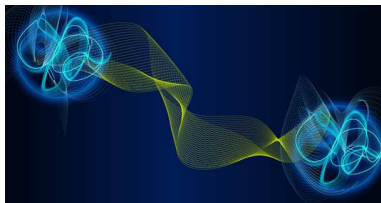


Una introducción a la Mecánica Cuántica

Renato Álvarez-Nodarse



Orthonet, Sevilla, noviembre 2016

La Física se basa en medidas y observaciones experimentales de la realidad que nos rodea, es decir, en cuantificar o caracterizar los distintos fenómenos naturales mediante expresiones cuantitativas o números.

La Física se basa en medidas y observaciones experimentales de la realidad que nos rodea, es decir, en cuantificar o caracterizar los distintos fenómenos naturales mediante expresiones cuantitativas o números.

Estas cantidades medibles u observables se denominan *cantidades físicas* (e.g. longitud, velocidad, energía, ...).

La Física se basa en medidas y observaciones experimentales de la realidad que nos rodea, es decir, en cuantificar o caracterizar los distintos fenómenos naturales mediante expresiones cuantitativas o números.

Estas cantidades medibles u observables se denominan *cantidades físicas* (e.g. longitud, velocidad, energía, ...).

El objeto o conjunto de objetos a estudiar se denomina *sistema físico* (e.g. una partícula, un átomo, un coche, ...). Cuando conocemos distintas medidas de un sistema que lo caracterizan por completo en un momento (e.g. la posición y la velocidad de una partícula de masa m) decimos que el sistema se encuentra en un cierto *estado* dado.

El objetivo de toda teoría física es

- 1 Describir el estado del sistema físico, es decir, dar una representación cuantitativa (matemática) del estado que lo defina biunívocamente.

El objetivo de toda teoría física es

- 1 Describir el estado del sistema físico, es decir, dar una representación cuantitativa (matemática) del estado que lo defina biunívocamente.
- 2 Conocer la *dinámica* del sistema, es decir dado un estado inicial en el momento t_0 conocer su evolución temporal para $t > t_0$.

El objetivo de toda teoría física es

- 1 Describir el estado del sistema físico, es decir, dar una representación cuantitativa (matemática) del estado que lo defina biunívocamente.
- 2 Conocer la *dinámica* del sistema, es decir dado un estado inicial en el momento t_0 conocer su evolución temporal para $t > t_0$.
- 3 Predecir los resultados de las mediciones de las cantidades físicas del sistema.

La teoría física en sí misma está en general constituida, desde el punto de vista abstracto, por tres apartados:

- 1 El formalismo: Conjunto de símbolos y reglas de deducción a partir de los cuales se pueden deducir proposiciones y enunciados. En general toda teoría comienza postulando un cierto número de *axiomas*.

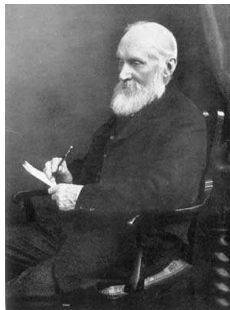
La teoría física en sí misma está en general constituida, desde el punto de vista abstracto, por tres apartados:

- 1 El formalismo: Conjunto de símbolos y reglas de deducción a partir de los cuales se pueden deducir proposiciones y enunciados. En general toda teoría comienza postulando un cierto número de *axiomas*.
- 2 Ley dinámica: Cierta relación (o relaciones) entre algunos de los principales objetos del formalismo que permitan predecir acontecimientos futuros.

La teoría física en sí misma está en general constituida, desde el punto de vista abstracto, por tres apartados:

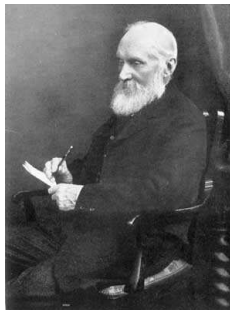
- 1 El formalismo: Conjunto de símbolos y reglas de deducción a partir de los cuales se pueden deducir proposiciones y enunciados. En general toda teoría comienza postulando un cierto número de *axiomas*.
- 2 Ley dinámica: Cierta relación (o relaciones) entre algunos de los principales objetos del formalismo que permitan predecir acontecimientos futuros.
- 3 Reglas de correspondencia o interpretación física: Conjunto de reglas que permiten asignar valores experimentales a algunos de los símbolos del formalismo.

William Thomson o, como era conocido, Lord Kelvin, en una conferencia el 27 de abril de 1900 pronunció esta célebre frase:



Hoy día la ciencia física forma, esencialmente, un conjunto perfectamente armonioso, ¡Un conjunto prácticamente acabado! Sólo quedan dos “nubecillas”: la primera, el resultado negativo del experimento de Michelson-Morley. La segunda, las profundas discrepancias de la ley de Rayleigh-Jeans.

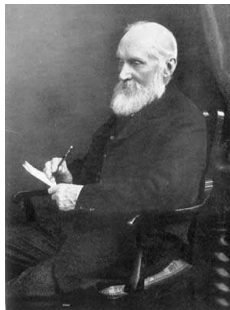
William Thomson o, como era conocido, Lord Kelvin, en una conferencia el 27 de abril de 1900 pronunció esta célebre frase:



Hoy día la ciencia física forma, esencialmente, un conjunto perfectamente armonioso, ¡Un conjunto prácticamente acabado! Sólo quedan dos “nubecillas”: la primera, el resultado negativo del experimento de Michelson-Morley. La segunda, las profundas discrepancias de la ley de Rayleigh-Jeans.

La primera nube provocó la primera gran tormenta: La teoría de la relatividad de Einstein

William Thomson o, como era conocido, Lord Kelvin, en una conferencia el 27 de abril de 1900 pronunció esta célebre frase:



Hoy día la ciencia física forma, esencialmente, un conjunto perfectamente armonioso, ¡Un conjunto prácticamente acabado! Sólo quedan dos “nubecillas”: la primera, el resultado negativo del experimento de Michelson-Morley. La segunda, las profundas discrepancias de la ley de Rayleigh-Jeans.

La primera nube provocó la primera gran tormenta: La teoría de la relatividad de Einstein **pero esa es otra historia.**

La ley de Rayleigh-Jeans es una fórmula que describe la radiación de un “cuerpo negro”.

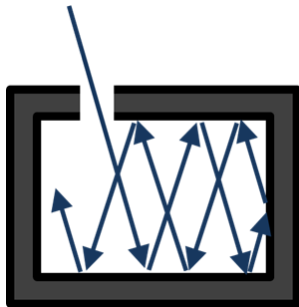


Figura: Metal caliente (izquierda) y modelo de cuerpo negro (derecha).

La ley de Rayleigh-Jeans es una fórmula que describe la radiación de un “cuerpo negro”.

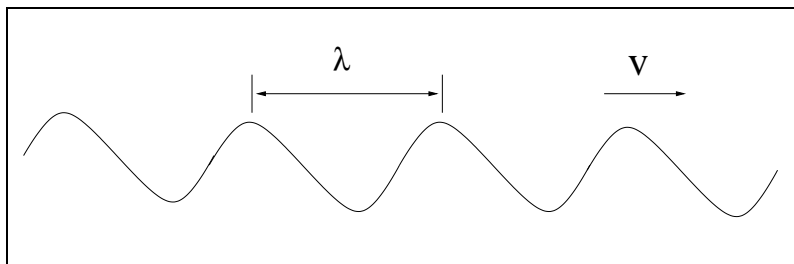


Figura: Onda plana unidimensional

$$\lambda = v \cdot T = \frac{v}{\nu} = 2\pi \frac{v}{\omega}.$$

λ — longitud de onda, ν frecuencia y v velocidad. Importante: $\lambda \sim \frac{1}{\nu}$

Las ondas electromagnéticas

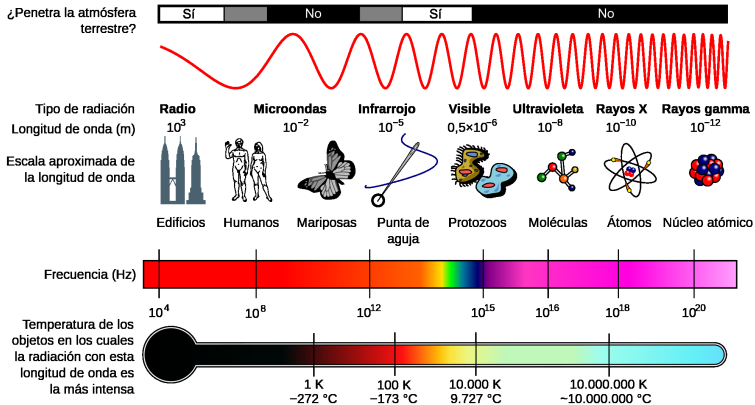


Diagrama del espectro electromagnético, mostrando el tipo, longitud de onda con ejemplos, frecuencia y temperatura de emisión de cuerpo negro. La luz visible está en el rango de 400-790 terahercios (10^{12} Hz)

Sea $U(T)$ la densidad de energía (cantidad de energía por unidad de volumen) que dependerá de la temperatura T . Además, cada longitud de onda –frecuencia– aportará su “granito de arena”, esta densidad por unidad de frecuencia ω la denotaremos por $u(\omega, T)$:

$$U(T) = \int_0^{\infty} u(\omega, T) d\omega.$$

La fórmula de Rayleigh-Jeans establecía que

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

donde c es la velocidad de la luz y k es la const. de Boltzmann.

