

Tema 6

Sistemas cuanticos simples

Alfonso V. Ramallo

En este tema aplicaremos el formalismo general de la mecanica cuantica a varios problemas fisicos que pueden resolverse exactamente. A pesar de su sencillez, estos problemas ilustran de manera muy transparente las ideas de la mecanica cuantica y, ademas, son muy relevantes en desarrollos posteriores mas avanzados de la fisica cuantica.

1 Sistemas unidimensionales

Consideremos ahora la ecuacion de Schrödinger independiente del tiempo en una dimension, que escribimos como:

$$\boxed{\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2} \right] \psi(x) = 0} \quad (1.1)$$

donde E es la energia. La funcion de onda completa (dependiente del tiempo) es $e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi(x)$.

Concentremonos, en primer lugar, en el caso de una particula libre, para la cual $V(x) = 0$ y la ecuacion de Schrödinger es:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right] \psi(x) = 0 . \quad (1.2)$$

Esta es una ecuacion diferencial de segundo orden con coeficientes constantes. Las soluciones independientes son de la forma $e^{\alpha x}$, donde la constante α satisface la ecuacion cuadratica:

$$\alpha^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0 , \quad (1.3)$$

cuyas soluciones son:

$$\alpha = \pm \frac{i}{\hbar} \sqrt{2mE} . \quad (1.4)$$

Definamos p como:

$$p = \sqrt{2mE} \quad \leftrightarrow \quad E = \frac{p^2}{2m} . \quad (1.5)$$

Claramente p es el momento de la particula. El vector de onda k se define como:

$$k = \frac{p}{\hbar} . \quad (1.6)$$

Entonces, las soluciones independientes de (1.2) son ondas planas de la forma:

$$\psi_{\pm}(x) = e^{\pm \frac{i}{\hbar} px} = e^{\pm ikx} . \quad (1.7)$$

Como sabemos $\psi_{\pm}(x)$ es autofuncion del operador momento P con autovalor $\pm p$. La solucion general de la ecuacion de Schrödinger es una superposicion:

$$\psi(x) = A e^{\frac{i}{\hbar} px} + B e^{-\frac{i}{\hbar} px} , \quad (1.8)$$

que consiste en una onda plana propagandose hacia x positivo con amplitud A y una onda plana propagandose en la direccion negativa con amplitud B . Las corrientes de probabilidad de estas dos componentes son:

$$\begin{aligned} \boxed{\psi_1 = A e^{\frac{i}{\hbar} px}} &\rightarrow j_1 = -\frac{i\hbar}{2m} \left[\psi_1^* \left(\frac{i}{\hbar} p \right) \psi_1 - \psi_1 \left(-\frac{i}{\hbar} p \right) \psi_1^* \right] = \frac{p}{m} |A|^2 , \\ \boxed{\psi_2 = B e^{-\frac{i}{\hbar} px}} &\rightarrow j_2 = -\frac{i\hbar}{2m} \left[\psi_2^* \left(-\frac{i}{\hbar} p \right) \psi_2 - \psi_2 \left(\frac{i}{\hbar} p \right) \psi_2^* \right] = -\frac{p}{m} |B|^2 . \end{aligned} \quad (1.9)$$

En terminos de las densidades de probabilidad de estas dos ondas, $\rho_1 = |\psi_1|^2$ y $\rho_2 = |\psi_2|^2$, las corrientes j_1 y j_2 son:

$$\boxed{j_1 = \rho_1 v} \quad \boxed{j_2 = -\rho_2 v} \quad (1.10)$$

siendo $v = p/m$ la velocidad. Estos valores de las corrientes j_1 y j_2 confirman la intepretacion dada mas arriba de ψ_1 y ψ_2 .

2 Analisis clasico

Estudiemos ahora el caso de una particula en un potencial exterior, empezando por el problema en mecanica clasica. Supongamos que tenemos una particula unidimensional moviendose bajo la accion de un potencial $V(x)$. La conservacion de energia total es:

$$\frac{p^2}{2m} + V(x) = E . \quad (2.1)$$

Por lo tanto, el momento de la particula cuando esta se encuentra en el punto de coordenada x es:

$$p = \sqrt{2m(E - V(x))} . \quad (2.2)$$

Dado que p es real, es claro que la particula se mueve en las regiones del espacio en las cuales:

$$V(x) \leq E . \quad (2.3)$$

Los puntos en los cuales $V(x) = E$ se llaman **puntos de retroceso**. Si hay dos de estos puntos x_1 y x_2 ($x_1 < x_2$) el movimiento de la particula esta limitado a la region comprendida entre ellos, es decir la posicion x de la particula satisface

