

Tema 5

Mecanica Ondulatoria

Alfonso V. Ramallo

En este tema estudiaremos una realizacion de la mecanica cuantica que permite describir el movimiento de las particulas en el espacio de posiciones \mathbb{R}^3 o en el espacio de momentos. Para ello hemos de empezar generalizando el formalismo del espacio de Hilbert al caso de espacios de dimension infinita. Aunque esta generalizacion matematica es tecnicamente mas compleja, la mecanica ondulatoria resultante es la formulacion original de la mecanica cuantica y es necesaria para poder resolver muchos problemas de fisica muy relevantes.

1 Espacios de Hilbert de dimension infinita

En los problemas que hemos estudiado hasta el momento el espacio de Hilbert de estados tenia dimension finita. Sin embargo, muchos otros problemas de mecanica cuantica no es posible analizarlos en un espacio de estados con una base finita o incluso numerable. Consideremos el ejemplo de una particula libre moviendose en una dimension. Una posible base de estados para este sistema es $\{|x\rangle\}$, siendo $|x\rangle$ el estado en el cual la particula esta localizada en el punto de coordenada x . Esto es equivalente a decir que $|x\rangle$ es autovector del operador de posicion X con autovalor x :

$$X|x\rangle = x|x\rangle . \quad (1.1)$$

Tomemos los estados $\{|x\rangle\}$ como base del espacio de estados. Un estado arbitrario sera una superposicion del tipo:

$$|f\rangle = \sum_{x \in \mathbb{R}} f(x) |x\rangle , \quad (1.2)$$

siendo $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ una funcion de la variable real x que toma valores en los numeros complejos. En realidad la suma sobre los numeros reales (1.2) deberia ser una integral:

$$|f\rangle = \int dx f(x) |x\rangle . \quad (1.3)$$

Asi pues el estado estara caracterizado por una funcion $f(x)$ (en lugar de por un vector de componentes v_i). De hecho $f(x)$ puede considerarse como un vector con un numero infinito de componentes (una por cada punto x).

Veamos ahora cual seria el producto interior. En el caso finito-dimensional tenemos:

$$\langle u|v\rangle = \sum_i u_i^* v_i . \quad (1.4)$$

Si el numero de dimensiones es infinito, la definicion natural del producto de dos vectores $|f\rangle$ y $|g\rangle$ es:

$$\langle f|g\rangle = \sum_{x \in \mathbb{R}} f^*(x) g(x) , \quad (1.5)$$

donde la suma debe de interpretarse como una integral sobre \mathbb{R} :

$$\langle f|g\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx f^*(x) g(x) . \quad (1.6)$$

La norma asociada a este producto interior es:

$$\|f\| = \sqrt{\langle f|f\rangle} = \left[\int_{\mathbb{R}} dx |f(x)|^2 \right]^{\frac{1}{2}} . \quad (1.7)$$

Las funciones que tienen una norma finita con esta definicion se denominan **funciones de cuadrado integrable**. Estas funciones, junto con el producto interior que hemos definido, forman el **espacio de Hilbert** $L^2(\mathbb{R})$.

Veamos como deben de estar normalizados los estados $\{|x\rangle\}$. Para ello tengamos en cuenta que:

$$|f\rangle = \int dx f(x) |x\rangle \implies \langle f| = \int dx f^*(x) \langle x| . \quad (1.8)$$

Entonces si $|g\rangle = \int dx' g(x') |x'\rangle$, tenemos:

$$\langle f|g\rangle = \int dx \int dx' f^*(x) g(x') \langle x|x'\rangle . \quad (1.9)$$

Comparado esta ultima expresion con (1.6), concluimos que:

$$\int dx' g(x') \langle x|x'\rangle = g(x) , \quad (1.10)$$

y, por lo tanto, deberiamos tener:

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x') , \quad (1.11)$$

siendo $\delta(x)$ la funcion- δ de Dirac. Recordemos algunas de las propiedades de esta funcion generalizada:

$$\delta(x) = \delta(-x) , \quad \delta(ax) = |a|^{-1} \delta(x) , \quad \text{si } a \neq 0 , \quad (1.12)$$

ademas de la siguiente representacion integral:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ikx} . \quad (1.13)$$

La funcion- δ puede derivarse. Su derivada $\delta'(x)$ satisfice:

$$\int dx f(x) \delta'(x) = -f'(0) . \quad (1.14)$$

En los espacios de vectoriales de dimension infinita que hemos descrito las sumas se convierten en integrales y las δ 's de Kronecker se substituyen por funciones- δ de Dirac. Podemos asi construir la siguiente tabla de analogias:

$ v\rangle = \sum_i v_i i\rangle$	\implies	$ v\rangle = \int dx v(x) x\rangle$
$\langle i j\rangle = \delta_{ij}$	\implies	$\langle x x'\rangle = \delta(x - x')$
$\langle u v\rangle = \sum_i u_i^* v_i$	\implies	$\langle u v\rangle = \int dx u^*(x) v(x)$
$\sum_j \delta_{ij} v_j = v_i$	\implies	$\int dx' \delta(x - x') v(x') = v(x)$
$1 = \sum_i i\rangle\langle i $	\implies	$1 = \int dx x\rangle\langle x $

Esta claro de estas analogias que las componentes v_i del vector $|v\rangle$ se substituyen por la funcion $v(x)$, en la cual el argumento x de la funcion se puede pensar como un indice continuo:

$$v_i \rightarrow v(x) . \quad (1.15)$$

2 Representacion de posicion

Tomemos como base de estados los autoestados del operador posicion X , que satisfacen (1.1) y estan normalizados como en (1.11). Utilicemos la resolucion de la unidad:

$$1 = \int dx |x\rangle\langle x| , \quad (2.1)$$

para expandir un estado arbitrario $|\psi\rangle$ en la base $\{|x\rangle\}$:

$$|\psi\rangle = \int dx |x\rangle\langle x|\psi\rangle = \int dx \psi(x) |x\rangle , \quad (2.2)$$

siendo:

$$\boxed{\psi(x) \equiv \langle x|\psi\rangle} \quad (2.3)$$

Observemos que $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ es una funcion de valores complejos que tiene la misma informacion que el vector abstracto $|\psi\rangle$. La funcion $\psi(x)$ se denomina **funcion de**

onda en la representacion de posicion. Como $\psi(x)$ es igual al producto interno $\langle x|\psi\rangle$, la funcion de onda $\psi(x)$ es la amplitud de probabilidad de encontrar la particula en el punto de coordenada x cuando esta en el estado $|\psi\rangle$. Equivalentemente, $|\psi(x)|^2 dx$ es la probabilidad de que la particula este entre x y $x + dx$ en el estado $|\psi\rangle$. La probabilidad total de que la particula se encuentre en algun sitio debe de ser uno, por lo que debe de verificarse la condicion de normalizacion:

$$\boxed{\int dx |\psi(x)|^2 = 1} \quad (2.4)$$

Esta condicion es equivalente a que $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Para demostrarlo observemos que:

$$\langle\psi| = \int dx' \psi^*(x') \langle x'| , \quad (2.5)$$

y, por consiguiente:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int dx \int dx' \psi^*(x') \psi(x) \langle x'|x\rangle = \int dx |\psi(x)|^2 , \quad (2.6)$$

donde, en el segundo paso, hemos utilizado (1.11). Por tanto, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ es equivalente a que la integral $\int dx |\psi(x)|^2$ sea igual a la unidad. Se sigue entonces que la funcion $\psi(x)$ pertenece al espacio $L^2(\mathbb{R})$.

