es

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (4)$$

donde \vec{S} es el spin y tanto \vec{J} como \vec{S} satisfacen relaciones análogas a (3)

Sea \vec{J} el operador momento angular total de un sistema físico. Se trata de encontrar las representaciones irreducibles del momento angular. En primer lugar definiremos el operador cuadrado del momento angular

$$\vec{J}^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2 \quad (5)$$

que cumple

$$[\vec{J}^2, J_i] = 0 \quad \forall i \quad (6)$$

Dados tres operadores autoadjuntos \vec{J} , con las reglas de conmutación

$$[J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k \quad (7)$$

definidos en un dominio denso y estable bajo los mismos, de forma que \vec{J}^2 sea esencialmente autoadjunto sobre el dominio común, se demuestra que son generadores de una representación unitaria continua de $SU(2)$. Y un famoso teorema de Peter-Weyl afirma que tales representaciones son suma directa

de irreducibles finitas, por ser $SU(2)$ compacto. Nos vamos así condados a estudiar representaciones irreducibles de [1.7] en un espacio de Hilbert de dimensión finita; la solución general se obtendrá por suma directa de las así halladas.

Consideremos, pues, el problema de determinar tres operadores autoadjuntos \vec{J} , en un \mathcal{H} de dimensión finita, satisfaciendo [1.7] de forma irreducible. La relación [1.6] nos dice que \vec{J}^2 conmuta con \vec{J} , y por ser la representación irreducible, \vec{J}^2 debe ser un múltiplo de la identidad, digamos $\hbar^2 J(J+1) I$, pudiéndose tomar $J \geq 0$ sin pérdida de generalidad, por ser \vec{J}^2 un operador no negativo. Como los componentes de \vec{J} no conmutan en general, no pueden diagonalizarse simultáneamente. Fijémosnos en una de ellas, digamos la J_3 , y sea $|JM\rangle$ un vector propio normalizado de la misma, donde el índice J nos recuerda el valor constante de \vec{J}^2 , y $M\hbar$ es el valor propio de J_3 :

$$\vec{J}^2 |JM\rangle = \hbar^2 J(J+1) |JM\rangle, \quad J_3 |JM\rangle = M\hbar |JM\rangle \quad (1)$$

Los cantidades $J \geq 0$ y M son reales, y un estado $|JM\rangle$ se dice que tiene momento angular J , que la componente \vec{J} en la dirección de cuantificación (o sea la tercera componente en este caso) es M (en unidades \hbar).

Para determinar J y el espectro de J_3 introduciremos los operadores

$$J_{\pm} = J_1 \pm iJ_2, \quad J_{\pm}^{\dagger} = J_{\mp} \quad (2)$$

De donde

$$[J_3, J_{\pm}] = \pm \hbar J_{\pm}, \quad [J_+, J_-] = 2\hbar J_3 \quad (3)$$

$$\vec{J}^2 = \frac{1}{2} (J_+ J_- + J_- J_+) + J_3^2 \quad (4)$$

$$J_- J_+ = \vec{J}^2 - J_3 (J_3 + \hbar), \quad J_+ J_- = \vec{J}^2 - J_3 (J_3 - \hbar) \quad (5)$$

Haciendo uso de estas igualdades

$$J_- J_+ |JM\rangle = \hbar^2 [J(J+1) - M(M+1)] |JM\rangle = \hbar^2 (J-M)(J+M+1) |JM\rangle \quad (6)$$

$$J_+ J_- |JM\rangle = \hbar^2 [J(J+1) - M(M-1)] |JM\rangle = \hbar^2 (J+M)(J-M+1) |JM\rangle$$

y por tanto

$$\|J_{\pm} |JM\rangle\|^2 = \hbar^2 (J \mp M)(J \pm M + 1)$$

En consecuencia

$$-J \leq M \leq J \tag{1}$$

$$J_+ |JM\rangle = 0 \quad \text{si y sólo si } M = J \tag{2}$$

$$J_- |JM\rangle = 0 \quad \text{si y sólo si } M = -J$$

Por otra parte usando los reglas de conmutación

$$\vec{J}^2 (J_{\pm} |JM\rangle) = J_{\pm} \vec{J}^2 |JM\rangle = \hbar^2 J(J+1) (J_{\pm} |JM\rangle) \tag{3}$$

$$J_3 (J_{\pm} |JM\rangle) = (J_{\pm} J_3 \pm \hbar J_3) |JM\rangle = \hbar (M \pm 1) (J_{\pm} |JM\rangle)$$

lo que indica que al aplicar J_+ (J_-) al estado $|JM\rangle$, con $M \neq J$ ($M \neq -J$) se obtiene un vector, que normalizado indicamos por $|J, M \pm 1\rangle$. Teniendo en cuenta que $|JM\rangle$ se ha tomado normalizado se puede tomar

$$J_{\pm} |JM\rangle = \hbar \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} |J, M \pm 1\rangle \tag{4}$$

Esta elección de fases relativas hace que los elementos de matriz de J_{\pm} sean todos no negativos y se llama convenio de Condon-Shortley

Notese que si se parte del estado $|JM\rangle$ y se aplica repetidamente el operador J_+ o el J_- se obtendrán los estados

$$--- |J, M-2\rangle, |J, M-1\rangle, |JM\rangle, |J, M+1\rangle, |J, M+2\rangle, --- \tag{5}$$

y para no entrar en contradicción con (1) los estados $|JJ\rangle$ y $|J-J\rangle$ deben formar parte de esta cadena, lo cual implica, juntamente con la condición $J \geq 0$, que J debe ser un número entero o semi-entero no negativo, y que M difiera de J en un número entero. En resumen se puede afirmar que los valores posibles de J son $J=0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$ y que para un valor dado de J los valores posibles de M son $-J, -J+1, \dots, J-1, J$, no degenerados si el sistema \vec{J} es irreducible.

Notese que en espacio $X^{(J)}$, sede de la representación irreducible $\mathcal{D}^{(J)}$, a los operadores \vec{J} y \vec{J}^2 les corresponden las matrices hermiticas $(2J+1) \times (2J+1)$

$$\langle JM' | J_1 | JM \rangle = \frac{1}{2} \hbar [\delta_{M', M+1} + \delta_{M', M-1}] \sqrt{J(J+1) - MM'} \tag{6}$$

$$\langle JM' | J_2 | JM \rangle = \frac{i}{2} \hbar [\delta_{M', M+1} - \delta_{M', M-1}] \sqrt{J(J+1) - MM'}$$

$$\langle JM' | J_3 | JM \rangle = \hbar \delta_{M', M} \quad \langle JM' | \vec{J}^2 | JM \rangle = \hbar^2 \delta_{M', M} J(J+1)$$

Para $J = 1/2$

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

(1)