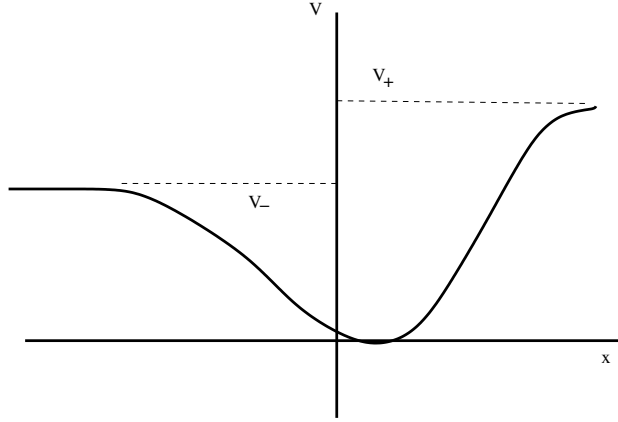


Figure 1: Potencial unidimensional generico con limites finitos V_{\pm} cuando $x \rightarrow \pm\infty$.

$x_1 \leq x \leq x_2$. Tenemos entonces un estado ligado en el cual la partícula oscila entre x_1 y x_2 . Si solo hay un punto de retroceso, o no hay ninguno, el movimiento es ilimitado. Consideremos el siguiente ejemplo generico en el cual el potencial tiende a dos limites finitos V_{\pm} cuando $x \rightarrow \pm\infty$:

$$V_{\pm} = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x) . \quad (2.4)$$

Analícemos un caso concreto cuya representación gráfica es la mostrada en la figura 1. Supongamos que $V_- < V_+$. Es claro que tenemos tres posibles casos:

- 1.- $E > V_+, V_-$ \rightarrow No hay ningún punto de retroceso y la partícula se mueve en toda la recta real.
- 2.- $V_- < E < V_+$ \rightarrow Hay un solo punto de retroceso x_+ , en el cual $V(x_+) = E$. La partícula se mueve entre $x = -\infty$ y x_+ . Es un movimiento ilimitado por la izquierda (es decir ilimitado en la región $x < 0$).
- 3.- $E < V_+, V_-$ \rightarrow Hay dos puntos de retroceso x_+ y x_- y tenemos un estado ligado en el cual la partícula se mueve en el intervalo finito $[x_-, x_+]$.

3 Analisis cuantico

Estudiemos ahora la ecuación de Schrödinger para este tipo de potencial. Para ello vamos a determinar la forma asintótica de la función de onda en las regiones $|x| \rightarrow \infty$. En estas regiones la ecuación de Schrödinger (1.1) toma la forma:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m(E - V_{\pm})}{\hbar^2} \right] \psi_{\pm}(x) = 0 \quad (3.1)$$

donde el indice + (-) se refiere a la region $x \rightarrow +\infty$ ($x \rightarrow -\infty$). Distinguiremos los tres mismos casos que en el analisis clasico.

Caso 1 $E > V_+, V_- \rightarrow$ Movimiento ilimitado

Definamos p_{\pm} como:

$$p_{\pm} = \sqrt{2m(E - V_{\pm})}, \quad p_{\pm} \in \mathbb{R}. \quad (3.2)$$

La solucion general asintotica es:

$$\begin{aligned} \psi_-(x) &= a e^{\frac{i}{\hbar} p_- x} + b e^{-\frac{i}{\hbar} p_- x}, & (x \rightarrow -\infty), \\ \psi_+(x) &= c e^{\frac{i}{\hbar} p_+ x} + d e^{-\frac{i}{\hbar} p_+ x}, & (x \rightarrow +\infty). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Estas soluciones dependen de cuatro constantes complejas indeterminadas (a, b, c, d) que pueden fijarse imponiendo condiciones de contorno. Recuerdese que $e^{\frac{i}{\hbar} p x}$ corresponde a una particula propagandose hacia la derecha (hacia $x > 0$) y $e^{-\frac{i}{\hbar} p x}$ a una particula propagandose hacia la izquierda. Imponiendo la condicion de contorno correspondiente al origen del haz incidente podemos determinar las constantes. Asi:

$$\begin{aligned} \text{Haz incidente propagandose hacia } x > 0 &\implies d = 0 \\ \text{Haz incidente propagandose hacia } x < 0 &\implies a = 0 \end{aligned}$$