Sea $U(T)$ la densidad de energía (cantidad de energía por unidad de volumen) que dependerá de la temperatura T . Además, cada longitud de onda –frecuencia– aportará su “granito de arena”, esta densidad por unidad de frecuencia ω la denotaremos por $u(\omega, T)$:

$$U(T) = \int_0^{\infty} u(\omega, T) d\omega.$$

La fórmula de Rayleigh-Jeans establecía que

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

donde c es la velocidad de la luz y k es la const. de Boltzmann. Esta es la llamada **catástrofe ultravioleta**

Sea $U(T)$ la densidad de energía (cantidad de energía por unidad de volumen) que dependerá de la temperatura T . Además, cada longitud de onda –frecuencia– aportará su “granito de arena”, esta densidad por unidad de frecuencia ω la denotaremos por $u(\omega, T)$:

$$U(T) = \int_0^{\infty} u(\omega, T) d\omega.$$

La fórmula de Rayleigh-Jeans establecía que

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

donde c es la velocidad de la luz y k es la const. de Boltzmann. Esta es la llamada **catástrofe ultravioleta**

Si la frecuencia era muy alta:

$$\text{Ley de Wein} \quad u(\omega, T) = \alpha \omega^3 e^{-\beta \omega}$$

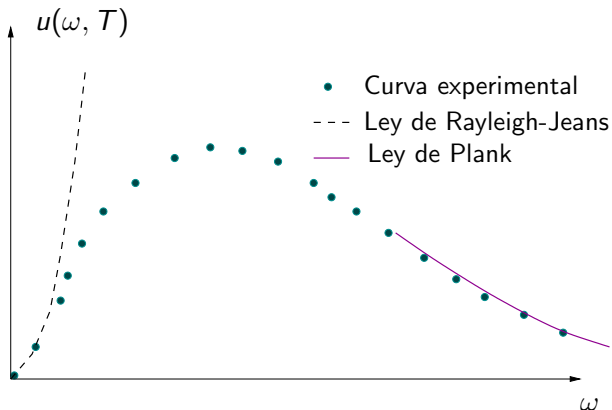
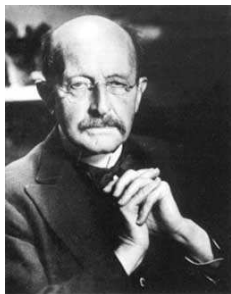


Figura: Gráfica de la intensidad $u(\omega, T)$ contra la frecuencia de onda ω .



En octubre de 1900 Planck encontró empíricamente una fórmula que describía perfectamente la ley experimental para la radiación del cuerpo negro:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1},$$

donde \hbar era cierta const. desconocida.

Para frecuencias bajas, i.e., $\hbar\omega/kT \ll 1$, entonces la fórmula de Planck daba $\langle \varepsilon \rangle \approx kT$ (Rayleigh-Jeans).

Mientras que para frecuencias altas, i.e., $\hbar\omega/kT \gg 1$, Planck recuperaba la fórmula de Wein.

Para explicar su formula Plank, rompiendo la concepción clásica, lanza la idea de que los “osciladores” que componen los átomos absorben o emiten luz **no de forma continua**, como era habitual en la física clásica, sino mediante porciones aisladas proporcionales a la frecuencia, es decir la energía se emitía o absorbía mediante “quantas” de energía $E = \hbar\omega$.

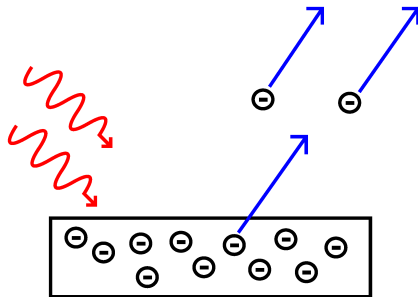
Para explicar su formula Plank, rompiendo la concepción clásica, lanza la idea de que los “osciladores” que componen los átomos absorben o emiten luz **no de forma continua**, como era habitual en la física clásica, sino mediante porciones aisladas proporcionales a la frecuencia, es decir la energía se emitía o absorbía mediante “quantas” de energía $E = \hbar\omega$.

Henri Poincaré en el otoño de 1911 prueba que la fórmula de Planck sólo se podía obtener bajo la suposición de que la energía está cuantizada.

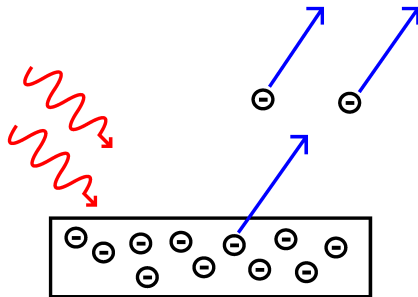


El siguiente paso lo dio Einstein en 1905 en un ensayo titulado *Sobre un punto de vista heurístico acerca de la producción y la transformación de la luz*.

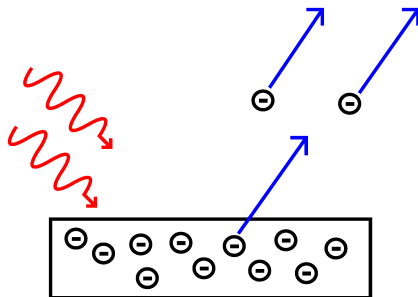
Einstein, totalmente seducido por los cuanta de Planck, supone que no sólo la materia absorbe y emite radiación (energía) cuantificadamente, sino también la propia radiación (luz) también lo está. De esta forma Einstein recupera las ideas corpusculares sobre la luz de Newton y considera la luz formada por partículas de masa cero y energía $\hbar\omega$: los fotones.



► Una placa metálica sometida a una luz ultravioleta emite electrones.



- ▶ Una placa metálica sometida a una luz ultravioleta emite electrones.
- ▶ El número de electrones aumentaba proporcionalmente a la intensidad de la radiación pero su velocidad v no dependía de la intensidad sino de la frecuencia ω : a mayor ω , mayor v .



- ▶ Una placa metálica sometida a una luz ultravioleta emite electrones.
- ▶ El número de electrones aumentaba proporcionalmente a la intensidad de la radiación pero su velocidad v no dependía de la intensidad sino de la frecuencia ω : a mayor ω , mayor v .
- ▶ Si ω era lo suficientemente baja ya no se emitían electrones independientemente de lo intensa que fuese la luz incidente.

Para resolverlo Einstein razonó como sigue: Supongamos que bombardeamos la lámina metálica con partículas luminosas cada una de las cuales tiene una energía $\hbar\omega$. Si denotamos por W la energía necesaria para extraer un electrón del metal, entonces la energía cinética de los electrones, E_c , se expresará mediante la fórmula

$$E_c = \hbar\omega - W.$$

¡Todas las observaciones descritas anteriormente son una consecuencia de la fórmula anterior!

Para resolverlo Einstein razonó como sigue: Supongamos que bombardeamos la lámina metálica con partículas luminosas cada una de las cuales tiene una energía $\hbar\omega$. Si denotamos por W la energía necesaria para extraer un electrón del metal, entonces la energía cinética de los electrones, E_c , se expresará mediante la fórmula

$$E_c = \hbar\omega - W.$$

¡Todas las observaciones descritas anteriormente son una consecuencia de la fórmula anterior!

En 1905 no había una estructura de la materia pero estaba claro que la luz era una onda electromagnética continua, es decir estaban presentes todas las frecuencias.

Para resolverlo Einstein razonó como sigue: Supongamos que bombardeamos la lámina metálica con partículas luminosas cada una de las cuales tiene una energía $\hbar\omega$. Si denotamos por W la energía necesaria para extraer un electrón del metal, entonces la energía cinética de los electrones, E_c , se expresará mediante la fórmula

$$E_c = \hbar\omega - W.$$

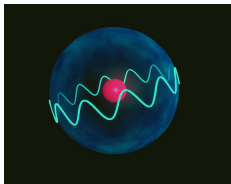
¡Todas las observaciones descritas anteriormente son una consecuencia de la fórmula anterior!