Veamos ahora como actua el operador posicion X sobre las funciones de onda $\psi(x)$. Para ello calculemos:

$$X|\psi\rangle = \int dx \psi(x) X|x\rangle = \int dx x \psi(x) |x\rangle . \quad (2.7)$$

Si definimos la accion del operador X sobre la funcion de onda $\psi(x)$ en la forma:

$$X\psi(x) \equiv \langle x| X|\psi\rangle , \quad (2.8)$$

vemos que el operador X actua mutiplicativamente sobre $\psi(x)$:

$$\boxed{X\psi(x) = x\psi(x)} \quad (2.9)$$

Observese tambien que el valor esperado del operador posicion es:

$$\boxed{\langle X\rangle_\psi = \langle\psi| X|\psi\rangle = \int dx x |\psi(x)|^2} \quad (2.10)$$

3 El operador momento

Para identificar el operador momento lineal estudiemos como se realizan las traslaciones espaciales. Sabemos que el momento lineal debe de estar relacionado con

dichas traslaciones. Sea $T(a)$ el operador unitario que realiza la operacion $x \rightarrow x+a$, siendo a una constante. Sobre los estados $|x\rangle$ de posicion bien definida el operador $T(a)$ actua como:

$$T(a) |x\rangle = |x+a\rangle . \quad (3.1)$$

Veamos como actua $T(a)$ sobre un estado $|\psi\rangle$. Definamos $|\psi\rangle_a \equiv T(a) |\psi\rangle$ y veamos como cambia la funcion de onda bajo la transformacion $|\psi\rangle \rightarrow |\psi\rangle_a$.

$$|\psi\rangle_a = T(a) |\psi\rangle = T(a) \int dx \psi(x) |x\rangle = \int dx \psi(x) |x+a\rangle . \quad (3.2)$$

Haciendo en la integral anterior el cambio de variable $x+a \rightarrow x$, obtenemos:

$$|\psi\rangle_a = \int dx \psi(x-a) |x\rangle . \quad (3.3)$$

Por tanto la funcion de onda del estado trasladado es $\psi_a(x) = \langle x|T(a)|\psi\rangle$ o, equivalentemente:

$$\boxed{\psi_a(x) = \langle x|\psi\rangle_a = \psi(x-a)} \quad (3.4)$$

Calculemos el cambio del valor medio del operador posicion despues de una traslacion:

$${}_a\langle\psi|X|\psi\rangle_a = {}_a\langle\psi|\int dx X \psi(x) |x+a\rangle = {}_a\langle\psi|\int dx (x+a) \psi(x) |x+a\rangle . \quad (3.5)$$

Substituyendo en esta ultima ecuacion ${}_a\langle\psi| = \int dx' \langle x'| \psi^*(x'-a)$, que se obtiene tomando el hermitico conjugado de (3.3), obtenemos:

$$\begin{aligned} {}_a\langle\psi|X|\psi\rangle_a &= \int dx \int dx' (x+a) \langle x'|x+a\rangle \psi^*(x'-a) \psi(x) = \\ &= \int dx \int dx' (x+a) \delta(x'-x-a) \psi^*(x'-a) \psi(x) = \int dx (x+a) \psi^*(x) \psi(x) = \\ &= \int dx x |\psi(x)|^2 + a \int dx |\psi(x)|^2 . \end{aligned} \quad (3.6)$$

Teniendo en cuenta la condicion de normalizacion (2.4) de la funcion de onda, podemos escribir:

$$\boxed{{}_a\langle\psi|X|\psi\rangle_a = \langle\psi|X|\psi\rangle + a} \quad (3.7)$$

Consideremos ahora una **traslacion infinitesimal**, $T(\delta a)$, siendo δa pequeño. Expandiendo en serie de Taylor y teniendo en cuenta que $T(0) = 1$, obtenemos a primer orden en δa :

$$T(\delta a) \approx 1 + \left(\frac{dT}{da}\right)_{a=0} \delta a , \quad (3.8)$$

Definamos:

$$\boxed{G \equiv i \left(\frac{dT}{da}\right)_{a=0}} \quad (3.9)$$

G es un operador que se denomina **generador infinitesimal de la traslacion**. De esta defnición se sigue que:

$$\boxed{T(\delta a) \approx 1 - i G \delta a} \quad (3.10)$$

Ademas, sabemos por (3.4) que:

$$\langle x|T(\delta a)|\psi\rangle = \psi(x - \delta a) \quad (3.11)$$

Hagamos una expansion de los dos miembros de esta ultima ecuacion a primer orden en δa . Expandiendo el primer miembro obtenemos:

$$\langle x|T(\delta a)|\psi\rangle \approx \langle x|\psi\rangle - i\delta a \langle x|G|\psi\rangle = \psi(x) - i\delta a \langle x|G|\psi\rangle . \quad (3.12)$$

Por otra parte, si expandimos en serie de Taylor el segundo miembro, llegamos a:

$$\psi(x - \delta a) \approx \psi(x) - \frac{d\psi}{dx} \delta a . \quad (3.13)$$

Igualando los terminos de primer orden en δa , tenemos:

$$\boxed{\langle x|G|\psi\rangle = -i \frac{d\psi}{dx}} \quad (3.14)$$

Sea $\langle x|G|\psi\rangle \equiv G\psi(x)$ la funcion de onda del estado $G|\psi\rangle$ en la representacion de posicion. Entonces la ecuacion anterior se convierte en:

$$\boxed{G\psi(x) = -i \frac{d\psi}{dx}} \quad (3.15)$$

Por lo tanto el generador de las traslaciones actua sobre las funciones de onda como $-i \frac{d}{dx}$. Este operador deberia ser proporcional al operador momento lineal puesto que este ultimo, como sabemos, genera las traslaciones espaciales en fisica. Para encontrar la relacion precisa entre ambos examinemos las unidades de G . Claramente $G\delta a$ es adimensional pues esta sumado a la unidad en (3.10). Sea P el operador momento que estamos buscando. Pongamos:

$$P = (\text{constante}) G \implies G = \frac{P}{\text{constante}} . \quad (3.16)$$

Por lo tanto:

$$\frac{P \delta a}{\text{constante}} \implies \text{dimensional} . \quad (3.17)$$