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

donde $\vec{\sigma}$ son los matrices de spin de Pauli. Propiedades importantes son

$$[\sigma_j, \sigma_k] = 2i \epsilon_{jke} \sigma_e$$

$$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2 \delta_{ij} I, \quad \sigma_j \sigma_k = \delta_{jk} I + i \epsilon_{jke} \sigma_e \tag{2}$$

$$(\sigma_j)_{\alpha\beta} (\sigma_j)_{\gamma\delta} = 2 \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta}$$

Veamos ahora lo que sucede con el momento angular orbital para una partícula

$$\vec{L} = -i\hbar \vec{r} \times \vec{\nabla} \tag{3}$$

En coordenadas esféricas sus componentes y su cuadrado adoptan las expresiones

$$L_1 = i\hbar \left\{ \sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right\}$$

$$L_2 = i\hbar \left\{ -\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right\}$$

(4)

$$L_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$L^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right\}$$

y por tanto las ecuaciones equivalentes a (2.1) son

$$\left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + L(L+1) \right\} F_{LM}(\theta, \phi) = 0 \tag{5}$$

$$\left\{ i \frac{\partial}{\partial\phi} + M \right\} F_{LM}(\theta, \phi) = 0$$

La última ecuación implica que la dependencia en ϕ de $F_{LM}(\theta, \phi)$ es de la forma $e^{iM\phi}$. Como los puntos (r, θ, ϕ) y $(r, \theta, \phi + 2\pi)$ coinciden, parece natural concluir que M debe ser un número entero y así es. Según esto y lo dicho anteriormente se puede afirmar que los valores posibles de L son $L = 0, 1, 2, \dots$ es decir, el momento angular orbital es siempre entero. Dado L los valores posibles de M son $-L, -L+1, \dots, L-1, L$ y M recibe el nombre de número cuántico magnético.

Finalmente

$$F_{LM}(\theta, \phi) = Y_L^M(\theta, \phi) \tag{1}$$

que son los llamados armónicos esféricos

$$Y_L^M(\theta, \phi) = \left\{ \frac{2L+1}{4\pi} \frac{(L-M)!}{(L+M)!} \right\}^{1/2} P_L^M(\cos\theta) e^{iM\phi}, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi \tag{2}$$

donde $P_L^M(x)$ son los polinomios asociados de Legendre

$$P_L^M(x) = (1-x^2)^{M/2} \frac{(-1)^M}{L! 2^L} \frac{d^{L+M}}{dx^{L+M}} (x^2-1)^L \tag{3}$$

se puede probar

$$Y_L^{M*}(\theta, \phi) = (-1)^M Y_L^{-M}(\theta, \phi) \tag{4}$$

$$Y_L^M(\pi-\theta, \phi+\pi) = (-1)^L Y_L^M(\theta, \phi) \tag{5}$$

$$Y_0^0(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \tag{6}$$

$$Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \quad Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\phi} \tag{7}$$

$$\int d\Omega Y_L^{M*}(\theta, \phi) Y_L^M(\theta, \phi) = \delta_{LL} \delta_{MM} \tag{8}$$

$$\sum_M Y_L^{M*}(\theta, \phi) Y_L^M(\theta, \phi) = \frac{2L+1}{4\pi} \tag{9}$$

$$Y_L^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}} P_L(\cos\theta) \tag{10}$$

$$P_L(\cos\theta) = \frac{4\pi}{2L+1} \sum_{M=-L}^{+L} Y_L^{M*}(\theta, \phi_1) Y_L^M(\theta_2, \phi_2) \quad \cos\theta = \hat{m}_1 \cdot \hat{m}_2 \tag{11}$$

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = 4\pi \sum_{L=0}^{\infty} i^L j_L(kr) \sum_{M=-L}^{+L} Y_L^{M*}(\hat{k}) Y_L^M(\hat{r}) \tag{12}$$

donde $P_L(x)$ es el polinomio de Legendre y $j_L(x)$ son los funciones esféricas de Bessel

Intentemos ahora hallar la representación matricial de los operadores rotación. Una forma de caracterizar una rotación es mediante los tres ángulos de Euler:

Sea $Ox_1x_2x_3$ el sistema de referencia original. Definamos tres rotaciones de la forma siguiente:

i) Una rotación positiva de ángulo α ($0 \leq \alpha < 2\pi$) alrededor del eje Ox_3 .

Sea $O\xi_1\xi_2\xi_3$ la nueva referencia transformada de la $Ox_1x_2x_3$ bajo esta rotación

ii) Una rotación positiva de ángulo β ($0 \leq \beta \leq \pi$) alrededor del eje $O\xi_2$

Sea $O\eta_1\eta_2\eta_3$ la nueva referencia

iii) Una rotación positiva de ángulo γ ($0 \leq \gamma \leq 2\pi$) alrededor del eje $O\eta_3$.

Sea $Ox'_1x'_2x'_3$ la referencia final.

La rotación acúrra caracterizada por estos ángulos de Euler (α, β, γ) la denotaremos por $R(\alpha, \beta, \gamma)$

$$R^{-1}(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} \cos \gamma & \sin \gamma & 0 \\ -\sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & -\sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma - \sin \alpha \sin \gamma & -\cos \alpha \cos \beta \sin \gamma - \sin \alpha \cos \gamma & \cos \alpha \sin \beta \\ \sin \alpha \cos \beta \cos \gamma + \cos \alpha \sin \gamma & -\sin \alpha \cos \beta \sin \gamma + \cos \alpha \cos \gamma & \sin \alpha \sin \beta \\ -\sin \beta \cos \gamma & \sin \beta \sin \gamma & \cos \beta \end{pmatrix} \quad (1)$$

El operador correspondiente a esta rotación es

$$U[R(\alpha, \beta, \gamma)] = e^{-i\gamma J_3 / \hbar} e^{-i\beta J_2 / \hbar} e^{-i\alpha J_3 / \hbar} \quad (2)$$

Ahora bien

$$\begin{aligned} e^{-i\beta J_2 / \hbar} &= e^{-i\alpha J_3 / \hbar} e^{-i\beta J_2 / \hbar} e^{+i\alpha J_3 / \hbar} \\ e^{-i\gamma J_3 / \hbar} &= e^{-i\beta J_2 / \hbar} e^{-i\gamma J_3 / \hbar} e^{+i\beta J_2 / \hbar} \\ &= e^{-i\alpha J_3 / \hbar} e^{-i\beta J_2 / \hbar} e^{-i\gamma J_3 / \hbar} e^{+i\alpha J_3 / \hbar} e^{+i\beta J_2 / \hbar} e^{-i\alpha J_3 / \hbar} \end{aligned}$$

de donde

$$U[R(\alpha, \beta, \gamma)] = e^{-i\alpha J_3 / \hbar} e^{-i\beta J_2 / \hbar} e^{-i\gamma J_3 / \hbar} \quad (3)$$

Entonces

$$\begin{aligned} U[R(\alpha, \beta, \gamma)] |JM\rangle &= \sum_{M'} \langle JM' | U[R(\alpha, \beta, \gamma)] |JM\rangle |JM'\rangle \equiv \\ &= \sum_{M'} D_{M'M}^J(\alpha, \beta, \gamma) |JM'\rangle \end{aligned} \quad (4)$$

donde $D_{M'M}^J(\alpha, \beta, \gamma)$ no son más que los elementos de $U[R(\alpha, \beta, \gamma)]$ en la base formada por los vectores $|JM\rangle$. Notar que

$$D_{M'M}^J(\alpha\beta\gamma) \equiv \langle JM' | e^{-i\alpha J_z/\hbar} e^{-i\beta J_y/\hbar} e^{-i\gamma J_z/\hbar} | JM \rangle$$

$$\equiv e^{-i\alpha M'} d_{M'M}^J(\beta) e^{-i\gamma M} \tag{1}$$

Para $d_{M'M}^J(\beta)$ hay una expresi3n general atribuida a Wigner.