En 1905 no había una estructura de la materia pero estaba claro que la luz era una onda electromagnética continua, es decir estaban presentes todas las frecuencias.

Años más tarde, Robert Millikan comprueba experimentalmente la [fórmula de Einstein](#) y encuentra que \hbar **es la misma \hbar de Planck.**



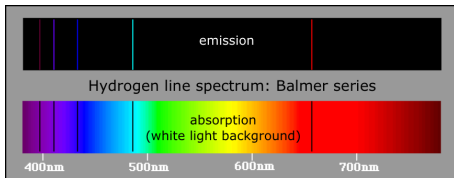
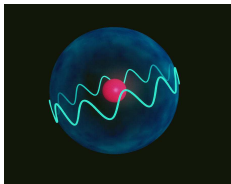
En 1913 se creía que el átomo estaba constituido por un núcleo “pesado” y “denso” y electrones girando a su alrededor. Como toda carga en movimiento acelerado emite ondas electromagnéticas, los electrones debían perder energía y caer al núcleo en $\approx 10^{-5}$ seg-.





En 1913 se creía que el átomo estaba constituido por un núcleo “pesado” y “denso” y electrones girando a su alrededor. Como toda carga en movimiento acelerado emite ondas electromagnéticas, los electrones debían perder energía y caer al núcleo en $\approx 10^{-5}$ seg-.

El espectro del Hidrógeno estaba constituido por líneas espectrales separadas con frecuencias $\omega = R \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right)$, $n, k = 1, 2, 3, \dots$



En 1913 Bohr postuló que electrón sólo puede estar en ciertas órbitas permitidas (estables) y para pasar de una de estas órbitas a otra este debería “saltar” por encima de todas aquellas no permitidas. Dichas órbitas eran circulares y

- De todas las infinitas órbitas posibles sólo son posibles aquellas en la que su momento angular $L = mvr$, siendo m la masa del electrón, v , su velocidad y r el radio de la órbita, fuesen múltiplos enteros de \hbar : $L = n\hbar$
- La energía que absorbe o emite un átomo al saltar un electrón de una órbita permitida a otra es igual a $\hbar\omega$, es decir para saltar de una órbita a otra el átomo absorbe o emite un cuanto de luz.

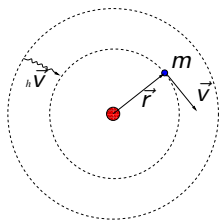
Bohr obtuvo la siguiente expresión para la energía del electrón:

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

Entonces, el salto entre dos órbitas daba para la frecuencia del fotón emitido el valor:

$$\omega = \frac{E_n - E_m}{\hbar} = \frac{me^4}{2\hbar^3} \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n, k = 1, 2, 3, \dots$$

que correspondía al espectro del hidrógeno descubierto por Balmer.



Bohr obtuvo la siguiente expresión para la energía del electrón:

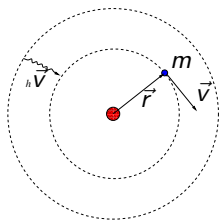
$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

Entonces, el salto entre dos órbitas daba para la frecuencia del fotón emitido el valor:

$$\omega = \frac{E_n - E_m}{\hbar} = \frac{me^4}{2\hbar^3} \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n, k = 1, 2, 3, \dots$$

que correspondía al espectro del hidrógeno descubierto por Balmer.

¿Casualidad?



Bohr obtuvo la siguiente expresión para la energía del electrón:

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

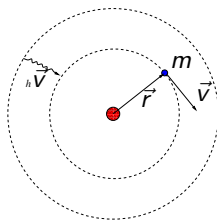
Entonces, el salto entre dos órbitas daba para la frecuencia del fotón emitido el valor:

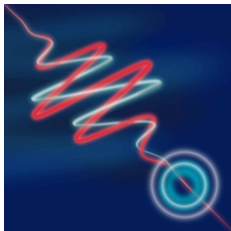
$$\omega = \frac{E_n - E_m}{\hbar} = \frac{me^4}{2\hbar^3} \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n, k = 1, 2, 3, \dots$$

que correspondía al espectro del hidrógeno descubierto por Balmer.

¿Casualidad?

Principio de correspondencia de Bohr. La teoría cuántica tenía que ser tal que, para números cuánticos grandes, por ejemplo n en las fórmulas anteriores, se transformase en la teoría clásica.





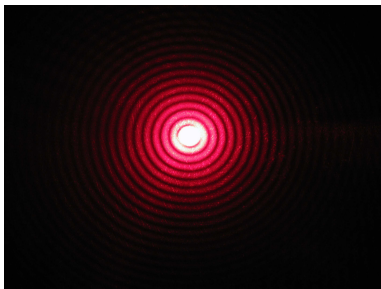
En 1923 Louis de Broglie, influenciado por el trabajo de Einstein sobre el efecto fotoeléctrico, postula que la dualidad onda-partícula que Einstein había proclamado para la luz también había de ser cierta para las partículas materiales, como por ejemplo, el electrón.

Así de Broglie equiparó a un electrón con una onda plana. Si m es la masa del electrón y v entonces el momento p era

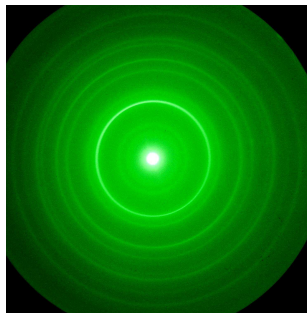
$$p = mv = \frac{E}{v} = \frac{\hbar\omega}{v} = \frac{\hbar 2\pi}{vT} = \hbar \frac{2\pi}{\lambda}.$$

Pero ¿la dualidad onda-partícula no es un cuento?

En 1925 los físicos estadounidenses C. Davisson y L. Germer descubrieron por casualidad un patrón de difracción durante una serie de experimentos que estaban realizando al disparar electrones contra un blanco de níquel. Este descubrimiento fue realizado independientemente por G. P. Thomson.



Difracción de la luz



Difracción de los electrones



Usando el principio de correspondencia de Bohr, Heisenberg descubre en 1925 que hay que cambiar los valores de las magnitudes físicas por matrices (tablas numéricas) y construye una *mecánica matricial* donde la dinámica que rige las magnitudes cuánticas es

$$\frac{dX}{dt} = \frac{i}{\hbar}(HX - XH) = \frac{i}{\hbar}[H, X], \quad i = \sqrt{-1},$$

H es la *matriz* del Hamiltoniano del sistema.



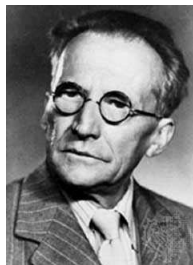
Usando el principio de correspondencia de Bohr, Heisenberg descubre en 1925 que hay que cambiar los valores de las magnitudes físicas por matrices (tablas numéricas) y construye una *mecánica matricial* donde la dinámica que rige las magnitudes cuánticas es

$$\frac{dX}{dt} = \frac{i}{\hbar}(HX - XH) = \frac{i}{\hbar}[H, X], \quad i = \sqrt{-1},$$

H es la *matriz* del Hamiltoniano del sistema.

Heisenberg por un lado introduce en la física una teoría matemática “*muy complicada*” y al mismo tiempo descubre el principio de incertidumbre:

Es imposible conocer al mismo tiempo y con una precisión arbitraria la posición y la velocidad del electrón.



En 1926, Erwin Schrödinger andaba buscando una teoría que acabase con esa *aberración* de las matrices que Heisenberg intentaba introducir en la física. Al conocer el trabajo de de Broglie Schrödinger decide asociar a cada partícula una onda y construir la ecuación diferencial que gobierna dicha onda. Tras muchos intentos da con la ecuación:

$$H(x, \hat{p}) \Psi(x, t) = E\Psi(x, t), \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x},$$

donde E era la energía del sistema asociado a la onda Ψ .

Sea el Hamiltoniano estándar,

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x),$$

siendo $V(x)$ la función potencial (energía potencial). Sustituimos $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, y obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + V(x)\Psi(x, t) = E\Psi(x, t).$$

Solución: $V(x) = 0 \implies$ La onda de de Broglie

¿Y para el átomo de Hidrógeno?

Sea el Hamiltoniano estándar,

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x),$$

siendo $V(x)$ la función potencial (energía potencial). Sustituimos $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, y obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + V(x)\Psi(x, t) = E\Psi(x, t).$$

Solución: $V(x) = 0 \implies$ La onda de de Broglie

¿Y para el átomo de Hidrógeno? $V(r) = -\frac{e^2}{r} \implies$

$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$ que era la fórmula de Bohr.