Se sigue que la constante debe de tener unidades de momento \times longitud:

$$[\text{constante}] = [M] [L] [T]^{-1} [L] = [M] [L]^2 [T]^{-1} . \quad (3.18)$$

Estas son las unidades de la accion=energia \times tiempo. Efectivamente:

$$[\text{accion}] = [M] [L]^2 [T]^{-2} [T] = [M] [L]^2 [T]^{-1} . \quad (3.19)$$

Es por tanto natural escoger la constante igual al cuanto de accion, es decir \hbar :

$$\boxed{G = \frac{P}{\hbar}} \quad (3.20)$$

Entonces, el operador de traslaciones espaciales infinitesimales es:

$$\boxed{T(\delta a) = 1 - \frac{i}{\hbar} P \delta a} \quad (3.21)$$

y el operador momento actuando sobre las funciones de onda en la representacion de posicion es:

$$\boxed{P = -i\hbar \frac{d}{dx} \implies P\psi(x) = -i\hbar \frac{d\psi}{dx}} \quad (3.22)$$

4 Las relaciones canonicas de conmutacion

Obtengamos ahora la relacion de conmutacion entre el operador posicion X y el operador momento P . Hagamos actuar el producto de ambos sobre una funcion de onda $\psi(x)$:

$$\begin{aligned} X P \psi(x) &= x \left(-i\hbar \frac{d\psi}{dx} \right) = -i\hbar x \frac{d\psi}{dx} , \\ P X \psi(x) &= -i\hbar \frac{d}{dx} (x \psi(x)) = -i\hbar \psi(x) - i\hbar x \frac{d\psi}{dx} . \end{aligned} \quad (4.1)$$

Entonces, el conmutador $[X, P]$ actua sobre la funcion de onda como:

$$[X, P] \psi(x) = (X P - P X) \psi(x) = i\hbar \psi(x) \quad (4.2)$$

Dado que $\psi(x)$ es arbitraria, obtenemos la denominada **relacion canonica de conmutacion**:

$$\boxed{[X, P] = i\hbar} \quad (4.3)$$

Observese la relacion entre este conmutador y el corchete de Poisson canonico entre la coordenada X y su momento canonico conjugado P en mecanica clasica:

$$\{X, P\}_P = 1 . \quad (4.4)$$

El conmutador cuantico (4.3) se obtiene a partir de la relacion anterior haciendo la substitucion:

$$\{X, P\}_P \rightarrow -\frac{i}{\hbar} [X, P] . \quad (4.5)$$

Es interesante recordar que hay que hacer una substitucion similar para pasar de la evolucion temporal clasica al teorema de Ehrenfest.

Los operadores X y P son hermiticos. Para comprobar que $X^\dagger = X$ debemos de verificar que, para todo par de estados $|\phi\rangle$ y $|\psi\rangle$, se verifica que:

$$\langle X \phi | \psi \rangle = \langle \phi | X \psi \rangle . \quad (4.6)$$

Comprobemoslo caculando los dos miembros de la igualdad anterior:

$$\begin{aligned} \langle X \phi | \psi \rangle &= \int_A^B (x\phi(x))^* \psi(x) dx = \int_A^B dx x \phi^*(x) \psi(x) , \\ \langle \phi | X \psi \rangle &= \int_A^B dx \phi^*(x) (x\psi(x)) = \int_A^B dx x \phi^*(x) \psi(x) = \langle X \phi | \psi \rangle . \end{aligned} \quad (4.7)$$

Observese que hemos escogido A y B como los limites de integracion, que definen el rango de la coordenada x (A y B pueden ser finitos o infinitos). Consideremos ahora el operador momento:

$$\begin{aligned} \langle P \phi | \psi \rangle &= \int_A^B \left(-i\hbar \frac{d\phi}{dx} \right)^* \psi(x) dx = i\hbar \int_A^B \frac{d\phi^*}{dx} \psi(x) dx , \\ \langle \phi | P \psi \rangle &= \int_A^B dx \phi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d\psi}{dx} \right) = -i\hbar \int_A^B dx \phi^*(x) \frac{d\psi}{dx} . \end{aligned} \quad (4.8)$$

En principio estas dos ultimas expresiones no son iguales. Para relacionarlas integremos por partes la ultima integral utilizando que:

$$\phi^* \frac{d\psi}{dx} = \frac{d}{dx} (\phi^* \psi) - \frac{d\phi^*}{dx} \psi . \quad (4.9)$$

Obtenemos:

$$\langle \phi | P \psi \rangle = i\hbar \int_A^B dx \frac{d\phi^*}{dx} \psi(x) - i\hbar \phi^*(x) \psi(x) \Big|_{x=A}^{x=B} . \quad (4.10)$$

Por tanto:

$$\langle \phi | P \psi \rangle - \langle P \phi | \psi \rangle = -i\hbar \phi^*(x) \psi(x) \Big|_{x=A}^{x=B} . \quad (4.11)$$

El segundo miembro de esta expresion se anula si escogemos adecuadamente las condiciones de contorno. Por ejemplo, si requerimos que $\phi(x)$ y $\psi(x)$ se anulen en los puntos extremos A y B (esta es la condicion que debemos de imponer si $\phi(x)$ y $\psi(x)$ estan definidas en todo \mathbb{R} , es decir cuando $A = -\infty$ y $B = +\infty$ y $\phi, \psi \in L^2(\mathbb{R})$). Otra posibilidad es que A y B sean finitos e imponemos condiciones de contorno periodicas. En estos casos $P^\dagger = P$. Notese que el factor i en la expresion de P es esencial para verificar la condicion de hermiticidad.

Veamos ahora como actuan las traslaciones espaciales directamente sobre los operadores. Deberia satisfacerse:

$$\boxed{T^\dagger(a) X T(a) = X + a} \quad \boxed{T^\dagger(a) P T(a) = P} \quad (4.12)$$

Comprobemoslo en el caso en el que $a \rightarrow \delta a$ es muy pequeño. Como $P^\dagger = P$ se tiene que, a primer orden, $T^\dagger(\delta a) \approx 1 + \frac{i}{\hbar} P \delta a$ y, por consiguiente:

$$\begin{aligned} T^\dagger(\delta a) X T(\delta a) &\approx \left(1 + \frac{i}{\hbar} P \delta a\right) X \left(1 - \frac{i}{\hbar} P \delta a\right) \approx X + \frac{i}{\hbar} (P X - X P) \delta a = \\ &= X - \frac{i}{\hbar} [X, P] \delta a = X - \frac{i}{\hbar} i \hbar \delta a = X + \delta a . \end{aligned} \quad (4.13)$$

Ademas, de forma similar:

$$T^\dagger(\delta a) P T(\delta a) \approx P - \frac{i}{\hbar} [P, P] \delta a = P . \quad (4.14)$$

Asi pues la relacion canonica de conmutacion $[X, P] = i\hbar$ garantiza el buen comportamiento del operador de traslacion al actuar sobre los operadores X y P .