Consideremos $J = 1/2$

$$d_{M'M}^{1/2}(\beta) = \langle 1/2 M' | e^{-i\beta \sigma_z/2} | 1/2 M \rangle = \langle 1/2 M' | \{ \cos(\beta/2) I - i \sin(\beta/2) \sigma_z \} | 1/2 M \rangle$$

$$= \begin{pmatrix} \cos \beta/2 & -\sin \beta/2 \\ \sin \beta/2 & \cos \beta/2 \end{pmatrix} \tag{2}$$

Consideremos $J = 1$; en este caso

$$J_x = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y^2 = \frac{1}{2} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z^3 = \hbar^2 J_z \tag{3}$$

$$d_{M'M}^1(\beta) = \langle 1 M' | e^{-i\beta J_y/\hbar} | 1 M \rangle = \langle 1 M' |$$

$$= \langle 1 M' | \left\{ I - \sin \beta \frac{i J_x}{\hbar} + (1 - \cos \beta) \frac{J_x^2}{\hbar^2} \right\} | 1 M \rangle =$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1 + \cos \beta}{2} & -\frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & \frac{1 - \cos \beta}{2} \\ \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & \cos \beta & -\frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} \\ \frac{1 - \cos \beta}{2} & \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & \frac{1 + \cos \beta}{2} \end{pmatrix} \tag{4}$$

El siguiente problema que queremos enfocan es el de la suma de dos momentos angulares. Sean \vec{J}_1 y \vec{J}_2 los operadores momentos angulares de dos subsistemas 1 y 2, mutuamente independientes, es decir tales que $[\vec{J}_1, \vec{J}_2] = 0$. Para el sistema total, uni3n de 1 y 2, el operador $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$, que satisface las reglas de conmutaci3n de los operadores momentos angulares, es el operador momento angular del sistema 1+2.

Los operadores $\vec{J}_1^2, (J_1)_z, \vec{J}_2^2, (J_2)_z$, conmutan entre si, y pueden completarse a un C.C.O.C. aadiendo nuevos observables A que conmutan con \vec{J}_1 y \vec{J}_2 . Un elemento

de la base ortogonal asociada se designará por $|J_1, M_1, J_2, M_2\rangle$. Estos vectores satisfacen

$$\begin{aligned} \vec{J}_i^2 |J_1, M_1, J_2, M_2\rangle &= \hbar^2 J_i(J_i+1) |J_1, M_1, J_2, M_2\rangle \\ |J_i\rangle_z |J_1, M_1, J_2, M_2\rangle &= \hbar M_i |J_1, M_1, J_2, M_2\rangle \end{aligned} \quad (1)$$

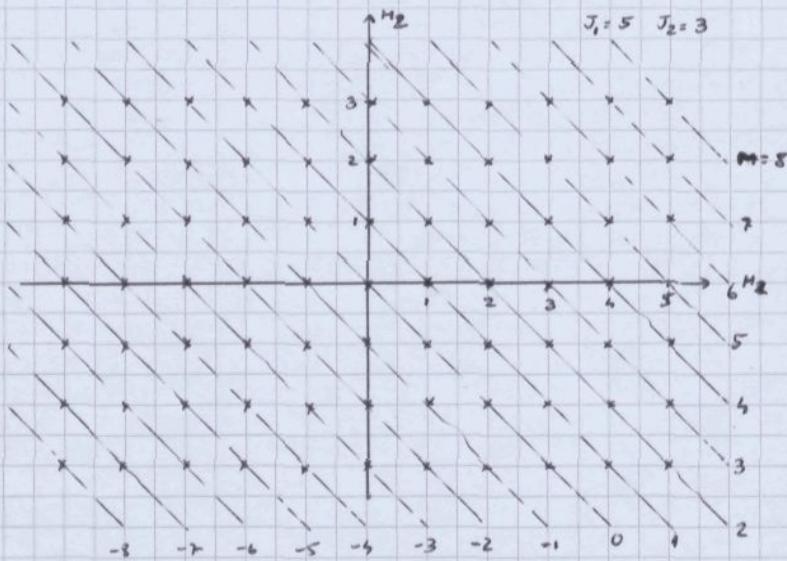
Los valores α corresponden a los observables A y serán omitidos en general, entendiéndose que nos restringimos a un subespacio (quizá impropio) de estados. Para unos valores dados de J_1 y J_2 estos vectores engendran un espacio $(2J_1+1)(2J_2+1)$ -dimensional que designaremos por $\mathcal{H}^{(J_1, J_2)}$. Puesto que \vec{J}^2 conmuta con \vec{J}_1^2 y \vec{J}_2^2 se podrán hallar los vectores de $\mathcal{H}^{(J_1, J_2)}$ que sean estados propios simultáneos de $\vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2, \vec{J}^2$ y J_z . Estos vectores normalizados se denotarán por $|J, J_2, JM\rangle$ y por definición satisfacen

$$\begin{aligned} \vec{J}_i^2 |J, J_2, JM\rangle &= \hbar^2 J_i(J_i+1) |J, J_2, JM\rangle \quad i=1, 2 \\ \vec{J}^2 |J, J_2, JM\rangle &= \hbar^2 J(J+1) |J, J_2, JM\rangle \\ J_z |J, J_2, JM\rangle &= \hbar M |J, J_2, JM\rangle \end{aligned} \quad (2)$$

El problema que se plantea ahora es determinar, dados J_1 y J_2 , los valores posibles de J y M y su degeneración. A este fin se debe tener en cuenta que

$$J_z |J_1, M_1, J_2, M_2\rangle = \hbar (M_1 + M_2) |J_1, M_1, J_2, M_2\rangle \quad (3)$$

Dado M , indicaremos por $m(M)$ el número de estados $|J_1, M_1, J_2, M_2\rangle$ tales que $M_1 + M_2 = M$



Para calcular $m(M)$ es útil como en la figura adjunta, donde se han representado los puntos de coordenadas (M_1, M_2) y una serie de líneas punteadas que unen los puntos con $M_1 + M_2$ constante. Entienda

$$\begin{aligned} m(M) &= 0 & \text{si } |M| > J_1 + J_2 \\ m(M) &= J_1 + J_2 + 1 - |M| & \text{si } J_1 + J_2 \geq |M| \geq |J_1 - J_2| \\ m(M) &= \min(2J_1 + 1, 2J_2 + 1) & \text{si } |J_1 - J_2| \leq |M| \leq 0 \end{aligned} \quad (5)$$