Max Born, colega y amigo de Heisenberg dio una interpretación a la función de onda de Schrödinger. Basándose en los resultados experimentales sobre la dispersión de ondas planas –recordemos que el electrón libre se consideraba como tal en la mecánica ondulatoria de Schrödinger– Born aseguró que la función de onda $\Psi(x)$ daba la **probabilidad** de que una partícula fuese detectada en la posición x y que dicha probabilidad era proporcional a $|\Psi(x)|^2$, es decir la Mecánica ondulatoria, al igual que la matricial como se vería más tarde, era una **teoría estadística** incluso para describir una única partícula.

En 1926, Heisenberg consideró una onda “gaussiana”

$$\Psi(x, 0) = \|\Psi\|^{-1} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2b^2}} e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x}, \quad \|\Psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{b^2}} dx,$$

Si una partícula venía descrita por dicha onda, entonces usando la idea de Born, el valor medio para la posición de la partícula era

$$\langle x \rangle = \int_{\mathbb{R}} \Psi(x, 0) x \overline{\Psi(x, 0)} = x_0,$$

y para la posición, usando que el operador correspondiente al momento era $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, tenemos

$$\langle p \rangle = \int_{\mathbb{R}} \Psi(x, 0) \hat{p} \overline{\Psi(x, 0)} = p_0,$$

es decir que nuestra partícula tiene un momento p_0 y está en la posición x_0 .

Si ahora intentamos determinar con que precisión estamos asegurando los valores de estas dos magnitudes tenemos que calcular las varianzas σ_x y σ_p ,

$$\sigma_x = \int_{\mathbb{R}} |\Psi(x, 0)|^2 (x - x_0)^2 = \frac{b^2}{2}, \quad \sigma_p = \int_{\mathbb{R}} |\Psi(x, 0)|^2 (\hat{p} - p_0)^2 = \frac{\hbar^2}{2b^2}$$

$$\sigma_x \sigma_p = \frac{\hbar^2}{4}, \quad \iff \quad \Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}, \quad \text{con } \Delta x = \sqrt{\sigma_x} \text{ y } \Delta p = \sqrt{\sigma_p}$$

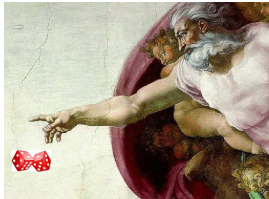
No podemos nunca medir con una precisión tan grande como se quiera las dos magnitudes Δx y Δp .

En el citado artículo de Born este escribía:

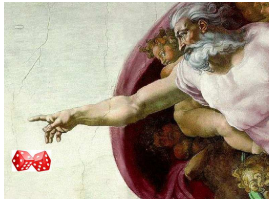
Aunque el problema del determinismo ha aparecido [...] yo mismo me inclino a dejar a un lado el determinismo en el mundo de los átomos. Pero esto es una cuestión filosófica para la cual los argumentos físicos no son concluyentes.

El problema *filosófico* de Born se agudizó más cuando Dirac por un lado, y el mismo Schrödinger por el otro probaban que las dos formulaciones de la Mecánica cuántica, la matricial y la ondulatoria, eran equivalentes.

El problema de la interpretación de la Mecánica Cuántica terminó en una “pelea” abierta entre los que la consideraban una teoría completa –Bohr, Heisenberg, Born ...– y los que la consideraban incompleta –Schrödinger, Einstein ...–.



Como ejemplo de esta polémica es representativa la carta que escribe Einstein a Born el 7 de septiembre de 1944:



Como ejemplo de esta polémica es representativa la carta que escribe Einstein a Born el 7 de septiembre de 1944:

Nuestras expectativas científicas nos han conducido a cada uno a las antípodas del otro. Tú crees en un Dios que juega a los dados, y yo en el valor único de las leyes en un universo en el que cada cosa existe objetivamente [...]. El gran éxito de la teoría de los quanta desde sus comienzos no puede hacerme creer en el carácter fundamental de ese juego de dados [...]. Algún día se descubrirá cual de estas dos actitudes instintivas es la buena.

Para entender esta polémica hay que destacar que ambas teorías, la mecánica matricial y la ondulatoria, describían rigurosamente muchos de los fenómenos del micromundo, pero ambas tenían un gran problema ¿Cómo definir si una partícula cuántica estaba en un estado determinado o en otro?

Para entender esta polémica hay que destacar que ambas teorías, la mecánica matricial y la ondulatoria, describían rigurosamente muchos de los fenómenos del micromundo, pero ambas tenían un gran problema ¿Cómo definir si una partícula cuántica estaba en un estado determinado o en otro?

$$\Psi_1, E_1$$

$$\Psi_2, E_2$$

$$\Psi = a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2, E = ?$$

Para entender esta polémica hay que destacar que ambas teorías, la mecánica matricial y la ondulatoria, describían rigurosamente muchos de los fenómenos del micromundo, pero ambas tenían un gran problema ¿Cómo definir si una partícula cuántica estaba en un estado determinado o en otro?

$$\Psi_1, E_1$$

$$\Psi_2, E_2$$

$$\Psi = a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2, E = ?$$

Si tenemos un instrumento que nos mide la energía

unas veces nos dará E_1 y otras E_2 , y justo la probabilidad de que nos dé una u otra es proporcional a $|a_1|^2$ y $|a_2|^2$, respectivamente.

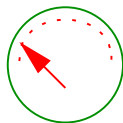
¿Cómo explicar esto?

La teoría de mediciones de von Neumann.

$$A \Psi_1$$

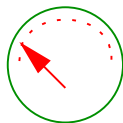
$$B \Psi_2$$

$$A+B \Psi = a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2$$



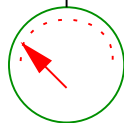
La teoría de mediciones de von Neumann.

$$\begin{array}{cc} \mathbf{A} \Psi_1 & \mathbf{B} \Psi_2 \\ \mathbf{A+B} \Psi = a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2 \end{array}$$



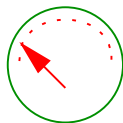
$$\begin{array}{cc} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{A+B} \Psi = a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2 \end{array}$$

A



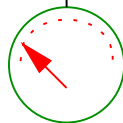
La teoría de mediciones de von Neumann.

$$\begin{array}{cc} \mathbf{A} \Psi_1 & \mathbf{B} \Psi_2 \\ \mathbf{A+B} \Psi = a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2 \end{array}$$



$$\begin{array}{cc} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{A+B} \Psi = a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2 \end{array}$$

A



$$\Psi_{A+M} = c_1 \Psi_1 \otimes \Phi_1 + c_2 \Psi_2 \otimes \Phi_2.$$

¡Vaya lio!

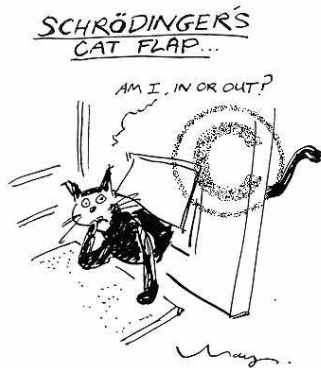
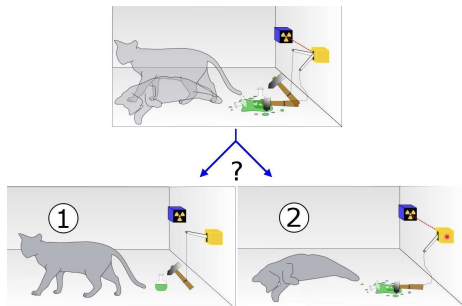
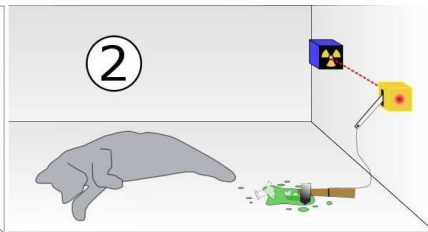
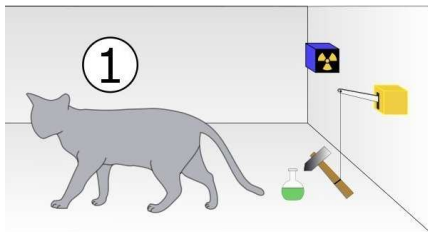
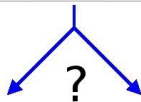
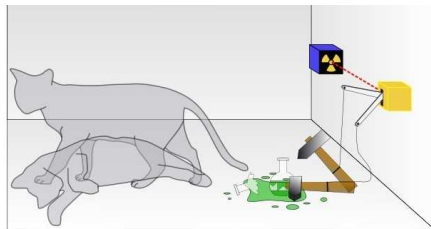


Figura: La paradoja del Gato de Schrödinger.