5 Traslaciones finitas

Supongamos que hacemos una traslacion $x \rightarrow x + a$ con a finito. Siempre podemos construir una traslacion finita haciendo muchas traslaciones infinitesimales, es decir iterando una traslacion infinitesimal un numero grande de veces. Por ejemplo, si dividimos la traslacion $x \rightarrow x + a$ en N pasos tendremos N traslaciones $x \rightarrow x + \frac{a}{N}$. Si N es muy grande, entonces a/N sera pequeño y podemos escribir $T(a/N)$ como:

$$T\left(\frac{a}{N}\right) \approx 1 - \frac{i}{\hbar} P \frac{a}{N} . \quad (5.1)$$

El operador que realiza la traslacion finita $x \rightarrow x + a$ sera simplemente:

$$T(a) = \left[T\left(\frac{a}{N}\right)\right]^N = \left(1 - \frac{i}{\hbar} P \frac{a}{N}\right)^N . \quad (5.2)$$

Si ahora recordamos la definicion de la exponencial como limite:

$$e^{bx} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{bx}{N}\right)^N , \quad (5.3)$$

podemos escribir $T(a)$ como:

$$\boxed{T(a) = \exp\left[-\frac{ia}{\hbar} P\right]} \quad (5.4)$$

Asi pues el operador de traslaciones se obtiene exponenciando el generador P multiplicado por el parametro de la transformacion (es decir a). Observemos que $T(a)$ es unitario dado que P es hermitico:

$$T^\dagger(a) = \exp\left[\frac{ia}{\hbar} P^\dagger\right] = \exp\left[\frac{ia}{\hbar} P\right] = T^{-1}(a) . \quad (5.5)$$

6 Autofunciones del operador posicion

El problema de autovalores del operador X

$$X |x_0\rangle = x_0 |x_0\rangle , \quad (6.1)$$

se reduce a encontrar una funcion $\psi_{x_0}(x)$ tal que:

$$X \psi_{x_0}(x) = x_0 \psi_{x_0}(x) . \quad (6.2)$$

La funcion $\psi_{x_0}(x)$ es la autofuncion del operador posicion X con autovalor x_0 . Recordemos que la funcion de onda asociada a un estado $|\chi\rangle$ es $\langle x|\chi\rangle$. En el caso del estado $|x_0\rangle$ esta funcion sera:

$$\psi_{x_0}(x) = \langle x|x_0\rangle = \delta(x - x_0) . \quad (6.3)$$

Comprobemos que $\psi_{x_0}(x)$ satisface la ecuacion de autovalores:

$$X \psi_{x_0}(x) = x \delta(x - x_0) = x_0 \delta(x - x_0) = x_0 \psi_{x_0}(x) , \quad (6.4)$$

donde, en el segundo paso, hemos utilizado una propiedad de la funcion- δ . Estudiemos la normalizacion y ortogonalidad de estas estados:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{x_1}^*(x) \psi_{x_0}(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x - x_1) \delta(x - x_0) = \delta(x_1 - x_0) . \quad (6.5)$$

Vemos que estos estados no son normalizables (no son cuadrado integrables). Por los tanto no se pueden realizar fisicamente. Es, sin embargo, muy util trabajar con ellos aunque no pertenezcan al espacio de Hilbert de estados.

7 Autofunciones del operador momento

Diagonalizemos ahora el operador momento:

$$P |p\rangle = p |p\rangle . \quad (7.1)$$

La correspondiente autofuncion en la representacion- x sera:

$$\psi_p(x) = \langle x|p\rangle . \quad (7.2)$$

Dado que P actua sobre las funciones de onda en la representacion de posicion como $-i\hbar\partial_x$, la funcion $\psi_p(x)$ debe de satisfacer la ecuacion:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi_p(x)}{\partial x} = p \psi_p(x) . \quad (7.3)$$

Esta ecuacion puede integrarse de forma facil por separacion de variables. En efecto, si la escribimos como:

$$\frac{1}{\psi_p(x)} \frac{\partial \psi_p(x)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \log \psi_p(x) = \frac{i}{\hbar} p , \quad (7.4)$$

se puede integrar inmediatamente:

$$\boxed{\psi_p(x) = C e^{\frac{i}{\hbar} p x}} \quad (7.5)$$

siendo C una constante de integracion. Determinemos C imponiendo una condicion de normalizacion. Dado que P tiene un espectro continuo (como el operador posicion X) esta claro que los correspondientes autovectores deben de satisfacer la condicion:

$$\langle p'|p \rangle = \delta(p' - p) . \quad (7.6)$$

Introduciendo la resolucion de la unidad $1 = \int dx |x\rangle\langle x|$, podemos convertir la ecuacion anterior en:

$$\int dx \langle p'|x \rangle \langle x|p \rangle = \delta(p' - p) . \quad (7.7)$$

Pero, puesto que:

$$\langle p'|x \rangle = \langle x|p' \rangle^* = \psi_{p'}^*(x) , \quad \langle x|p \rangle = \psi_p(x) , \quad (7.8)$$

la condicion de normalizacion toma la forma:

$$\int dx \psi_{p'}^*(x) \psi_p(x) = \delta(p' - p) . \quad (7.9)$$

De nuevo estas funciones no pertenecen al espacio $L^2(\mathbb{R})$. La relacion anterior nos permite calcular la constante C . En efecto, substituyendo (7.5) en (7.9) obtenemos:

$$\int dx \psi_{p'}^*(x) \psi_p(x) = C^* C \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x} = |C|^2 2\pi\hbar \delta(p - p') . \quad (7.10)$$

Teniendo en cuenta que $\delta(p - p') = \delta(p' - p)$ (vease (1.12)), para satisfacer (7.9) debemos de tener:

$$2\pi\hbar |C|^2 = 1 . \quad (7.11)$$

Escogiendo la fase de C de forma que $C \in \mathbb{R}$, llegamos a:

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (7.12)$$

Asi pues, las autofunciones del operador momento son **ondas planas** de la forma:

$$\boxed{\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p x}} \quad (7.13)$$

8 Representacion- x y representacion- p

Sea $|\psi\rangle$ un estado del sistema. Como sabemos, la funcion $\psi(x)$ que aparece al expandir $|\psi\rangle$ en autovectores del operador posicion se llama **funcion de onda en la representacion- x** o, tambien, **funcion de onda en el espacio de posiciones**:

$$|\psi\rangle = \int dx \psi(x) |x\rangle, \quad \psi(x) = \langle x|\psi\rangle. \quad (8.1)$$

Recordemos que $|\psi(x)|^2 dx$ nos da la probabilidad de que la posicion de la particula este entre x y $x+dx$ en el estado $|\psi\rangle$. Es decir $|\psi(x)|^2$ es la densidad de probabilidad en el espacio de posiciones. Del mismo modo podemos expandir $|\psi\rangle$ en autovectores del momento:

$$|\psi\rangle = \int dp \tilde{\psi}(p) |p\rangle. \quad (8.2)$$

Esta claro que:

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle. \quad (8.3)$$

La funcion $\tilde{\psi}(p)$ se denomina **funcion de onda del sistema en la representacion- p** o, tambien, **funcion de onda en el espacio de momentos**. La interpretacion de $\tilde{\psi}(p)$ es similar a $\psi(x)$: $|\tilde{\psi}(p)|^2$ es la densidad de probabilidad en el espacio de momentos. Es decir $|\tilde{\psi}(p)|^2 dp$ es la probabilidad de que la particula tenga un momento entre p y $p+dp$. Por otra parte, dado que $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, tenemos:

$$\begin{aligned} 1 = \langle\psi|\psi\rangle &= \int dp' \tilde{\psi}^*(p') \int dp \tilde{\psi}(p) \langle p'|p\rangle = \\ &= \int dp' \tilde{\psi}^*(p') \int dp \tilde{\psi}(p) \delta(p' - p) = \int dp \tilde{\psi}(p) \psi(p). \end{aligned} \quad (8.4)$$

Por tanto:

$$\boxed{\int dp |\tilde{\psi}(p)|^2 = 1} \quad (8.5)$$

que es la condicion de normalizacion en el espacio de momentos.

Relacionemos ahora $\psi(x)$ y $\tilde{\psi}(p)$. Utilizemos para ello la resolucion de la unidad $\int dx |x\rangle\langle x| = 1$. Obtenemos:

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle = \int dx \langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle. \quad (8.6)$$

Teniendo en cuenta que, segun (7.13), se tiene:

$$\langle p|x\rangle = \langle x|p\rangle^* = \psi_p^*(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} px}, \quad (8.7)$$

y que $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$, se llega a:

$$\boxed{\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar} px} \psi(x)} \quad (8.8)$$

Por tanto, **la funcion de onda en el espacio de momentos es la transformada de Fourier de la funcion de onda en el espacio de posiciones**. El teorema de inversion de Fourier nos permite obtener la relacion inversa:

$$\boxed{\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{\frac{i}{\hbar} px} \tilde{\psi}(p)} \quad (8.9)$$

Este resultado se puede obtener directamente insertando en la definicion de $\psi(x)$ la unidad en la forma $1 = \int dp |p\rangle \langle p|$:

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \int dp \langle x|p\rangle \langle p|\psi\rangle = \int dp \frac{e^{\frac{i}{\hbar} px}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tilde{\psi}(p) . \quad (8.10)$$

Observese que la relacion de Parseval:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dp |\tilde{\psi}(p)|^2 , \quad (8.11)$$

implica que la probabilidad total es la misma en el espacio de posiciones y en el espacio de momentos.

Utilicemos ahora la relacion entre $\psi(x)$ y $\tilde{\psi}(p)$ para encontrar la accion de los operadores X y P en el espacio de momentos. Dado que P actua como $-i\hbar\partial_x$ sobre $\psi(x)$, tenemos:

$$P\psi(x) = -i\hbar\partial_x \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{\frac{i}{\hbar} px} \tilde{\psi}(p) \right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{\frac{i}{\hbar} px} p \tilde{\psi}(p) . \quad (8.12)$$

Asi pues $-i\hbar\partial_x\psi$ corresponde a $p\tilde{\psi}(p)$, es decir P actua multiplicativamente sobre $\tilde{\psi}(p)$:

$$\boxed{P\tilde{\psi}(p) = p\tilde{\psi}(p)} \quad (8.13)$$

Veamos ahora que X actua como $i\hbar\partial_p$ sobre $\tilde{\psi}(p)$:

$$i\hbar\partial_p\tilde{\psi}(p) = i\hbar\partial_p \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar} px} \psi(x) \right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar} px} x \psi(x) \quad (8.14)$$

Por lo tanto:

$$\boxed{X\tilde{\psi}(p) = i\hbar \frac{\partial\tilde{\psi}(p)}{\partial p}} \quad (8.15)$$

9 Relacion de incertidumbre

Obtengamos los valores medios de la posicion y el momento en un estado $|\psi\rangle$:

$$\langle X \rangle_\psi = \langle \psi|X|\psi\rangle = \int dx dx' \langle \psi|x\rangle \langle x|X|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle . \quad (9.1)$$

Utilizando que $\langle x|X|x'\rangle = x\delta(x-x')$, podemos escribir la expresion anterior como:

$$\langle X \rangle_\psi = \int dx dx' x \langle \psi|x \rangle \langle x'|\psi \rangle \delta(x-x') = \int dx x \langle \psi|x \rangle \langle x|\psi \rangle , \quad (9.2)$$

o, equivalentemente:

$$\boxed{\langle X \rangle_\psi = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x |\psi(x)|^2} \quad (9.3)$$

Del mismo modo, trabajando en el espacio de momentos obtenemos:

$$\boxed{\langle P \rangle_\psi = \int_{-\infty}^{+\infty} dp p |\tilde{\psi}(p)|^2} \quad (9.4)$$

Las dispersiones ΔX y ΔP son:

$$\begin{aligned} (\Delta_\psi X)^2 &= \langle \psi|(X - \langle X \rangle_\psi)^2|\psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx (x - \langle X \rangle_\psi)^2 |\psi(x)|^2 , \\ (\Delta_\psi P)^2 &= \langle \psi|(P - \langle P \rangle_\psi)^2|\psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp (p - \langle P \rangle_\psi)^2 |\tilde{\psi}(p)|^2 . \end{aligned} \quad (9.5)$$

La desigualdad de Heisenberg (ecuacion (9.14) del tema 3) en este caso se reduce a:

$$\boxed{\Delta X \Delta P \geq \frac{\hbar}{2}} \quad (9.6)$$

dado que $[X, P] = i\hbar$ (relacion canonica de conmutacion) y que $\langle \psi|\hbar|\psi \rangle = \hbar$. Observe que, dado que el segundo miembro de (9.6) es universal puesto que no depende del estado $|\psi \rangle$, hemos suprimido el subindice ψ de las dispersiones.