Tenemos pues dos tipos de soluciones:

I \rightarrow Haz que viene de la izquierda, se transmite a la derecha y se refleja hacia la izquierda:

$$\begin{aligned} \psi_-(x) &= a e^{\frac{i}{\hbar} p_- x} + b e^{-\frac{i}{\hbar} p_- x}, \\ \psi_+(x) &= c e^{\frac{i}{\hbar} p_+ x}. \end{aligned}$$

II \rightarrow Haz que viene de la derecha, se transmite a la izquierda y se refleja hacia la derecha:

$$\begin{aligned} \psi_-(x) &= \tilde{b} e^{-\frac{i}{\hbar} p_- x}, \\ \psi_+(x) &= \tilde{c} e^{\frac{i}{\hbar} p_+ x} + \tilde{d} e^{-\frac{i}{\hbar} p_+ x}. \end{aligned}$$

El valor de las diferentes amplitudes asintoticas depende del potencial concreto. Observemos que el valor de la energia E no esta fijado, por lo que tenemos un espectro continuo y, debido a que tenemos los dos tipos de solucion (I y II), el espectro es doblemente degenerado.

Concentremos ahora en la solucion I. Las corrientes correspondientes a las tres ondas planas asintoticas son:

$$\begin{aligned}
 j_i &= |a|^2 \frac{p_-}{m} && \rightarrow && \text{corriente incidente ,} \\
 j_r &= -|b|^2 \frac{p_-}{m} && \rightarrow && \text{corriente reflejada ,} \\
 j_t &= |c|^2 \frac{p_+}{m} && \rightarrow && \text{corriente transmitida .}
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

Estas corrientes de probabilidad se interpretan como corrientes de particulas. En este caso tenemos un problema de **difusion** o **scattering** de una particula por un potencial. Los coeficientes de **transmision** T y **reflexion** R se definen como:

$$\boxed{T = \left| \frac{j_t}{j_i} \right|} \quad \boxed{R = \left| \frac{j_r}{j_i} \right|} \tag{3.5}$$

En terminos de las constantes y momentos, estos coeficientes son:

$$\boxed{T = \left| \frac{c}{a} \right|^2 \frac{p_+}{p_-}} \quad \boxed{R = \left| \frac{b}{a} \right|^2} \tag{3.6}$$

El comportamiento descrito es diferente al de la mecanica clasica, en el cual la particula no se refleja si $E > V_+$. En el caso cuantico puede probarse que, en general, se tiene que:

$$\boxed{T + R = 1} \tag{3.7}$$

Esto es consecuencia de la ley de conservacion de la probabilidad.

Caso 2 $\boxed{V_- < E < V_+} \rightarrow \boxed{\text{Movimiento limitado a derecha e ilimitado a la izquierda}}$

Ahora en la region con $x \rightarrow \infty$ la diferencia $E - V_+$ es negativa y, por lo tanto, p_+ es imaginario puro. Pongamos:

$$p_+ = \sqrt{2m(E - V_+)} = i\sqrt{2m(V_+ - E)} \equiv i\hbar\lambda_+ , \quad (\lambda_+ \in \mathbb{R} , \lambda_+ > 0) . \tag{3.8}$$

La solucion asintotica sera:

$$\begin{aligned}
 \psi_-(x) &= a e^{\frac{i}{\hbar} p_- x} + b e^{-\frac{i}{\hbar} p_- x} , && (x \rightarrow -\infty) , \\
 \psi_+(x) &= c e^{-\lambda_+ x} + d e^{\lambda_+ x} , && (x \rightarrow +\infty) .
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

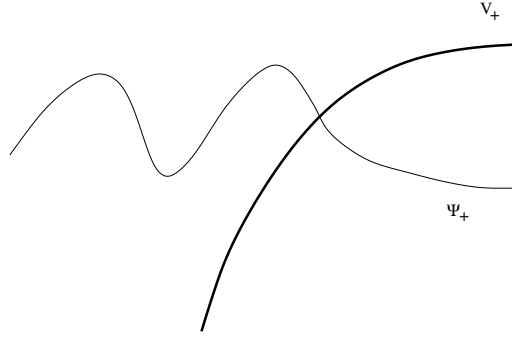


Figure 2: La funcion de onda decae exponencialmente en la region donde $V_+ > E$, que esta prohibida clasicamente.