Por otra parte si $|J, J_2, JM\rangle \in \mathcal{H}^{(J_1, J_2)}$, pertenecerán también a este espacio todos los vectores $|J, J_2, JM'\rangle$ con $M' = -J, -J+1, \dots, J-1, J$. Se tiene entonces que si $N(J)$ indica el orden de degeneración del momento angular total J , podemos escribir

$$m(M) = \sum_{J \geq |M|} N(J) \quad (5)$$

de donde $N(J) = n(J) - n(J+1)$ y usando (7.4) resulta

$$\begin{aligned} N(J) &= 0 & \text{si } J > J_1 + J_2, \quad J < |J_1 - J_2| \\ N(J) &= 1 & \text{si } |J_1 - J_2| \leq J \leq J_1 + J_2 \end{aligned} \tag{8}$$

Resumiendo: Dados unos valores de J_1 y J_2 , los valores posibles del momento angular total J son $|J_1 - J_2|, |J_1 - J_2| + 1, \dots, J_1 + J_2 - 1, J_1 + J_2$. Para cada valor de J posible hay una serie y una sola de vectores propios $|J, J_2, JM\rangle$, donde M toma los valores $-J, -J+1, \dots, J-1, J$. Otra consecuencia importante de este hecho es que si $\bar{J}_1^2, (\bar{J}_1)_z, \bar{J}_2^2, (\bar{J}_2)_z$ y A forman un C.C.O.C., donde A conmuta con \bar{J}_1 y \bar{J}_2 , entonces $\bar{J}_1^2, \bar{J}_2^2, \bar{J}^2, \bar{J}_z$ y A forman un C.C.O.C.

De acuerdo con lo dicho, los dos conjuntos de vectores ortogonales $|J, M, J_2, M_2\rangle$ y $|J, J_2, JM\rangle$, para J_1 y J_2 fijos, subtienden el mismo espacio, y, por tanto, será posible relacionarlos mediante una transformación unitaria y se puede escribir

$$|J, J_2, JM\rangle = \sum_{M_1, M_2} C(J, J_2, J; M_1, M_2, M) |J, M_1, J_2, M_2\rangle \tag{9}$$

Es evidente que

$$C(J, J_2, J; M_1, M_2, M) = \langle J, M_1, J_2, M_2 | J, J_2, JM \rangle \tag{10}$$

Estos productos escalares son los llamados coeficientes de Clebsch-Gordan. Nótese que la doble suma que aparece en (9) es redundante pues $M = M_1 + M_2$ y

$$|J, J_2, JM\rangle = \sum_{M_1} C(J, J_2, J; M_1, M-M_1, M) |J, M_1, J_2, M-M_1\rangle \tag{11}$$

Fijada la fase de $|J, J_1, J_2, J_2\rangle$, ya se ha explicado como se pueden fijar las fases de todos los vectores $|J, M, J_2, M_2\rangle$, utilizando el convenio de Gordon-Shortley (esto es, exigiendo que los elementos de matriz, en este caso, de los operadores $J_{\pm z}, J_{\pm z}$ sean todos ≥ 0). Igualmente, dada la fase de $|J, J_2, J, J\rangle$, usando el mismo convenio se pueden fijar las fases de los $|J, J_2, JM\rangle$. Sin embargo, para determinar completamente los coeficientes de Clebsch-Gordan se tiene que dar algún criterio para fijar las fases de los vectores $|J, J_2, J, J\rangle$ en $J = |J_1 - J_2|, |J_1 - J_2| + 1, \dots, J_1 + J_2 - 1, J_1 + J_2$ relativos a la de los vectores $|J, M, J_2, M_2\rangle$. Aquí se usará el convenio, generalmente usado, de que

$$C(J, J_2, J; J, J - J_1, J) \geq 0 \tag{12}$$

se puede probar que esto garantiza que todos los coeficientes de Clebsch-Gordan son reales

De esto y (8.3) se obtiene

$$\sum_{M_1} C(J_1, J_2, J; M_1, M-M_1, M) C(J_1, J_2, J'; M_1, M-M_1, M) = \delta_{JJ'} \quad (1)$$

$$\sum_J C(J_1, J_2, J; M_1, M-M_1, M) C(J_1, J_2, J; M'_1, M-M'_1, M') = \delta_{MM'} \delta_{M_1 M'_1}$$

que no expresan más que el carácter unitario (más aún, ortogonal) de la matriz de transformación entre bases. Niguna ha dado una expresión general para estos coeficientes y hay múltiples tablas de los mismos.

Ejemplo: $J_1 = J_2 = 1/2$. Los estados de la base $|1/2, M_1, 1/2, M_2\rangle \equiv |M_1, M_2\rangle$ son

$$|1+\rangle, |1+\rangle, |1-\rangle, |1-\rangle \quad (2)$$

Los estados de la base $|1/2, 1/2, JM\rangle \equiv |JM\rangle$ son

$$|11\rangle, |10\rangle, |1-1\rangle, |100\rangle \quad (3)$$

Es evidente

$$|11\rangle = |1+\rangle \quad (4)$$

debido a las propiedades generales y a (8.5). Aplicando J_z se obtiene

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1+\rangle + |1-\rangle) \quad (5)$$

$$|1-1\rangle = |1-\rangle \quad (6)$$

Finalmente $|100\rangle$ se obtiene por ortogonalidad con (5) y teniendo en cuenta (8.5)

$$|100\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1+\rangle - |1-\rangle)$$

Vamos ahora a estudiar la ecuación de Schrödinger para un sistema aislado de dos partículas sin spin, de masas M_1 y M_2 que interactúan a través de un potencial $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$. La ecuación de Schrödinger para estados estacionarios es

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2M_2} \Delta_2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (7)$$

Interesa introducir el operador posición \vec{R} del centro de masas y el operador posición relativo \vec{r} definidos

$$\vec{R} = \frac{M_1 \vec{r}_1 + M_2 \vec{r}_2}{M_1 + M_2}, \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad (8)$$

Las variables canónicas conjugadas son

$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2, \quad \vec{p} = \frac{M_2 \vec{p}_1 - M_1 \vec{p}_2}{M_1 + M_2} \tag{1}$$

esto es, el momento total y el relativo, respectivamente. Es fácil comprobar que (1.8) se puede escribir