10 Evolucion temporal de una particula libre

Estudemos la evolucion temporal de un estado correspondiente a una particula libre. Sea $|\psi \rangle \equiv |\psi(t=0) \rangle$ el vector de estado inicial en $t=0$ y $|\psi(t) \rangle$ el vector de estado en el instante de tiempo t . Tratemos de encontrar la funcion de onda $\psi(x, t)$, definida como:

$$\psi(x, t) \equiv \langle x|\psi(t) \rangle . \quad (10.1)$$

Sabemos que $|\psi(t) \rangle$ esta relacionado con $|\psi(0) \rangle$ a traves del operador de evolucion temporal. Si el hamiltoniano no depende del tiempo, tenemos:

$$|\psi(t) \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} |\psi(0) \rangle . \quad (10.2)$$

Para una particula libre $H = P^2/2m$, y puesto que $P|p \rangle = p|p \rangle$, se sigue que:

$$H |p \rangle = \frac{p^2}{2m} |p \rangle = E(p) |p \rangle , \quad (10.3)$$

siendo $E(p) = \frac{p^2}{2m}$. Por tanto:

$$\langle x|\psi(t)\rangle = \langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi(0)\rangle = \int dp \langle x|p\rangle \langle p|e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi(0)\rangle . \quad (10.4)$$

Teniendo en cuenta (8.7) y que:

$$\langle p|e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = e^{-\frac{i}{\hbar}E(p)t} \langle p| , \quad (10.5)$$

podemos escribir:

$$\boxed{\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{\frac{i}{\hbar}px - \frac{i}{\hbar}E(p)t} \tilde{\psi}(p)} \quad (10.6)$$

Vamos a estudiar esta ecuacion en un caso particular. Supongamos que la funcion de onda en el espacio de momentos esta completamente localizada en un determinado valor $p = \bar{p}$:

$$\tilde{\psi}(p) = \delta(p - \bar{p}) . \quad (10.7)$$

Sustituyendo este valor en la integral, obtenemos:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}(\bar{p}x - E(\bar{p})t)} . \quad (10.8)$$

Es decir la funcion de onda es una **onda plana**. En este caso $|\psi(x,t)|^2$ es constante y, por lo tanto, todos los puntos tienen igual densidad de probabilidad. En la relacion de incertidumbre este estado tendria $\Delta p = 0$ y $\Delta x = \infty$. No es un estado normalizable y, por tanto, **no se puede realizar fisicamente**. Definamos el **vector de onda** k y la **frecuencia angular** ω como:

$$\boxed{k = \frac{p}{\hbar}} \quad \boxed{\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}} \quad (10.9)$$

En terminos de (k, ω) la onda plana puede escribirse de la forma (eliminando la barra en p):

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i(kx - \omega t)} . \quad (10.10)$$

La longitud de onda de esta onda plana es $\lambda = 2\pi/k = 2\pi\hbar/p$, que se denomina **longitud de onda de de Broglie**. La frecuencia de la onda es $\nu = \omega/2\pi$.

La cantidad $kx - \omega t$ se llama **fase** de la onda. La velocidad de la onda es la velocidad de un punto en el cual la fase es constante. Si para este punto $kx - \omega t =$ constante, su posicion x varia con el tiempo como:

$$x = \text{constante} + \frac{\omega}{k} t . \quad (10.11)$$

Esta funcion $x(t)$ corresponde a un movimiento uniforme con velocidad:

$$\boxed{v_f = \frac{\omega}{k}} \quad (10.12)$$

La velocidad v_f se denomina **velocidad de fase de la onda**. En particular, para una partícula libre $\omega/k = E/p = \frac{p}{2m}$ y, por lo tanto, $v_f = \frac{1}{2} \frac{p}{m}$, que es la mitad de la velocidad de una partícula clásica libre. Recordemos, sin embargo, que una onda plana no es un estado normalizable y, en consecuencia, no es un estado realizable físicamente. Los estados normalizables no tienen un valor de p bien definido y se representan por medio de la integral (10.6). En este caso diremos que tenemos un **paquete de ondas**. En términos de k y ω dicha integral se escribe en la forma:

$$\boxed{\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk A(k) e^{i(kx - \omega t)}} \quad (10.13)$$

siendo $A(k) = \sqrt{\hbar} \tilde{\psi}(\hbar k)$. Supongamos que la función $A(k)$ este muy picada en torno a un valor $k = \bar{k}$. Efectuemos una expansión de la fase $kx - \omega t$ en serie de potencias en torno a $k = \bar{k}$. En realidad solo hay que desarrollar la función $\omega = \omega(k)$:

$$\omega(k) = \omega(\bar{k}) + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=\bar{k}} (k - \bar{k}) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k=\bar{k}} (k - \bar{k})^2 + \dots \quad (10.14)$$

(para una partícula libre no hay más términos más allá del cuadrático). Definamos la **velocidad de grupo** del paquete de ondas como:

$$\boxed{v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=\bar{k}} = \left. \frac{dE}{dp} \right|_{p=\bar{p}}} \quad (10.15)$$

Utilizando la forma explícita de la función $\omega = \omega(k)$ para una partícula libre:

$$v_g = \left. \frac{d}{dk} \left(\frac{\hbar k^2}{2m} \right) \right|_{k=\bar{k}} = \frac{\hbar \bar{k}}{m}, \quad (10.16)$$

que, en términos del momento p es:

$$\boxed{v_g = \frac{\bar{p}}{m}} \quad (10.17)$$

Así pues la velocidad de grupo del paquete es igual a la velocidad clásica de la partícula. Además, $\frac{d^2\omega}{dk^2} = \frac{\hbar}{m}$ y si definimos $\bar{\omega} \equiv \omega(k = \bar{k})$, tenemos:

$$\omega = \bar{\omega} + v_g (k - \bar{k}) + \frac{1}{2} (k - \bar{k})^2 \frac{\hbar}{m} = \bar{\omega} - v_g \bar{k} + v_g k + \frac{\hbar}{2m} (k - \bar{k})^2. \quad (10.18)$$

Como

$$\bar{\omega} - v_g \bar{k} = \frac{\hbar \bar{k}^2}{2m} - \frac{\hbar \bar{k}^2}{m} = -\frac{\hbar \bar{k}^2}{2m} = -\bar{\omega} , \quad (10.19)$$

tenemos:

$$\omega = -\bar{\omega} + v_g k + \frac{\hbar}{2m} (k - \bar{k})^2 . \quad (10.20)$$

y, en consecuencia, la fase de la onda plana es:

$$\boxed{kx - \omega t = \bar{\omega} t + k(x - v_g t) + \frac{\hbar}{2m} (k - \bar{k})^2 t} \quad (10.21)$$

Sustituylamos este valor de la fase en la integral (10.13) y despreciemos el termino cuadratico en $k - \bar{k}$:

$$\boxed{\psi(x, t) = \frac{e^{i\bar{\omega} t}}{\sqrt{2\pi}} \int dk A(k) e^{ik(x - v_g t)}} \quad (10.22)$$

La dependencia temporal de la funcion de onda en esta ultima expresion puede escribirse como:

$$\boxed{\psi(x, t) = e^{i\bar{\omega} t} \psi(x - v_g t, 0)} \quad (10.23)$$

Esto significa que, aparte de un factor de fase $e^{i\bar{\omega} t}$, la funcion de onda en el instante t se obtiene a partir de la funcion de onda en $t = 0$ haciendo la sustitucion $x \rightarrow x - v_g t$, lo cual significa que el paquete de ondas se propaga sin deformacion en la direccion x con velocidad $v_g = \bar{p}/m$. De la ecuacion anterior se sigue que la evolucion temporal de la densidad de probabilidad es:

$$\boxed{|\psi(x, t)|^2 = |\psi(x - v_g t, 0)|^2} \quad (10.24)$$

Este comportamiento se representa graficamente en la figura 1.