En la region $x \rightarrow -\infty$ la solucion se comporta igual que en el caso anterior (es una superposicion de dos ondas propagandose en ambas direcciones). Por el contrario, en $x \rightarrow +\infty$ el termino $e^{\lambda+x}$ crece exponencialmente, lo que es inaceptable fisicamente. Por consiguiente debemos de tener $d = 0$ y $\psi_+(x)$ se comporta como:

$$\boxed{\psi_+(x) = c e^{-\lambda_+ x}, \quad (x \rightarrow +\infty)} \quad (3.10)$$

Asi pues la funcion de onda decae exponencialmente en la region prohibida y no hay onda transmitida, es decir $T = 0$. Por la conservacion de la probabilidad (3.7) se sigue que $R = 1$. Ademas el espectro de energia es **continuo y no degenerado**. Observemos que si $V_+ \rightarrow \infty$, entonces $\lambda_+ \rightarrow \infty$ y la funcion de onda $\psi_+(x)$ se anula en la zona prohibida.

Caso 3 $\boxed{E < V_+, V_-} \rightarrow \boxed{\text{Estado ligado}}$

En este caso, tanto $E - V_+$ como $E - V_-$ son negativos. Pongamos:

$$\hbar \lambda_{\pm} = \sqrt{2m(V_{\pm} - E)}, \quad (\lambda_{\pm} \in \mathbb{R}, \lambda_{\pm} \geq 0). \quad (3.11)$$

La solucion asintotica es:

$$\begin{aligned} \psi_-(x) &= a e^{-\lambda_- x} + b e^{\lambda_- x}, & (x \rightarrow -\infty), \\ \psi_+(x) &= c e^{-\lambda_+ x} + d e^{\lambda_+ x}, & (x \rightarrow +\infty). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Para que las soluciones no crezcan exponencialmente en las regiones asintoticas prohibidas clasicamente debemos de imponer que $a = d = 0$. Por lo tanto la solucion debe de comportarse como:

$$\boxed{\begin{aligned} \psi_-(x) &= b e^{\lambda_- x}, & (x \rightarrow -\infty), \\ \psi_+(x) &= c e^{-\lambda_+ x}, & (x \rightarrow +\infty) \end{aligned}}$$

En este caso hay dos puntos de retroceso clásicos y dos regiones prohibidas, en las cuales la función de onda decrece exponencialmente. Matemáticamente tenemos un problema de Sturm-Liouville que tiene un **espectro discreto no degenerado**. Esto quiere decir que solo para determinados valores de la energía E es posible tener el comportamiento asintótico aceptable. De hecho si resolvemos la ecuación diferencial imponiendo condiciones iniciales en $x \rightarrow -\infty$, es decir tomado $a = 0$, en general obtenemos una solución con $d \neq 0$ en $x \rightarrow +\infty$. Solo para ciertos valores de la energía E se verifica que $d = 0$, lo que da lugar al espectro discreto de valores de E mencionado.

3.1 Potenciales discontinuos

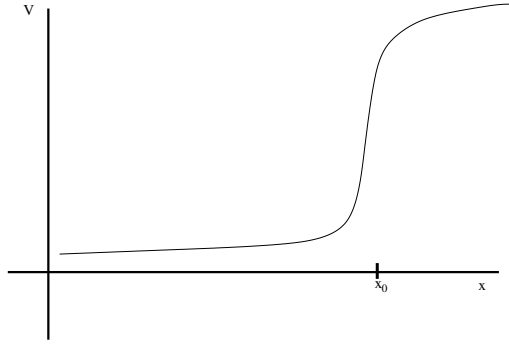


Figure 3: Potencial $V(x)$ que tiene una discontinuidad de salto en el punto $x = x_0$.

En ciertos casos el potencial $V(x)$ en el que se mueven las partículas no es continuo, sino que tiene ciertas discontinuidades. Debemos de estudiar como se comporta la función de onda en estas discontinuidades. Para ello escribamos la ecuación de Schrödinger como:

$$\psi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi(x) . \quad (3.13)$$

Integremos esta ecuación en un intervalo $[a, b]$ que contiene una discontinuidad de $V(x)$. Obtenemos:

$$\psi'(b) - \psi'(a) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_a^b dx (E - V(x)) \psi(x) . \quad (3.14)$$

Supongamos que $V(x)$ tiene un salto finito en $x = x_0$, tal como se muestra en la figura 3. Tomemos en la integral (3.14) los siguientes límites: $a = x_0 - \epsilon$ y $b = x_0 + \epsilon$. Dado que $\psi(x)$ debe de ser continua y la discontinuidad de $V(x)$ es finita, debemos de tener:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \epsilon}^{x_0 + \epsilon} dx (E - V(x)) \psi(x) = 0 , \quad (3.15)$$

pues la función del integrando $((E - V(x)) \psi(x))$ es integrable en $(x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon)$. Se sigue entonces que:

$$\boxed{\psi'(x_0 - \epsilon) = \psi'(x_0 + \epsilon)}, \quad (3.16)$$

es decir $\psi(x)$ y $\psi'(x)$ son continuas en la discontinuidad finita de $V(x)$. Observemos que esto quiere decir que la derivada logarítmica de ψ , es decir ψ'/ψ , también es continua, lo cual es muy útil al analizar casos concretos.