Entendiendo eso del gato de Schrödinger

Video: Schrödinger's Cat by Sheldon



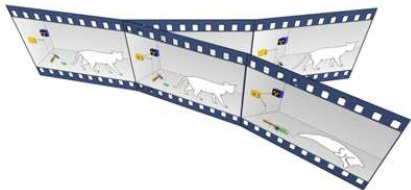
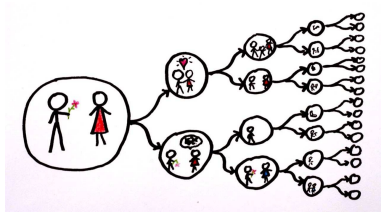


Figura: Los universos paralelos de Everett. Cada decisión que tomamos o medición que hacemos desdobra nuestro universo en dos o más, de forma que siempre hay uno donde ocurre cada uno de los sucesos probables.

La construcción matemática impuso el “orden” en el aparente caos de la interpretación. Los principales axiomas o postulados de la Mecánica Cuántica se pueden resumir en los siguientes:

La construcción matemática impuso el “orden” en el aparente caos de la interpretación. Los principales axiomas o postulados de la Mecánica Cuántica se pueden resumir en los siguientes:

- I. Cualquier magnitud física se describe a través de un operador lineal “hermítico” \hat{A} definido sobre un espacio de Hilbert \mathcal{H} , cuyos vectores Ψ definen los posibles estados del sistema físico.

La construcción matemática impuso el “orden” en el aparente caos de la interpretación. Los principales axiomas o postulados de la Mecánica Cuántica se pueden resumir en los siguientes:

- I. Cualquier magnitud física se describe a través de un operador lineal “hermítico” \hat{A} definido sobre un espacio de Hilbert \mathcal{H} , cuyos vectores Ψ definen los posibles estados del sistema físico.
- II. Los valores $f(a')$ que puede tomar una magnitud física son aquellos que corresponden al espectro del operador lineal hermítico \hat{A} que caracteriza dicha magnitud.

La construcción matemática impuso el “orden” en el aparente caos de la interpretación. Los principales axiomas o postulados de la Mecánica Cuántica se pueden resumir en los siguientes:

- I. Cualquier magnitud física se describe a través de un operador lineal “hermítico” \hat{A} definido sobre un espacio de Hilbert \mathcal{H} , cuyos vectores Ψ definen los posibles estados del sistema físico.
- II. Los valores $f(a')$ que puede tomar una magnitud física son aquellos que corresponden al espectro del operador lineal hermítico \hat{A} que caracteriza dicha magnitud.
- III. El valor esperado de una magnitud física x cualquiera de un sistema en el estado Ψ , es $\langle \Psi | x | \Psi \rangle$, donde $\langle \cdot | \cdot \rangle$ representa el producto escalar en el espacio de Hilbert.

La construcción matemática impuso el “orden” en el aparente caos de la interpretación. Los principales axiomas o postulados de la Mecánica Cuántica se pueden resumir en los siguientes:

- I. Cualquier magnitud física se describe a través de un operador lineal “hermítico” \hat{A} definido sobre un espacio de Hilbert \mathcal{H} , cuyos vectores Ψ definen los posibles estados del sistema físico.
- II. Los valores $f(a')$ que puede tomar una magnitud física son aquellos que corresponden al espectro del operador lineal hermítico \hat{A} que caracteriza dicha magnitud.
- III. El valor esperado de una magnitud física x cualquiera de un sistema en el estado Ψ , es $\langle \Psi | x | \Psi \rangle$, donde $\langle \cdot | \cdot \rangle$ representa el producto escalar en el espacio de Hilbert.
- IV. La función de onda Ψ del sistema está gobernada por la ecuación de Schrödinger $\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$, donde \hat{H} es el operador de Hamilton del sistema.

El estado de una partícula de masa m en el instante de tiempo t viene biunívocamente determinado por la *función de onda* $\Psi(\vec{r}, t)$. La densidad de probabilidad de encontrar la partícula en el instante t en la región del espacio de volumen $d^3\vec{r}$ alrededor del punto \vec{r} es $d^3P(\vec{r}) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}$.

Postulado 1

El estado de una partícula de masa m en el instante de tiempo t viene biunívocamente determinado por la *función de onda* $\Psi(\vec{r}, t)$. La densidad de probabilidad de encontrar la partícula en el instante t en la región del espacio de volumen $d^3\vec{r}$ alrededor del punto \vec{r} es $d^3P(\vec{r}) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}$.

Para que el postulado 1 tenga sentido debe ocurrir que para cada t fijo

$$\int_{\Omega} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = 1,$$

donde Ω es aquella región *accesible* a la partícula, es decir, la región donde con certeza absoluta puede estar la partícula (en general dicha región será \mathbb{R}^3). Lo anterior indica que, para cada t , la función Ψ es de cuadrado integrable y esta normalizada a la unidad. Al espacio vectorial de las funciones de cuadrado integrable lo denotaremos por $L^2(\Omega)$ o simplemente L^2 .

Para explicar los fenómenos de interferencia y difracción de electrones que mencionamos en el apartado anterior se ha de introducir un segundo postulado fundamental:

Para cada t el espacio de las funciones de estado es un subespacio vectorial del espacio $L^2(\Omega)$. Es decir, para cada t , si Ψ_1 y Ψ_2 son funciones de onda, entonces

$$\forall \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}, \quad \Psi = \alpha_1 \Psi_1 + \alpha_2 \Psi_2,$$

es una posible función de onda, es decir, Ψ puede representar un posible estado del sistema.

Para explicar los fenómenos de interferencia y difracción de electrones que mencionamos en el apartado anterior se ha de introducir un segundo postulado fundamental:

Para cada t el espacio de las funciones de estado es un subespacio vectorial del espacio $L^2(\Omega)$. Es decir, para cada t , si Ψ_1 y Ψ_2 son funciones de onda, entonces

$$\forall \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}, \quad \Psi = \alpha_1 \Psi_1 + \alpha_2 \Psi_2,$$

es una posible función de onda, es decir, Ψ puede representar un posible estado del sistema.

Lo anterior indica que, para cada t , cualquier combinación lineal de funciones es una (posible) función de onda. Ello implica además que la ecuación de evolución que gobierne o determine las funciones de onda ha de ser lineal.

La función de onda viene determinada por la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t),$$

donde Δ es el laplaciano en \mathbb{R}^3 , y V es el potencial al que está sometida la partícula.

La función de onda viene determinada por la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t),$$

donde Δ es el laplaciano en \mathbb{R}^3 , y V es el potencial al que está sometida la partícula.

La ecuación anterior se suele escribir de la forma

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t),$$

donde \hat{H} es el operador correspondiente al hamiltoniano del sistema. En nuestro caso está claro que es

$$\hat{H} := -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \hat{I}.$$

Resolviendo la ecuación de Schrödinger

El método de Nikiforov-Uvarov

La ecuación hipergeométrica generalizada

$$u''(z) + \frac{\tilde{\tau}(z)}{\sigma(z)} u'(z) + \frac{\tilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} u(z) = 0, \quad (EHG)$$

siendo $\tilde{\tau}(z)$ un polinomio de grado a lo más uno y $\sigma(z)$ y $\tilde{\sigma}(z)$ polinomios de grado a lo más dos.

La ecuación hipergeométrica generalizada

$$u''(z) + \frac{\tilde{\tau}(z)}{\sigma(z)} u'(z) + \frac{\tilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} u(z) = 0, \quad (EHG)$$

siendo $\tilde{\tau}(z)$ un polinomio de grado a lo más uno y $\sigma(z)$ y $\tilde{\sigma}(z)$ polinomios de grado a lo más dos.

Hagamos el cambio $u(z) = \phi(z)y(z)$,

$$y''(z) + \left(2 \frac{\phi'(z)}{\phi(z)} + \frac{\tilde{\tau}(z)}{\sigma(z)} \right) y'(z) + \left(\frac{\phi''(z)}{\phi(z)} + \frac{\phi'(z)\tilde{\tau}(z)}{\phi(z)\sigma(z)} + \frac{\tilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} \right) y(z) = 0.$$

El objetivo del cambio es convertir la ecuación anterior en una más sencilla –o por lo menos menos complicada– que (EHG). Comparando ambas:

$$u''(z) + \frac{\tilde{\tau}(z)}{\sigma(z)} u'(z) + \frac{\tilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} u(z) = 0$$

$$y''(z) + \left(2 \frac{\phi'(z)}{\phi(z)} + \frac{\tilde{\tau}(z)}{\sigma(z)} \right) y'(z) + \left(\frac{\phi''(z)}{\phi(z)} + \frac{\phi'(z)\tilde{\tau}(z)}{\phi(z)\sigma(z)} + \frac{\tilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} \right) y(z) = 0.$$

debemos tener

El objetivo del cambio es convertir la ecuación anterior en una más sencilla –o por lo menos menos complicada– que (EHG). Comparando ambas:

$$u''(z) + \frac{\tilde{\tau}(z)}{\sigma(z)} u'(z) + \frac{\tilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} u(z) = 0$$

$$y''(z) + \left(2 \frac{\phi'(z)}{\phi(z)} + \frac{\tilde{\tau}(z)}{\sigma(z)} \right) y'(z) + \left(\frac{\phi''(z)}{\phi(z)} + \frac{\phi'(z)\tilde{\tau}(z)}{\phi(z)\sigma(z)} + \frac{\tilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} \right) y(z) = 0.$$

debemos tener

$$2 \frac{\phi'(z)}{\phi(z)} + \frac{\tilde{\tau}(z)}{\sigma(z)} = \frac{\tau(z)}{\sigma(z)}, \quad \circ \quad \frac{\phi'(z)}{\phi(z)} = \frac{\tau(z) - \tilde{\tau}(z)}{2\sigma(z)} = \frac{\pi(z)}{\sigma(z)},$$

siendo τ un polinomio de grado a lo más uno y, por tanto, π polinomio de grado a lo más uno.