Este resultado es aproximado y valido para valores del tiempo t , tales que:

$$\frac{\hbar}{2m} (k - \bar{k})^2 t \ll 1 , \quad (10.25)$$

o, equivalentemente:

$$\boxed{t \ll \frac{2m}{\hbar (\Delta k)^2} = \frac{2m \hbar}{(\Delta p)^2}} \quad (10.26)$$

Si esta condicion no se satisface el paquete de ondas se dispersa (se ensancha) mientras que su centro se sigue moviendo a la velocidad v_g .

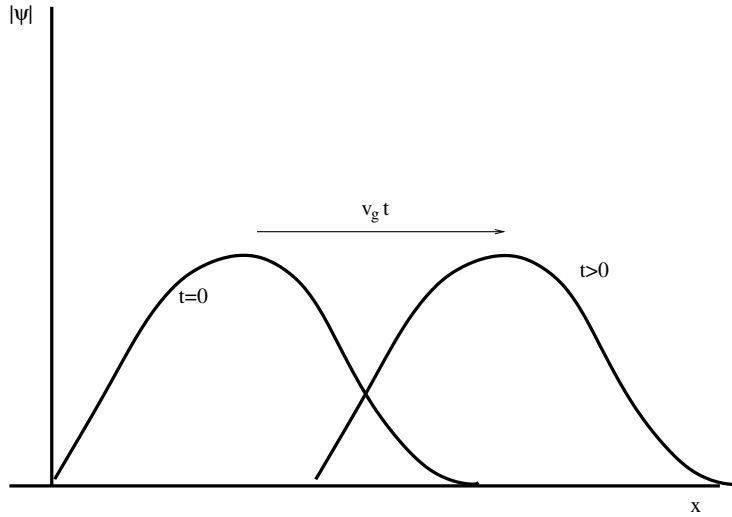


Figure 1: El paquete de ondas se mueve con la velocidad de grupo v_g .

11 La ecuacion de onda

Consideremos una partícula moviéndose en una dimensión bajo la acción de un potencial $V(x)$. El operador hamiltoniano será:

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X) , \quad (11.1)$$

y la ecuación de evolución de los estados es:

$$i \hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle . \quad (11.2)$$

Multipliquemos los dos miembros de esta ecuación por la izquierda por el bra $\langle x|$. Los términos resultantes son:

$$\begin{aligned} i \hbar \langle x | \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= i \hbar \frac{d}{dt} \langle x | \psi(t)\rangle = i \hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} , \\ \langle x | P^2 |\psi(t)\rangle &= P^2 \psi(x, t) = (-i \hbar \partial_x)^2 \psi(x, t) = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} , \\ \langle x | V(X) |\psi(t)\rangle &= V(x) \psi(x, t) . \end{aligned} \quad (11.3)$$

y la ecuación de evolución se convierte en una **ecuación de onda** para la función de onda $\psi(x, t)$:

$$\boxed{i \hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x, t)} \quad (11.4)$$

Esta ecuacion se denomina **ecuacion de Schrödinger** dependiente del tiempo. Tratemos de resolverla por el metodo de separacion de variables. Busquemos una solucion de la forma:

$$\psi(x, t) = \psi(x) \phi(t) . \quad (11.5)$$

Substituyendo este ansatz en la ecuacion de ondas llegamos a:

$$i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{d\phi(t)}{dt} = \frac{1}{\psi(x)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) \right] . \quad (11.6)$$

En esta ecuacion el primer miembro solo depende de t , mientras que el segundo miembro solo depende de x . Por consistencia ambos deben de ser iguales a una constante, que denotaremos por E . Si consideramos el primer miembro, tenemos:

$$i\hbar \frac{d\phi(t)}{dt} = E \phi(t) \quad \implies \quad \phi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} . \quad (11.7)$$

El segundo miembro es equivalente a la ecuacion:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x)} \quad (11.8)$$

que se denomina **ecuacion de Schrödinger independiente del tiempo**. Dicha ecuacion puede escribirse simplemente como:

$$\boxed{H \psi(x) = E \psi(x)} \quad (11.9)$$

donde H es el operador hamiltoniano actuando sobre funciones de onda:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) . \quad (11.10)$$

Asi pues $\psi(x)$ es una autofuncion del operador hamiltoniano y, por tanto, su autovalor E es la energia del sistema. La funcion de onda total es:

$$\boxed{\psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \psi(x)} \quad \boxed{H \psi(x) = E \psi(x)} \quad (11.11)$$

Un estado cuya funcion de onda sea de esta forma se denomina **estado estacionario**. Estos estados se caracterizan por tener un valor bien definido de la energia.

12 La mecanica ondulatoria en tres dimensiones

La generalizacion de la mecanica ondulatoria al movimiento en tres dimensiones es inmediata. El operador posicion es ahora un vector \vec{X} con tres componentes:

$$\vec{X} = (X_1, X_2, X_3) = (X, Y, Z) . \quad (12.1)$$

Sus autoestados sera denotados por $|\vec{x}\rangle$:

$$\vec{X} |\vec{x}\rangle = \vec{x} |\vec{x}\rangle . \quad (12.2)$$

Estos vectores estan normalizados como:

$$\langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') , \quad (12.3)$$

siendo $\delta^{(3)} = \delta(x) \delta(y) \delta(z)$ la funcion- δ en tres dimensiones. La resolucion de la unidad toma ahora la forma:

$$1 = \int d^3x |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}| . \quad (12.4)$$

Si $|\psi\rangle$ es un estado, la funcion de onda asociada en la representacion- \vec{x} es:

$$\boxed{\psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi \rangle} \quad \psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C} . \quad (12.5)$$

La interpretacion de $\psi(\vec{x})$ es la siguiente: $|\psi(\vec{x})|^2 d^3x$ es la probabilidad de que la particula este en un cubo de volumen $d^3x = dx dy dz$ centrado en el punto de coordenadas \vec{x} . Estas funciones satisfacen la siguiente condicion de normalizacion:

$$\int d^3x |\psi(\vec{x})|^2 = 1 , \quad (12.6)$$

es decir $\psi(\vec{x})$ es una funcion de cuadrado integrable en \mathbb{R}^3 ($\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$).