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} + \bar{V}(\vec{r}, \vec{R}) \right\} \phi(\vec{r}, \vec{R}) = E \phi(\vec{r}, \vec{R}) \tag{2}$$

donde $\phi(\vec{r}, \vec{R}) = \bar{\Psi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, $\bar{V}(\vec{r}, \vec{R}) = V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, $M = M_1 + M_2$, $1/\mu = 1/M_1 + 1/M_2$. Al ser el sistema aislado, el sistema considerado es invariante bajo traslaciones (y rotaciones); por tanto, el potencial \bar{V} no puede depender de las coordenadas \vec{R} y la ecuación (2) es separable. La ecuación que describe el movimiento del centro de masas es la de Schrödinger para una partícula libre de masa M y en consecuencia la ecuación general de (2) es

$$\phi(\vec{r}, \vec{R}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i \vec{P} \cdot \vec{R} / \hbar} \psi(\vec{r}) \tag{3}$$

en cada una de las cuales el C.M. tiene un momento bien determinado \vec{P} . La función de ondas $\psi(\vec{r})$ que describe el movimiento relativo de las dos partículas, debe satisfacer

$$(H_{rel} \psi)(\vec{r}) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\vec{r}) \right\} \psi(\vec{r}) = E_{rel} \psi(\vec{r}) \tag{4}$$

donde $V(\vec{r}) = \bar{V}(\vec{r}, \vec{R})$ y $E_{rel} = E - \vec{P}^2/2M$. En lo que sigue escribiremos $H_{rel} \equiv H$ y $E_{rel} \equiv E$.

Dada la invariancia rotacional de nuestro sistema aislado, el potencial $V(\vec{r})$ es esféricamente simétrico, y lo representaremos por $V(r)$. Introduciendo coordenadas esféricas, la ecuación (4) se convierte en

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\vec{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) \right\} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \tag{5}$$

Es evidente que $[H, \vec{L}] = 0$, y por tanto, la búsqueda de estados estacionarios se reduce a aquellos que, además de tener una energía bien definida, sean propios de \vec{L}^2 y L_z . De acuerdo con esto la solución más general de (5) será combinación lineal de soluciones de la forma

$$\psi_{elm}(\vec{r}) = R_e(r) Y_e^m(\theta, \phi) \tag{6}$$

donde $R_e(r)$, llamada función de onda radial, satisface la ecuación radial en orden l :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right\} R_\ell(r) = E R_\ell(r) \tag{1}$$

El primer término de H representa la energía cinética radial, y el segundo, la energía cinética de rotación o barnero centrífuga, que actúa como un potencial repulsivo que se añade a V(r). Introduciendo

$$E \equiv \frac{2\mu E}{\hbar^2} \quad U(r) \equiv \frac{2\mu V(r)}{\hbar^2} \tag{2}$$

entonces (1) se escribe

$$\frac{d^2 R_\ell(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_\ell(r)}{dr} + \left\{ E - U(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right\} R_\ell(r) = 0 \tag{3}$$

de la estructura de (3) conviene realizar el cambio

$$R_\ell(r) \equiv \frac{1}{r} u_\ell(r) \tag{4}$$

donde $u_\ell(r)$, función radial reducida, debe satisfacer la ecuación radial reducida para ondas parciales ℓ :

$$(H_\ell u_\ell)(r) \equiv -u_\ell''(r) + \left[\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + U(r) \right] u_\ell(r) = E u_\ell(r) \tag{5}$$

La condición de normalización de $\psi(r)$ se expresa ahora

$$\int_0^\infty dr |u_\ell(r)|^2 = 1 \tag{6}$$

La proyección de H sobre los espacios $\mathcal{H}^{(\ell)}$ de momento angular ℓ ha reducido el problema de valores propios original a la colección de problemas análogos para los hamiltonianos reducidos H_ℓ , $\ell=0,1,2,\dots$. El problema (5) es muy parecido formalmente a un problema unidimensional, pero hay una diferencia fundamental pues allí $x \in (-\infty, \infty)$ y aquí $r \in [0, \infty)$ y para hallar las soluciones se debe imponer la condición de regularidad

$$u_\ell(0) = 0 \tag{7}$$

Un argumento sencillo que conduce a esta ecuación es el siguiente. Supongamos que

$$U(r) \sim \lambda/r^s \quad s < 2 \quad r \rightarrow 0 \tag{8}$$

Entonces en un entorno del origen la parte dominante de $\ell(\ell+1)/r^2 + U(r)$ es el término centrífuga, y en este entorno (5) queda escrita

$$u_l''(r) \approx \frac{l(l+1)}{r^2} u_l(r) \quad (1)$$

y por tanto (11.5) tiene dos soluciones linealmente independientes, con comportamientos asintóticos, para $r \rightarrow 0$, de la forma

$$u_1(r) \sim r^{l+1}, \quad u_2(r) \sim 1/r^l \quad (2)$$

Si $l \neq 0$, la segunda viola la condición de normalización, quedando únicamente la primera como posible solución al problema de valores propios, la cual satisface obviamente la condición de regularidad. Si $l = 0$, este argumento ya no es aplicable; pero si $u_0(r) \sim 1$ conduce a $R_0(r) \sim 1/r$, que, tras aplicación de $-A$ origina un $d(\bar{r})$, imposible de contrarrestar con los otros términos de la ecuación de Schrödinger. De nuevo queda sólo la solución regular.

Evidentemente para que el problema tenga sentido es obvio, como en el caso unidimensional, que debemos imponer condiciones sobre $U(r)$ y que no basta imponer condiciones tales como que $U(r)$ sea continuo a trozos con discontinuidades finitas en los puntos de discontinuidad. Imaginemos que en (11.8) aceptamos un potencial con $S \geq 2$ y consideremos para simplificar $l=0$ entonces el principio de incertidumbre nos permite escribir

$$\langle H \rangle \sim \frac{\hbar^2}{2\mu (\Delta r)^2} - \frac{C}{(\Delta r)^S} \xrightarrow{\Delta r \rightarrow 0} -\infty \quad \text{e no sea que } S \geq 2 \text{ y } C > \hbar^2/2\mu \quad (3)$$

Este argumento intuitivo se puede rigourizar y resulta que $U(r) = g/r^2$ es sólo aceptable si $g \geq -\hbar^2(l+1)/4$.

Para un valor de \hbar dado del momento angular orbital se acostumbra a indicar por $E_{m,l}$ y $u_{m,l}(r)$ los posibles valores propios y funciones propias, donde m es el número de nodos en $(0, \infty)$. Es claro que, para H , $E_{m,l}$ presenta el mismo grado de degeneración $(2l+1)$, correspondientes a los distintos valores posibles del número cuántico magnético m y que del teorema de Sturm se deduce

$$E_{m_2, l} > E_{m_1, l} \quad \text{si } m_2 > m_1 \quad (4)$$

Se puede probar además que

$$E_{m, l_1} < E_{m, l_2} \quad \text{si } l_1 < l_2 \quad (5)$$

En particular el estado fundamental, de existir, debe tener $l=0$ y, por tanto, ser esféricamente simétrico.