Es decir la ecuación original

$$u''(z) + \frac{\tilde{\tau}(z)}{\sigma(z)} u'(z) + \frac{\tilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} u(z) = 0$$

se transforma en una equivalente

$$y''(z) + \frac{\tau(z)}{\sigma(z)} y'(z) + \frac{\bar{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} y(z) = 0,$$

$$\tau(z) = \tilde{\tau}(z) + 2\pi(z),$$

$$\bar{\sigma}(z) = \tilde{\sigma}(z) + \pi^2(z) + \pi[\tilde{\tau}(z) - \sigma'(z)] + \pi'(z)\sigma(z).$$

Es decir la ecuación original

$$u''(z) + \frac{\tilde{\tau}(z)}{\sigma(z)} u'(z) + \frac{\tilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} u(z) = 0$$

se transforma en una equivalente

$$y''(z) + \frac{\tau(z)}{\sigma(z)} y'(z) + \frac{\bar{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} y(z) = 0,$$

$$\tau(z) = \tilde{\tau}(z) + 2\pi(z),$$

$$\bar{\sigma}(z) = \tilde{\sigma}(z) + \pi^2(z) + \pi[\tilde{\tau}(z) - \sigma'(z)] + \pi'(z)\sigma(z).$$

¿Cómo usamos esto para resolver la ecuación original?

Como $\bar{\sigma}$ es un polinomio de grado dos a lo sumo, impongamos que sea proporcional al propio σ , es decir que

$$\bar{\sigma}(z) = \lambda\sigma(z)$$

Como $\bar{\sigma}$ es un polinomio de grado dos a lo sumo, impongamos que sea proporcional al propio σ , es decir que

$$\bar{\sigma}(z) = \lambda\sigma(z)$$

Ello es posible pues $\bar{\sigma}$ tiene dos coeficientes indeterminados –los coeficientes del polinomio π – y λ es una constante a determinar, lo que nos conduce a tres ecuaciones –al igualar los coeficientes de $\bar{\sigma}$ y σ – con tres incógnitas.

Como $\bar{\sigma}$ es un polinomio de grado dos a lo sumo, impongamos que sea proporcional al propio σ , es decir que

$$\bar{\sigma}(z) = \lambda\sigma(z)$$

Ello es posible pues $\bar{\sigma}$ tiene dos coeficientes indeterminados –los coeficientes del polinomio π – y λ es una constante a determinar, lo que nos conduce a tres ecuaciones –al igualar los coeficientes de $\bar{\sigma}$ y σ – con tres incógnitas.

Hecho esto, nuestra ecuación se transforma en

la ecuación hipergeométrica

$$\sigma(z)y'' + \tau(z)y' + \lambda y = 0.$$

Pasemos a calcular π y λ . Como $\bar{\sigma} = \lambda\sigma(z)$, entonces

$$\tilde{\sigma}(z) + \pi^2(z) + \pi[\tilde{\tau}(z) - \sigma'(z)] + \pi'(z)\sigma(z) = \lambda\sigma(z),$$

o, equivalentemente,

$$\pi^2(z) + [\tilde{\tau}(z) - \sigma'(z)]\pi(z) + \{\tilde{\sigma}(z) - [\lambda - \pi'(z)]\sigma(z)\} = 0.$$

Pasemos a calcular π y λ . Como $\bar{\sigma} = \lambda\sigma(z)$, entonces

$$\tilde{\sigma}(z) + \pi^2(z) + \pi[\tilde{\tau}(z) - \sigma'(z)] + \pi'(z)\sigma(z) = \lambda\sigma(z),$$

o, equivalentemente,

$$\pi^2(z) + [\tilde{\tau}(z) - \sigma'(z)]\pi(z) + \{\tilde{\sigma}(z) - [\lambda - \pi'(z)]\sigma(z)\} = 0.$$

Supongamos que $k = \lambda - \pi'(z)$ es conocido, entonces tenemos una ecuación de segundo orden para $\pi(z)$. Luego

$$\pi(z) = \frac{\sigma'(z) - \tilde{\tau}(z)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(z) - \tilde{\tau}(z)}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma}(z) + k\sigma(z)}, \quad (*)$$

pero $\pi(z)$ ha de ser un polinomio de grado a lo sumo uno, por tanto el polinomio

$$\Upsilon(z) = \left(\frac{\sigma'(z) - \tilde{\tau}(z)}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma}(z) + k\sigma(z)$$

ha de ser un cuadrado perfecto, es decir su discriminante debe ser cero, lo que nos conduce a una ecuación para encontrar k . El k encontrado lo sustituimos en (*) y obtenemos $\pi(z)$, el cual nos conduce directamente a $\lambda = \pi'(z) + k$.

La ecuación hipergeométrica

$$\sigma(z)y'' + \tau(z)y' + \lambda y = 0.$$

$$\text{Si } x^k \sigma(x) \rho(x) \Big|_a^b = 0, \quad \text{para todo } k \geq 0.$$

Entonces las soluciones polinómicas la Ec. Hip. constituyen una sucesión de polinomios ortogonales (SPO) respecto a la función peso ρ definida por

la ecuación de Pearson

$$[\sigma(x)\rho(x)]' = \tau(x)\rho(x)$$

$$\int_a^b P_n(x)P_m(x)\rho(x)dx = \delta_{n,m}d_n^2,$$

donde $\delta_{n,m}$ es el símbolo de Kronecker y d_n la norma de P_n .

Si queremos que la función peso sea positiva e integrable en el interior del intervalo de ortogonalidad y suponemos que $\sigma(x) > 0$ en dicho intervalo se puede comprobar que el polinomio τ ha de cumplir dos propiedades importantes:

Si queremos que la función peso sea positiva e integrable en el interior del intervalo de ortogonalidad y suponemos que $\sigma(x) > 0$ en dicho intervalo se puede comprobar que el polinomio τ ha de cumplir dos propiedades importantes:

- 1 En primer lugar la derivada de τ ha de ser negativa. Esto es particularmente importante en los casos cuando $\sigma = 1$ y $\sigma = x$, que corresponden a intervalos de ortogonalidad no acotados,
- 2 τ ha de anularse en el interior del intervalo de ortogonalidad. Ello es consecuencia de que $P_1(x) = B_1\tau(x)$ y de las propiedades de los ceros.

La ecuación de Schrödinger y los polinomios ortogonales clásicos

$P_n(x)$	$H_n(x)$	$L_n^\alpha(x)$	$P_n^{\alpha,\beta}(x)$
$\sigma(x)$	1	x	$1 - x^2$
$\tau(x)$	$-2x$	$-x + \alpha + 1$	$-(\alpha + \beta + 2)x + \beta - \alpha$
λ_n	$2n$	n	$n(n + \alpha + \beta + 1)$
$\rho(x)$	e^{-x^2}	$x^\alpha e^{-x}$ $\alpha > -1$	$(1 - x)^\alpha (1 + x)^\beta$ $\alpha, \beta > -1$
B_n	$\frac{(-1)^n}{2^n}$	$(-1)^n$	$\frac{(-1)^n}{(n + \alpha + \beta + 1)_n}$

$$H_n(x) = \begin{cases} (-1)^m \left(\frac{1}{2}\right)_m {}_1F_1\left(\frac{-m}{\frac{1}{2}} \mid x^2\right), & n = 2m \\ (-1)^m \left(\frac{3}{2}\right)_m x {}_1F_1\left(\frac{-m}{\frac{3}{2}} \mid x^2\right), & n = 2m + 1 \end{cases}$$