Si $V(x)$ tiene un salto infinito, entonces $\psi'(x)$ puede ser discontinua. Por ejemplo, si $V(x) = \delta(x)$, entonces $V(x)$ tiene una discontinuidad infinita en $x = 0$ y:

$$\int dx \delta(x) \psi(x) = \psi(0). \quad (3.17)$$

Por lo tanto:

$$\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon) = \frac{2m}{\hbar^2} \psi(0). \quad (3.18)$$

4 Ejemplos

Vamos ahora a estudiar varios casos concretos en los cuales se pueden aplicar las ideas expuestas en la sección anterior.

4.1 Potencial escalon

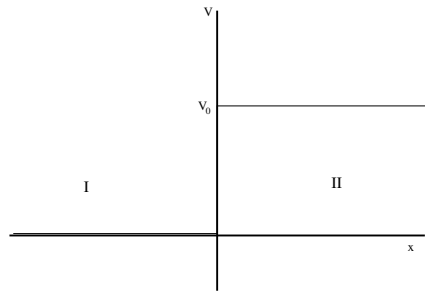


Figure 4: Representación gráfica del potencial escalon (4.1).

Consideremos un potencial de tipo escalon:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0, \\ V_0 & \text{si } x > 0. \end{cases} \quad (4.1)$$

Discutamos los dos posibles casos según el valor de la energía E .

Transmisión y reflexión

Estudiemos primero el caso en el que la energía E de la partícula sea mayor que la altura de la barrera V_0 , es decir cuando $E > V_0$. Según la discusión anterior, las

soluciones de la ecuacion de onda para una particula incidente desde $x = -\infty$ con amplitud unidad son:

$$\begin{aligned} \text{Region I } (x < 0) &\implies \psi(x) = e^{ikx} + B e^{-ikx}, \\ \text{Region II } (x > 0) &\implies \psi(x) = C e^{ik'x}, \end{aligned} \quad (4.2)$$

siendo

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k' = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}. \quad (4.3)$$

Impongamos ahora las condiciones de continuidad de ψ y ψ' en $x = 0$:

$$\begin{aligned} \text{Continuidad de } \psi &\implies \boxed{1 + B = C} \\ \text{Continuidad de } \frac{\psi'}{\psi} &\implies \boxed{\frac{k(1 - B)}{1 + B} = k'} \end{aligned} \quad (4.4)$$

A partir de la segunda de estas ecuaciones podemos obtener B :

$$\boxed{B = \frac{k - k'}{k + k'}} \quad (4.5)$$

Usando este resultado en la primera de las ecuaciones en (4.4), obtenemos C :

$$\boxed{C = \frac{2k}{k + k'}} \quad (4.6)$$

El coeficiente de reflexion es $R = |B|^2$, es decir:

$$\boxed{R = \left(\frac{k - k'}{k + k'}\right)^2} \quad (4.7)$$

El coeficiente de transmision es:

$$T = |C|^2 \frac{k'}{k} = \left(\frac{2k}{k + k'}\right)^2 \frac{k'}{k}, \quad (4.8)$$

es decir:

$$\boxed{T = \frac{4k k'}{(k + k')^2}} \quad (4.9)$$

A partir de estas expresiones puede comprobarse facilmente que $T + R = 1$.