Hay casos en que la degeneración de los niveles es mayor que la esperada debido a la invariancia rotacional, esto sucede en el caso del potencial coulombiano y en el oscilador armónico isotrópico donde los niveles son respectivamente

$$E_{me} = -\frac{1}{2} \mu (Z\alpha c)^2 \frac{1}{(n+l+1)^2}$$

1) $n=0, l=0$ degeneración $d=1$ (2 por spin)

2) $n=1, l=0; n=0, l=1$ $d=4$ (8 por spin) (1)

3) $n=2, l=0; n=1, l=1; n=0, l=2$ $d=9$ (18 con spin)

$$E_{ne} = \hbar \omega [2n + l + 3/2]$$

1) $n=0, l=0$ degeneración $d=1$

2) $n=0, l=1$ $d=3$ (2)

3) $n=0, l=2; n=1, l=0$ $d=6$

Estas degeneraciones se llaman degeneración accidental y son debidas a que H es invariante bajo $SU(4)$ y bajo $SU(3)$, respectivamente.

VI - MÉTODOS APROXIMADOS

Empezaremos considerando el método de W.B.K (Wentzel, Brillouin, Kramers) para problemas unidimensionales. Considerese la ecuación de Schrödinger unidimensional

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \psi''(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (1)$$

Sus soluciones dependen explícitamente de \hbar . Queremos estudiar el comportamiento de estas soluciones en el límite $\hbar \downarrow 0$. Consideremos el cambio de variables

$$\psi(x) = \left(\frac{dS(x; \hbar)}{dx} \right)^{-1/2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S(x; \hbar) \right\} \quad (2)$$

en la que hemos reflejado explícitamente la dependencia en \hbar . La ecuación (1) se convierte en

$$[S'(x; \hbar)]^2 - \hbar^2 [S'(x; \hbar)]^{1/2} \frac{d^2}{dx^2} [S'(x; \hbar)]^{-1/2} = 2M [E - V(x)] \quad (3)$$

donde las primas indican derivación con respecto a x . Esta última ecuación, a diferencia de (1), se presta a un estudio sistemático mediante un desarrollo formal en serie de potencias de \hbar :

$$S(x; \hbar) = \sum_{m=0}^{\infty} \hbar^{2m} S_m(x) \quad (4)$$

La sustitución de (4) en (3) y la igualdad de las distintas potencias de \hbar conduce a un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden que permite calcular por cuadraturas $S_m(x)$, tomadas $S_0(x), S_1(x), \dots, S_{m-1}(x)$. En particular las dos primeras de estas ecuaciones son

$$[S'_0(x)]^2 = 2M [E - V(x)] \equiv p^2(x) \quad (5)$$

$$2 S'_0(x) S'_1(x) - [S'_0(x)]^{1/2} \frac{d^2}{dx^2} [S'_0(x)]^{-1/2} = 0$$

con soluciones

$$S_0(x) = \pm \int^x dx' p(x') \quad (6)$$

$$S_1(x) = \pm \frac{i}{2} \int^x dx' [p(x')]^{-1/2} \frac{d^2}{dx'^2} [p(x')]^{1/2}$$

En el límite $\hbar \downarrow 0$ es de esperar que el primer término de (4) sea dominante y

que, por tanto, una buena aproximación a $\psi(x)$ venga dada por una combinación lineal de las funciones

$$\psi_{\pm}(x) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ \pm \frac{i}{\hbar} \int^x dx' p(x') \right\} \quad (1)$$

que son las llamadas soluciones básicas W.B.K.. Siendo divergentes las funciones ψ_{\pm} en los llamados puntos de retorno, caracterizados por $p(x) = 0$, y que separan las zonas permitidas y prohibidas en el movimiento clásico a la energía E considerada, es claro que las soluciones básicas W.B.K. sólo pueden ser útiles fuera de las cercanías de estos puntos.

Intentemos entonces (1). Consideremos una zona clásica en que $E > V(x)$; $p(x)$ dada en (1.5), desempeña el papel de un momento "local" de la partícula, por lo que la exponencial es esencialmente $\exp[\pm i p_{\text{local}} \times / \hbar]$, por otra parte $|\psi_{\pm}(x)|^2 = |p(x)|^{-1}$ debe representar la densidad de probabilidad de hallar la partícula en el punto x , y, por tanto, es lógico que sea inversamente proporcional a la velocidad local de la partícula en este punto, en ese límite $\hbar \rightarrow 0$ en que los resultados clásicos deben ser recuperados. Introduciendo una longitud de onda local

$$\lambda(x) \equiv \frac{\hbar}{p(x)} \quad (2)$$

es de esperar que $\psi(x)$ dada por (1) sea aceptable si $\lambda(x)$ cambia poco al variar x , esto es, cuando

$$\left| \frac{d\lambda(x)}{dx} \right| \ll 1 \quad (3)$$

Notese que esto es equivalente a

$$|\hbar^2 S_1'(x)| \ll |S_0'(x)| \quad (4)$$

En lo que sigue supondremos que lejos de los puntos de retorno se satisfacen siempre las condiciones de validez de la aproximación W.B.K.

$$S(x, \hbar) \approx S_0(x) \quad (5)$$

por lo cual la solución general de la ecuación de Schrödinger en la zona comprendida entre dos puntos de retorno adyacentes, pero lejos de estos, vendrá dada, en esta aproximación, por

$$1) \text{ Si } V(x) > E \quad y \quad p_1(x) \equiv \{ 2M [V(x) - E] \}^{1/2}$$

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p_1(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' p_1(x')} + \frac{B}{\sqrt{p_1(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' p_1(x')} \quad (1)$$

$$2) \text{ Si } V(x) < E \quad y \quad p_2(x) \equiv \{ 2M [E - V(x)] \}^{1/2}$$

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p_2(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' p_2(x')} + \frac{B}{\sqrt{p_2(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' p_2(x')} \quad (2)$$

En una zona determinada, entre dos puntos de retorno adyacentes, se suele tomar x_0 como un punto de esta zona que puede incidentalmente coincidir con uno de sus extremos. A y B son constantes arbitrarias.

Si bien se ha logrado una aproximación a la solución de la ecuación de Schrödinger en cada zona comprendida entre dos puntos de retorno adyacentes, no es posible, con lo expuesto hasta aquí, relacionar entre sí los distintos pares de constantes arbitrarias que aparecen en cada una de las zonas existentes; por tanto para que el método resulte de alguna utilidad, será preciso encontrar una forma de conectar las constantes correspondientes a zonas adyacentes. Esto se logra mediante las llamadas fórmulas de conexión en el punto de retorno x_0 .

$$1) E > V(x) \text{ si } x > x_0 \quad (\sin \eta \neq 0)$$

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p_1(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_0} dx' p_1(x')\right) \longrightarrow \psi(x) = \frac{2A}{\sqrt{p_2(x)}} \cos\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' p_2(x') - \frac{\pi}{4}\right) \quad (3)$$