El operador momento $\vec{P} = (P_1, P_2, P_3)$ es el generador de las traslaciones en \mathbb{R}^3 . Consideremos un vector constante \vec{a} y la traslacion espacial $\vec{x} \rightarrow \vec{x} + \vec{a}$. Esta traslacion espacial esta realizada en la teoria cuantica por el operador:

$$\boxed{T(\vec{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \vec{P}}} \quad (12.7)$$

que debe de satisfacer:

$$T^\dagger(\vec{a}) \vec{X} T(\vec{a}) = \vec{X} + \vec{a} , \quad T^\dagger(\vec{a}) \vec{P} T(\vec{a}) = \vec{P} . \quad (12.8)$$

Para que esto sea posible se necesita que se satisfagan las relaciones canonicas de conmutacion:

$$\boxed{[X_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij}} \quad \boxed{[X_i, X_j] = [P_i, P_j] = 0} \quad (12.9)$$

Es facil ver que \vec{P} actua sobre las funciones de onda como:

$$\vec{P} \psi(\vec{x}) = -i\hbar \vec{\nabla} \psi(\vec{x}) . \quad (12.10)$$

Es decir que \vec{P} se representa como el operador:

$$\boxed{\vec{P} = -i\hbar \vec{\nabla}} \quad (12.11)$$

La ecuacion de Schrödinger dependiente del tiempo para una particula bajo la accion del potencial $V(\vec{x})$ es:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}) \right] \psi(\vec{x}, t)} \quad (12.12)$$

Para los estados estacionarios de energia E la funcion de onda es:

$$\psi(\vec{x}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \psi(\vec{x}) , \quad (12.13)$$

donde $\psi(\vec{x})$ satisface la ecuacion Schrödinger independiente del tiempo $H\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$, es decir $\psi(\vec{x})$ es solucion de la ecuacion:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{x}) + V(\vec{x}) \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x})} \quad (12.14)$$

Ademas, los autovectores $|\vec{p}\rangle$ del operador momento \vec{P} satisfacen la ecuacion:

$$\vec{P} |\vec{p}\rangle = \vec{p} |\vec{p}\rangle \quad (12.15)$$

Las correspondientes autofunciones en la representacion- \vec{x} son ondas planas en la forma:

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} = \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle . \quad (12.16)$$

Tambien podemos trabajar en la representacion- \vec{p} , en la cual un estado arbitrario se representa como:

$$|\psi\rangle = \int d^3p \tilde{\psi}(\vec{p}) |\vec{p}\rangle , \quad (12.17)$$

siendo $\tilde{\psi}(\vec{p})$ la funcion de onda en el espacio de momentos, cuya interpretacion es que $|\tilde{\psi}(\vec{p})|^2 d^3p$ es la probabilidad de que la particula tenga un momento entre \vec{p} y $\vec{p} + d\vec{p}$. Las funciones $\psi(\vec{x})$ y $\tilde{\psi}(\vec{p})$ estan relacionadas a traves de la transformada de Fourier:

$$\boxed{\tilde{\psi}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3x e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \psi(\vec{x})} \quad (12.18)$$

cuya inversa es:

$$\boxed{\psi(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3p e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \tilde{\psi}(\vec{p})} \quad (12.19)$$

13 La corriente de probabilidad

Sea $\psi(\vec{x}, t)$ una solucion de la ecuacion de Schrödinger dependiente del tiempo. Sabemos que $|\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x$ nos da la probabilidad de encontrar la particula entre \vec{x} y $\vec{x} + d\vec{x}$ en el instante de tiempo t . Por esta razon la cantidad:

$$\boxed{\rho(\vec{x}, t) \equiv |\psi(\vec{x}, t)|^2} \quad (13.1)$$

se llama **densidad de probabilidad** asociada a la función de onda $\psi(\vec{x}, t)$. Estudiemos su derivada temporal utilizando la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) &= \frac{\partial}{\partial t} (\psi(\vec{x}, t) \psi^*(\vec{x}, t)) = \frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi \right) \psi^* + \psi \left[\frac{i}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V\psi^* \right) \right] = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\nabla^2 \psi \psi^* - \psi \nabla^2 \psi^* \right) = \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla} \cdot [\vec{\nabla} \psi \psi^* - \psi \vec{\nabla} \psi^*]. \end{aligned} \quad (13.2)$$

Si definimos la corriente de probabilidad como:

$$\boxed{\vec{j} \equiv -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)} \quad (13.3)$$

entonces la ecuación que hemos obtenido se puede escribir como una ecuación de continuidad:

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0} \quad (13.4)$$

La interpretación de la ecuación de continuidad es la de una ley de conservación de la probabilidad, completamente similar a la ecuación de conservación de la masa en mecánica de fluidos o a la ley de conservación de la carga en electrodinámica. Si integramos la ecuación de continuidad (13.4) sobre una región tridimensional R de \mathbb{R}^3 y aplicamos el teorema de Gauss, obtenemos:

$$\frac{d}{dt} \int_R d^3x \rho(\vec{x}, t) = - \int_R d^3x \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = - \int_{\partial R} d\vec{s} \cdot \vec{j}, \quad (13.5)$$

siendo ∂R la frontera del volumen R . Es decir la variación de la probabilidad de encontrar la partícula en el volumen R es igual (cambiada de signo) al flujo de la corriente de probabilidad a través de su frontera ∂R . Tenemos así una **ley de conservación de la probabilidad**, completamente similar a la ley de conservación de la masa en un fluido.

14 Los postulados de la mecánica ondulatoria

Formulemos los postulados de la mecánica cuántica para el caso particular de la mecánica ondulatoria.

Postulado 1

El estado de un sistema físico esta representado por una función de onda $\psi(\vec{x}, t)$, que pertenece al espacio $L^2(\mathbb{R}^3)$ de funciones de cuadrado integrable en \mathbb{R}^3 . El producto interior en este espacio es:

$$\langle \chi | \psi \rangle = \int d^3x \chi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) ,$$

y la condición de normalización toma la forma:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int d^3x |\psi(\vec{x}, t)|^2 = 1 . \quad (14.1)$$

Postulado 2

Las propiedades físicas están representadas por operadores hermiticos en el espacio $L^2(\mathbb{R}^3)$. En particular, la posición y el momento lineal están representados por los operadores:

$$\vec{X} = \vec{x} , \quad \vec{P} = -i \hbar \vec{\nabla} , \quad (14.2)$$

que satisfacen las relaciones canónicas de conmutación:

$$[X_i, P_j] = i \hbar \delta_{i,j} . \quad (14.3)$$

Postulado 3

Cuando la cantidad representada por el operador A se mide en el sistema, el resultado es siempre uno de los autovalores de A . Si el estado del sistema esta representado por la función de onda $\psi(\vec{x}, t)$, la probabilidad de que el resultado de la medida sea el valor a es:

$$p(a) = |\langle a | \psi \rangle|^2 = \left| \int d^3x \phi_a^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) \right|^2 , \quad (14.4)$$

siendo $\phi_a(\vec{x}, t)$ la autofunción de A correspondiente al autovalor a . Después de la medida el sistema esta en el estado representado por la autofunción $\phi_a(\vec{x}, t)$.

Postulado 4

La evolución temporal de la función de onda esta determinada por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, que para una partícula sometida a un potencial $V(\vec{x})$ toma la forma:

$$i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}) \right] \psi = H \psi .$$