$$L_n^\alpha(x) = \frac{(-1)^n \Gamma(n + \alpha + 1)}{\Gamma(\alpha + 1)} {}_1F_1\left(\frac{-n}{\alpha + 1} \mid x\right),$$

$$P_n^{\alpha, \beta}(x) = \frac{2^n (\alpha + 1)_n}{(n + \alpha + \beta + 1)_n} {}_2F_1\left(\frac{-n, n + \alpha + \beta + 1}{\alpha + 1} \mid \frac{1 - x}{2}\right).$$

$$H_n(x) = \begin{cases} (-1)^m \left(\frac{1}{2}\right)_m {}_1F_1\left(\frac{-m}{\frac{1}{2}} \middle| x^2\right), & n = 2m \\ (-1)^m \left(\frac{3}{2}\right)_m x {}_1F_1\left(\frac{-m}{\frac{3}{2}} \middle| x^2\right), & n = 2m + 1 \end{cases}$$

$$L_n^\alpha(x) = \frac{(-1)^n \Gamma(n + \alpha + 1)}{\Gamma(\alpha + 1)} {}_1F_1\left(\frac{-n}{\alpha + 1} \middle| x\right),$$

$$P_n^{\alpha, \beta}(x) = \frac{2^n (\alpha + 1)_n}{(n + \alpha + \beta + 1)_n} {}_2F_1\left(\frac{-n, n + \alpha + \beta + 1}{\alpha + 1} \middle| \frac{1 - x}{2}\right).$$

$${}_pF_q\left(\begin{matrix} a_1, a_2, \dots, a_p \\ b_1, b_2, \dots, b_q \end{matrix} \middle| x\right) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a_1)_k (a_2)_k \cdots (a_p)_k}{(b_1)_k (b_2)_k \cdots (b_q)_k} \frac{x^k}{k!}.$$

$$(a)_0 = 1, \quad (a)_k = a(a + 1) \cdots (a + k - 1), \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

Teorema

Los polinomios de tipo hipergeométricos (clásicos) $p_n(x)$ son las únicas soluciones de la ecuación hipergeométrica

$$\sigma(z)y'' + \tau(z)y' + \lambda y = 0$$

tales que las funciones

$$\psi_n(x) = \sqrt{\rho(x)}p_n(x),$$

donde $\rho(x)$ es la función peso con respecto a la cual los p_n son ortogonales, son **acotadas y de cuadrado integrable** en (a, b) , siendo (a, b) el soporte de la función peso.

Partimos de la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\Psi(x) = E\Psi(x), \quad x \in \mathbb{R}.$$

Partimos de la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\Psi(x) = E\Psi(x), \quad x \in \mathbb{R}.$$

Haciendo el cambio $x = \sqrt{\hbar/(m\omega)}\xi$, $E = \hbar\omega\varepsilon/2$, se transforma en la ecuación

$$\Psi''(\xi) + (\varepsilon - \xi^2)\Psi(\xi) = 0,$$

que obviamente es del tipo hipergeométrico generalizado

$$u''(z) + \frac{\tilde{\tau}(z)}{\sigma(z)}u'(z) + \frac{\tilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)}u(z) = 0$$

con $\tilde{\tau}(\xi) = 0$, $\sigma(\xi) = 1$ y $\tilde{\sigma}(\xi) = \varepsilon - \xi^2$.

$$\tilde{\tau}(\xi) = 0, \sigma(\xi) = 1 \text{ y } \tilde{\sigma}(\xi) = \varepsilon - \xi^2$$

$$k = \lambda - \pi'(z), \quad \tau(z) = \tilde{\tau}(z) + 2\pi(z), \quad \frac{\phi'(z)}{\phi(z)} = \frac{\pi(z)}{\sigma(z)}$$

$$\pi(z) = \frac{\sigma'(z) - \tilde{\tau}(z)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(z) - \tilde{\tau}(z)}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma}(z) + k\sigma(z)}$$

$$\tilde{\tau}(\xi) = 0, \quad \sigma(\xi) = 1 \quad \text{y} \quad \tilde{\sigma}(\xi) = \varepsilon - \xi^2$$

$$k = \lambda - \pi'(z), \quad \tau(z) = \tilde{\tau}(z) + 2\pi(z), \quad \frac{\phi'(z)}{\phi(z)} = \frac{\pi(z)}{\sigma(z)}$$

$$\pi(z) = \frac{\sigma'(z) - \tilde{\tau}(z)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(z) - \tilde{\tau}(z)}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma}(z) + k\sigma(z)}$$

$$\Psi(\xi) = \sqrt{\frac{2^n}{\sqrt{\pi}n!}} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi), \quad \varepsilon = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

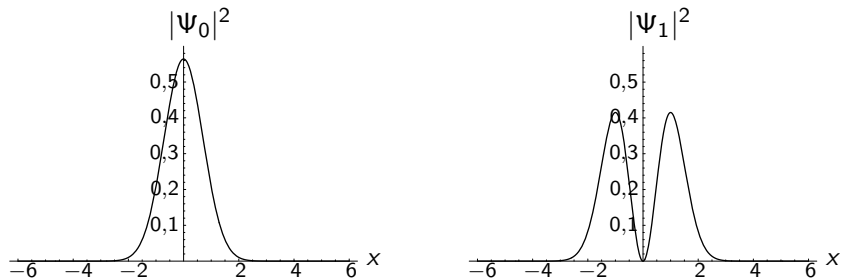


Figura: Estado fundamental ψ_0 y excitado ψ_1 del oscilador armónico.

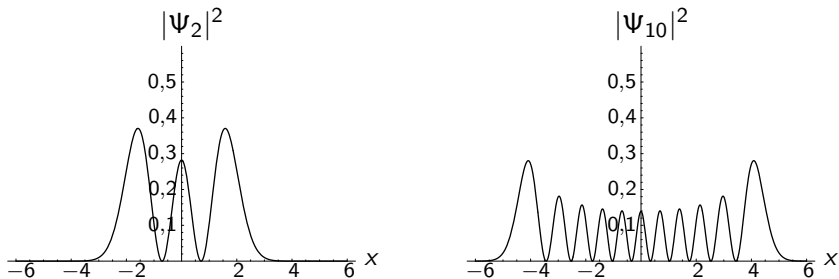


Figura: Estados excitados ψ_n , $n = 2$ y $n = 10$ del oscilador armónico.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(r,\theta,\phi) + V(r)\Psi(r,\theta,\phi) = E\Psi(r,\theta,\phi),$$

con $V(r) = -\alpha/r$, m la masa del electrón, $\phi \in [0, 2\pi)$, $\theta \in [0, \pi]$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(r,\theta,\phi) + V(r)\Psi(r,\theta,\phi) = E\Psi(r,\theta,\phi),$$

con $V(r) = -\alpha/r$, m la masa del electrón, $\phi \in [0, 2\pi)$, $\theta \in [0, \pi]$.

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right),$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(r, \theta, \phi) + V(r)\Psi(r, \theta, \phi) = E\Psi(r, \theta, \phi),$$

con $V(r) = -\alpha/r$, m la masa del electrón, $\phi \in [0, 2\pi)$, $\theta \in [0, \pi]$.

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right),$$

o bien

$$\Delta = \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\angle},$$

donde

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right), \quad \Delta_{\angle} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

denotan a los laplacianos radial y angular respectivamente.

$$\left[\Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\Omega} \right] \Psi(r, \theta, \phi) + [\varepsilon - v(r)] \Psi(r, \theta, \phi) = 0,$$

donde $v(r) = 2m/\hbar^2 V(r)$ y $\varepsilon = -2m/\hbar^2 E$.

Separando las variables $\Psi(r, \theta, \phi) = F(r)Y(\theta, \phi)$

$$\Delta_{\Omega} Y(\theta, \phi) + \mu Y(\theta, \phi) = 0, \quad \Delta_r F(r) + \left[\varepsilon - v(r) - \frac{\mu}{r^2} \right] F(r) = 0,$$

donde μ es cierta constante a determinar.

$$\left[\Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\Omega} \right] \Psi(r, \theta, \phi) + [\varepsilon - v(r)] \Psi(r, \theta, \phi) = 0,$$

donde $v(r) = 2m/\hbar^2 V(r)$ y $\varepsilon = -2m/\hbar^2 E$.

Separando las variables $\Psi(r, \theta, \phi) = F(r)Y(\theta, \phi)$

$$\Delta_{\Omega} Y(\theta, \phi) + \mu Y(\theta, \phi) = 0, \quad \Delta_r F(r) + \left[\varepsilon - v(r) - \frac{\mu}{r^2} \right] F(r) = 0,$$

donde μ es cierta constante a determinar.