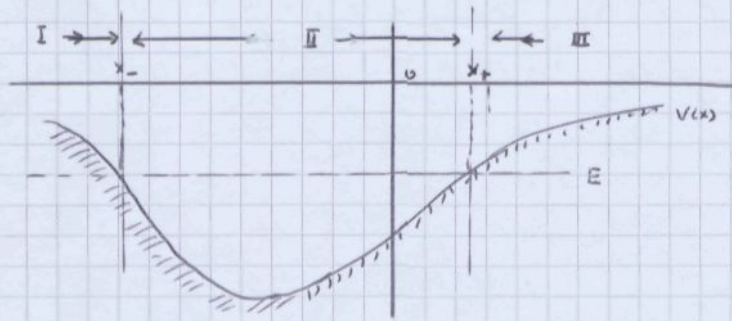
$$\psi(x) = \frac{A \sin \eta}{\sqrt{p_1(x)}} \exp\left(+\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_0} dx' p_1(x')\right) \longleftarrow \psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p_2(x)}} \cos\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' p_2(x') - \frac{\pi}{4} + \eta\right)$$

$$2) E < V(x) \text{ si } x > x_0 \quad (\sin \eta \neq 0)$$

$$\psi(x) = \frac{2A}{\sqrt{p_2(x)}} \cos\left(\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_0} dx' p_2(x') - \frac{\pi}{4}\right) \longleftarrow \psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p_1(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' p_1(x')\right) \quad (4)$$

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p_2(x)}} \cos\left(\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_0} dx' p_2(x') - \frac{\pi}{4} + \eta\right) \longrightarrow \psi(x) = \frac{A \sin \eta}{\sqrt{p_1(x)}} \exp\left(+\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' p_1(x')\right)$$

Intentemos por este procedimiento determinar los estados ligados de un potencial $V(x)$ con solo dos puntos de retorno



En la zona I y lejos del punto de retorno x_- la función de onda del estado ligado de energía E , en la aproximación W.B.K viene dada por

$$\psi_I(x) = \frac{A}{\sqrt{p_1(x)}} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_-} dx' p_1(x') \right\} \quad (1)$$

pues la normalizabilidad de los estados ligados prohíbe la presencia de la exponencial creciente. Usando las fórmulas de conexión (3.3)

$$\begin{aligned} \psi_{II}(x) &= \frac{2A}{\sqrt{p_2(x)}} \cos \left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_-}^x dx' p_2(x') - \frac{\pi}{4} \right) = \\ &= \frac{2A}{\sqrt{p_2(x)}} \cos \left(\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_+} dx' p_2(x') - \frac{\pi}{4} + \eta \right) \end{aligned} \quad (2)$$

con

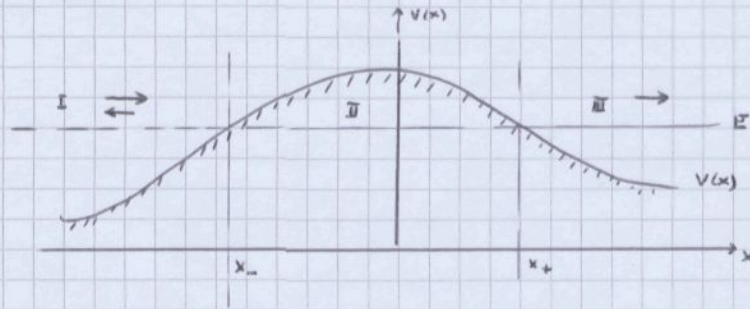
$$\eta = \frac{\pi}{2} - \frac{i}{\hbar} \int_{x_-}^{x_+} dx' p_2(x') \quad (3)$$

Si $\sin \eta \neq 0$ entonces las fórmulas de conexión (3.3) implican la existencia de una amplitud exponencial creciente en la región III. La condición de estado ligado exige pues que $\sin \eta = 0$ es decir

$$\int_{x_-}^{x_+} dx \sqrt{2M[E - V(x)]} = n\pi \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n \text{ entero } \geq 0 \quad (4)$$

Es inmediato comprobar que para el oscilador armónico esta da el espectro exacto. El error cometido al calcular $E_{n, \text{max}}$ mediante (4) es tal que si el potencial tiene infinitos estados ligados la aproximación obtenida mejora al crecer n , mientras que si el número de estados ligados es finito, los menos ligados y los más ligados es en los que se comete el mayor error.

Otro problema interesante es el de transmisión por una barrera de potencial con solo dos puntos de retorno



En la región III sólo existe la onda transmitida

$$\begin{aligned} \psi_{III}(x) &= \frac{A}{\sqrt{p_2(x)}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{x_+}^x dx' p_2(x') \right\} = \\ &= \frac{A}{\sqrt{p_2(x)}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_+}^x dx' p_2(x') - \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{4} \right) = \frac{iA}{\sqrt{p_2(x)}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_+}^x dx' p_2(x') - \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{4} \right) \end{aligned} \quad (1)$$

Usando las fórmulas de conexión (3.3)

$$\psi_{II}(x) = \frac{A e^{-i\pi/4}}{\sqrt{p_2(x)}} \exp \left(+ \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_+} dx' p_2(x') \right) = \frac{A e^{-i\pi/4}}{\sqrt{p_2(x)}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{x_-}^{x_+} dx' p_2(x') \right\} \exp \left\{ - \frac{1}{\hbar} \int_{x_-}^x dx' p_2(x') \right\} \quad (2)$$

y usando (3.4)

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= \frac{2A e^{-i\pi/4}}{\sqrt{p_2(x)}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{x_-}^{x_+} dx' p_2(x') \right\} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_-} dx' p_2(x') - \frac{\pi}{4} \right) = \\ &= \frac{A}{\sqrt{p_2(x)}} \exp \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_-}^{x_+} dx' p_2(x') \right) \left\{ -i \exp \left(- \frac{i}{\hbar} \int_x^{x_-} dx' p_2(x') \right) + \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_-} dx' p_2(x') \right) \right\} \end{aligned} \quad (3)$$

donde el segundo sumando corresponde a la incidente y el otro a la reflejada. En la hipótesis simplificada $p_2(x_0) = p_2(x_0)$, la comparación de (1) y (3) da para los coeficientes de transmisión y reflexión

$$T_{WKB} = \exp \left\{ - \frac{2}{\hbar} \int_{x_-}^{x_+} dx p_1(x) \right\} \quad (4)$$

$$R_{WKB} = 1$$

Como unitariedad exige que $T + R = 1$, la expresión obtenida sólo es válida si:

$$T_{WKB} \ll 1.$$

Podemos considerar el método variacional que permite encontrar cotas superiores a la energía de los estados ligados. Sea H el hamiltoniano del problema que,

por simplicidad, supondremos que sólo tiene espectro discreto formado por los niveles $E_0 < E_1 < E_2 < \dots < E_i < \dots$. Sean $|\psi_{i,\alpha}\rangle$ los correspondientes vectores propios ortonormales, donde $\alpha = 1, 2, \dots$, gi tiene en cuenta la posibilidad de que el nivel E_i sea g_i veces degenerado. Cualquier estado $|\psi\rangle$ puede escribirse

$$|\psi\rangle = \sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} c_{i,\alpha} |\psi_{i,\alpha}\rangle \quad (1)$$

con lo que

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} E_i |c_{i,\alpha}|^2 \geq E_0 \sum_{i=1}^{g_i} |c_{i,\alpha}|^2 = E_0 \langle \psi | \psi \rangle \quad (2)$$

de donde se deduce

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (3)$$

Es decir, que para cualquier estado $|\psi\rangle$ el valor esperado de la energía da una cota superior a la energía del estado fundamental. Si E_i es el subespacio degenerado por los $|\psi_{i,\alpha}\rangle$ $\alpha = 1, 2, \dots, g_i$ y si $|\psi\rangle$ pertenece a E_0 , entonces $\langle \psi | H | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle = E_0$.

Para aplicar este método se acostumbra a partir de una familia de estados, llamada estado o funciones de prueba, que dependen de m parámetros $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$; se calcula con ellos el valor esperado de H , y se logra así una cota superior a E_0 que depende de estos parámetros. El resultado obtenido se minimiza con respecto a los mismos, y así se obtiene la mejor cota de la familia.

Este resultado se puede generalizar: Consideremos un sistema con Hamiltoniano H . Sean $E_1 \leq E_2 \leq E_3 \leq E_4 \leq \dots \leq E_m \leq \dots$ sus autovalores. Consideremos un conjunto ortonormalizado de funciones de prueba $\psi_k(\lambda_1, \dots, \lambda_s)$ $k = 1, \dots, m$ y calculemos

$$H_{ke}(\lambda_1, \dots, \lambda_s) \equiv \langle \psi_k(\lambda_1, \dots, \lambda_s) | H | \psi_e(\lambda_1, \dots, \lambda_s) \rangle \quad (5)$$

Sean $E'_1(\lambda_1, \dots, \lambda_s) \leq E'_2(\lambda_1, \dots, \lambda_s) \leq \dots \leq E'_m(\lambda_1, \dots, \lambda_s)$ los valores de la matriz $H_{ke}(\lambda_1, \dots, \lambda_s)$ entonces se puede demostrar que

$$E_1 \leq E'_1(\lambda_1, \dots, \lambda_s) \leq E_2 \leq E'_2(\lambda_1, \dots, \lambda_s) \leq E_3 \leq \dots \leq E_m \leq E'_m(\lambda_1, \dots, \lambda_s) \quad (6)$$

y por tanto

$$E_k \leq \min_{\lambda_i} E'_k(\lambda_1, \dots, \lambda_s) \quad k = 1, 2, \dots, m \quad (7)$$

También es útil el siguiente método: Consideremos los potenciales

$$V_+(x) \geq V(x) \geq V_-(x) \tag{1}$$

y construyamos los Hamiltonianos correspondientes entonces se puede probar

$$E_m^{(+)} \geq E_m \geq E_m^{(-)} \tag{2}$$

donde $E_m^{(+)}$, E_m y $E_m^{(-)}$ son los valores propios de $H^{(+)}$, H y $H^{(-)}$

Intentemos aplicar estos procedimientos a

$$H = \frac{1}{2M} p^2 + \lambda x^4 \tag{3}$$

Empecemos considerando el WKB entonces para una energía E los puntos de retorno

son $x = \pm (E/\lambda)^{1/4}$ y (4.5) es

$$\int_{-(E/\lambda)^{1/4}}^{+(E/\lambda)^{1/4}} dx \sqrt{2ME - 2M\lambda x^4} = \pi \hbar (m + 1/2) \quad m \text{ entero} \geq 0 \tag{4}$$

o equivalentemente

$$2 \int_0^{(E/\lambda)^{1/4}} dx \sqrt{2ME - 2M\lambda x^4} = \pi \hbar (m + 1/2) \tag{5}$$

Haciendo el cambio $\lambda x^4 / E = y$ se obtiene

$$\frac{\sqrt{2M}}{2} \frac{1}{\lambda^{1/4}} E^{3/4} \int_0^1 dy y^{1/4-1} \sqrt{1-y} = \pi \hbar (m + 1/2) \tag{6}$$

Teniendo en cuenta que

$$\int_0^1 dy y^{1/4-1} \sqrt{1-y} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\Gamma(1/4)}{\Gamma(1/4 + 3/2)} \tag{7}$$

de donde

$$E_{m, \text{WKB}} = \left\{ \frac{\hbar \lambda^{1/4}}{\sqrt{2M}} \right\}^{4/3} \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\Gamma(7/4)}{\Gamma(1/4)} (m + 1/2) \right\}^{4/3} = 2.185 \ 069 \ 300 (m + 1/2)^{4/3} \left\{ \frac{\hbar^4 \lambda}{4M^2} \right\}^{1/3} \tag{8}$$

De donde

$$\begin{aligned} E_{0, \text{max}} &= 0.867 \quad (\hbar^4 \lambda / 4M^2)^{1/3} & \text{Erat } 1.060362090484 \\ E_{1, \text{max}} &= 3.752 \quad (\hbar^4 \lambda / 4M^2)^{1/3} & 3.800 \\ E_{2, \text{max}} &= 7.414 \quad (\hbar^4 \lambda / 4M^2)^{1/3} & 7.455697937987 \end{aligned} \quad (1)$$

Los valores máximos son 1.060 y 3.800 respectivamente y por tanto los errores son 22.3% y 1.262, respectivamente.

Consideremos ahora el método variacional tomando como funciones de prueba las del estado fundamental del oscilador armónico

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} e^{-\alpha^2 x^2 / 2} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle &= \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \alpha^4 x^2 e^{-\alpha^2 x^2} + \lambda \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} x^4 e^{-\alpha^2 x^2} \\ &= \frac{\hbar^2}{4M} \alpha^2 + \lambda \frac{3}{4} \alpha^{-4} \end{aligned} \quad (3)$$

y el mínimo es para $\alpha = (6M\lambda/\hbar^2)^{1/6}$ y por tanto

$$E_0 \leq \frac{3^{4/3}}{4} \left\{ \frac{\hbar^4 \lambda}{4M^2} \right\}^{1/3} = 1.082 (\hbar^4 \lambda / 4M^2)^{1/3} \quad (4)$$

y el error es de 2.1%

Consideremos ahora

$$V_- = \frac{M}{2} \omega^2 x^2 - \frac{M^2 \omega^4}{16 \lambda} \quad (5)$$

$$V_+ = V_0 \Theta(L - |x|) \quad L = (V_0 / \lambda)^{1/4}$$

Entonces

$$\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\pi}{2L} \right)^2 + \lambda L^4 \geq E_0 \geq \frac{1}{2} \hbar \omega - \frac{M^2 \omega^4}{16 \lambda} \quad (6)$$

y minimizando y maximizando

$$L_{\min} = \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{16 M \lambda} \right)^{1/6} \quad \omega_{\max} = (2 \lambda \hbar / M^2)^{1/3} \quad (7)$$

$$0.750 = \frac{3}{4} \leq E_0 / (\hbar^4 \lambda / 4M^2)^{1/3} \leq \pi^{4/3} / 2 = 2.301 \quad (8)$$