Comencemos por la **primera**. Sea (SV) $Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$

$$\Phi''(\phi) + \nu \Phi(\phi) = 0,$$

$$\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) + [\mu \sin^2 \theta - \nu] \Theta(\theta) = 0,$$

donde ν es cierta constante.

$$\left[\Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\Omega} \right] \Psi(r, \theta, \phi) + [\varepsilon - v(r)] \Psi(r, \theta, \phi) = 0,$$

donde $v(r) = 2m/\hbar^2 V(r)$ y $\varepsilon = -2m/\hbar^2 E$.

Separando las variables $\Psi(r, \theta, \phi) = F(r)Y(\theta, \phi)$

$$\Delta_{\Omega} Y(\theta, \phi) + \mu Y(\theta, \phi) = 0, \quad \Delta_r F(r) + \left[\varepsilon - v(r) - \frac{\mu}{r^2} \right] F(r) = 0,$$

donde μ es cierta constante a determinar.

Comencemos por la **primera**. Sea (SV) $Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$

$$\Phi''(\phi) + \nu \Phi(\phi) = 0,$$

$$\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) + [\mu \sin^2 \theta - \nu] \Theta(\theta) = 0,$$

donde ν es cierta constante.

Ejercicio: **Resolver ambas eq.**

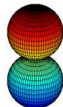
Solución de la parte angular: los *armónicos esféricos*

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \Theta_{lm}(\cos \theta), \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad m = -l, -l+1, \dots,$$

$$Y_0^0 = 1$$



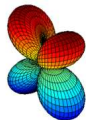
$$Y_1^0 = \cos \theta$$



$$Y_2^0 = 3\cos^2 \theta - 1$$



$${}^{\pm}Y_2^1 = \cos \theta \sin \theta \sin \phi$$



$$Y_3^0 = 5\cos^3 \theta - 3\cos \theta$$



$${}^{\pm}Y_3^1 = (5\cos^2 \theta - 1) \sin \theta \cos \phi$$



Finalmente la parte radial tiene la forma

$$\Delta_r F(r) + \left[\varepsilon - v(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] F(r) = 0, \quad \Delta_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

Como $\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial F(r)}{\partial r} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [rF(r)]$, hacemos $F(r) = R(r)/r$

$$R''(r) + \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{\alpha}{r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0.$$

Haciendo el cambio $\zeta = r/a_0$, donde $a_0 = \hbar^2/(m\alpha)$ obtenemos

$$R''(\zeta) + \left[2 \left(\varepsilon + \frac{1}{\zeta} \right) - \frac{l(l+1)}{\zeta^2} \right] R(\zeta) = 0.$$

$$R''(\zeta) + \left[2 \left(\varepsilon + \frac{1}{\zeta} \right) - \frac{l(l+1)}{\zeta^2} \right] R(\zeta) = 0.$$

Esta ecuación es del tipo

$$u''(z) + \frac{\tilde{\tau}(z)}{\sigma(z)} u'(z) + \frac{\tilde{\sigma}(z)}{\sigma^2(z)} u(z) = 0$$

con

$$\sigma(\zeta) = \zeta, \quad \tilde{\sigma}(\zeta) = 2\varepsilon\zeta^2 + 2\zeta - l(l+1), \quad \tilde{\tau}(\zeta) = 0.$$

$$\sigma(\zeta) = \zeta, \quad \tilde{\sigma}(\zeta) = 2\varepsilon\zeta^2 + 2\zeta - l(l+1), \quad \tilde{\tau}(\zeta) = 0.$$

$$k = \lambda - \pi'(z), \quad \tau(z) = \tilde{\tau}(z) + 2\pi(z), \quad \frac{\phi'(z)}{\phi(z)} = \frac{\pi(z)}{\sigma(z)}$$

$$\pi(z) = \frac{\sigma'(z) - \tilde{\tau}(z)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(z) - \tilde{\tau}(z)}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma}(z) + k\sigma(z)}$$

$$\sigma(\zeta) = \zeta, \quad \tilde{\sigma}(\zeta) = 2\varepsilon\zeta^2 + 2\zeta - l(l+1), \quad \tilde{\tau}(\zeta) = 0.$$

$$k = \lambda - \pi'(z), \quad \tau(z) = \tilde{\tau}(z) + 2\pi(z), \quad \frac{\phi'(z)}{\phi(z)} = \frac{\pi(z)}{\sigma(z)}$$

$$\pi(z) = \frac{\sigma'(z) - \tilde{\tau}(z)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(z) - \tilde{\tau}(z)}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma}(z) + k\sigma(z)}$$

$$\varepsilon := \varepsilon_{n,l} = -\frac{1}{2(n+l+1)^2}, \quad n, l = 0, 1, 2, \dots$$

Fijados n y l , la solución es $x = 2\sqrt{-2\varepsilon_{n,l}\zeta}$

$$R_{nl}(\zeta) = \sqrt{\frac{1}{(n+l+1)^2 n! (2n+l+1)!}} x^{l+1} e^{-x/2} L_n^{2l+1}(x),$$

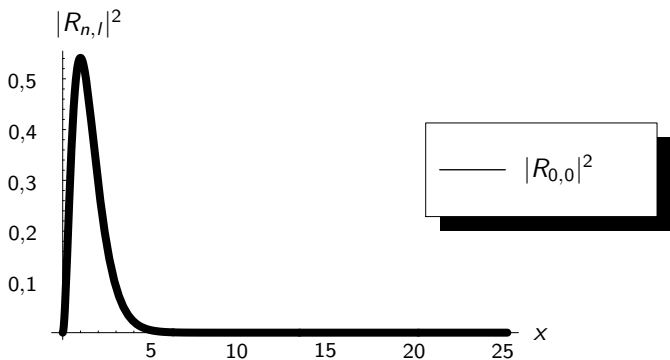


Figura: Estado fundamental del átomo de Hidrógeno.

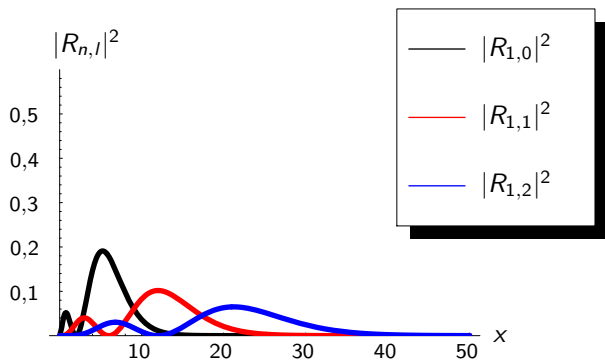
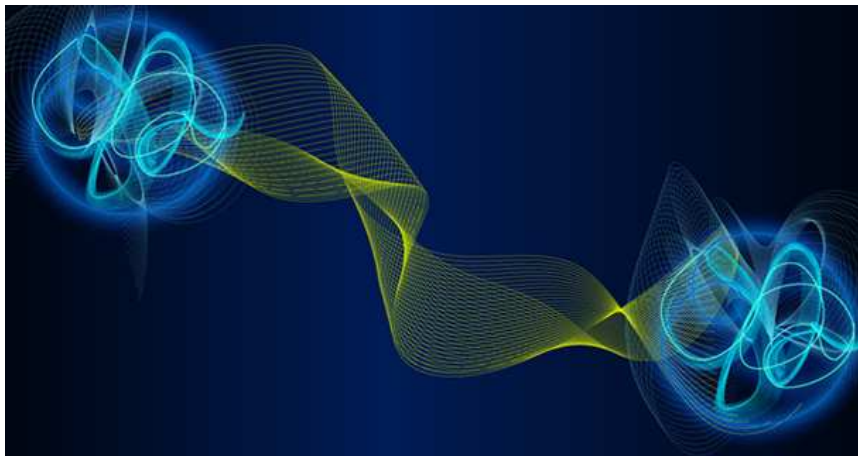


Figura: Estados excitados $n = 1$, $l = 0, 1, 2$ del átomo de Hidrógeno.

Si usted piensa que entiende a la mecánica cuántica... entonces usted no entiende la mecánica cuántica. Richard Feynman

Si usted piensa que entiende a la mecánica cuántica... entonces usted no entiende la mecánica cuántica. Richard Feynman



- 1 R. Álvarez-Nodarse, *Polinomios hipergométricos y q-polinomios*. Monografías del Seminario Matemático “García de Galdeano” Vol. **26**. Prensas Universitarias de Zaragoza, Zaragoza, 2003.

Versión corregida de nov. 2014 en:

<http://euler.us.es/~renato/q-libro/>

- 2 R. Feynman, R. B. Leighton y M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics*. Vol. III. *Mecánica Cuántica*. Fondo Educativo Interamericano 1971.
- 3 A. F. Nikiforov y V. B. Uvarov, *Special Functions of Mathematical Physics*. Birkhäuser Verlag, Basilea, 1988.