Reflexion total

En este caso $E < V_0$ y las soluciones en las regiones I y II son:

$$\begin{aligned} \text{Region I } (x < 0) & \implies \psi(x) = e^{ikx} + B e^{-ikx} , \\ \text{Region II } (x > 0) & \implies \psi(x) = C e^{-\lambda x} , \end{aligned} \quad (4.10)$$

con

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} , \quad \lambda = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} . \quad (4.11)$$

La continuidad de las soluciones en $x = 0$ implica que:

$$1 + B = C , \quad \frac{ik(1 - B)}{1 + B} = -\lambda . \quad (4.12)$$

Estas son las mismas ecuaciones que las del caso $E > V_0$ cambiando $k' \rightarrow i\lambda$. Entonces las constantes B y C son:

$$\boxed{B = \frac{k - i\lambda}{k + i\lambda}} \quad \boxed{C = \frac{2k}{k + i\lambda}} \quad (4.13)$$

Observemos que si $V_0 \rightarrow \infty$, es decir si la altura de la barrera es infinita, tenemos que $\lambda \rightarrow \infty$, $B \rightarrow -1$ y $C \rightarrow 0$. Esto ultimo implica que, en este caso con $V_0 \rightarrow \infty$, la funcion de onda se anula en la region II.

En general la amplitud B de la onda reflejada tiene modulo unidad, como se puede comprobar facilmente:

$$|B|^2 = B B^* = \frac{(k - i\lambda)(k + i\lambda)}{(k + i\lambda)(k - i\lambda)} = 1 \quad \implies \quad |B| = 1 . \quad (4.14)$$

Se sigue entonces que el coeficiente de reflexion R es igual a uno y el coeficiente de transmision $T = 1 - R$ es nulo. Tenemos entonces reflexion total en la barrera, aunque la onda reflejada adquiere un desfase que se convierte en un tiempo de retroceso.

4.2 Estados ligados en un potencial cuadrado

Consideremos ahora el potencial:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 \leq x < a , \\ +\infty & \text{si } x < 0, x > a . \end{cases} \quad (4.15)$$

Esto corresponde a tener una particula confinada en una caja de anchura a y altura infinita, tal como se muestra en la figura 5.

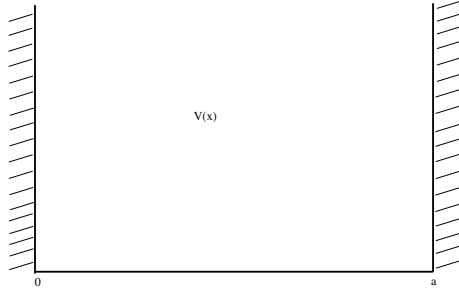


Figure 5: Representacion grafica del potencial cuadrado (4.15).

Para $0 \leq x \leq a$ la solucion es:

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (4.16)$$

Como se ha discutido mas arriba la funcion de onda debe de anularse en las regiones en las que $V = \infty$. Es decir debemos de imponer las condiciones de contorno:

$$\psi(0) = \psi(a) = 0. \quad (4.17)$$

Pero:

$$\begin{aligned} \psi(0) = A + B = 0 & \implies B = -A \implies \\ \psi(x) = A e^{ikx} - A e^{-ikx} = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2i A \operatorname{sen}(kx). \end{aligned} \quad (4.18)$$

Impongamos ahora la condicion $\psi(a) = 0$. De la ecuacion anterior se sigue que $\operatorname{sen}(ka) = 0$, es decir $ka = \pi, 2\pi, 3\pi, \dots$ (hemos descartado la solucion trivial $k = 0$). En definitiva k puede tomar los valores:

$$\boxed{k = k_n = \frac{\pi(n+1)}{a}, \quad n = 0, 1, 2, \dots} \quad (4.19)$$

Los niveles de energia seran:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \implies \boxed{E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} (n+1)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots} \quad (4.20)$$

Tenemos pues un espectro discreto de energia. Las funciones de onda $\psi_n(x)$ son no nulas solo para $0 \leq x \leq a$ y valen:

$$\psi_n(x) = \hat{A} \operatorname{sen} \frac{\pi(n+1)x}{a}, \quad (4.21)$$

donde $\hat{A} = 2i A$. Impongamos la condicion de normalizacion para determinar \hat{A} :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 dx &= \int_0^a |\psi_n(x)|^2 dx = |\hat{A}|^2 \int_0^a \text{sen}^2 \frac{\pi(n+1)x}{a} dx = \\ &= |\hat{A}|^2 \left[\frac{a}{2} - \frac{a}{4\pi(n+1)} \text{sen} \frac{2\pi(n+1)x}{a} \Big|_{x=0}^{x=a} \right] = |\hat{A}|^2 \frac{a}{2} = 1. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Tomando $\hat{A} \in \mathbb{R}$, podemos escribir la funcion de onda $\psi_n(x)$ como:

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen} \frac{\pi(n+1)x}{a}} \quad (4.23)$$

Esta es una funcion de onda que tiene n ceros (es decir n nodos) en el intervalo $[0, a]$. Este es un resultado general para cualquier potencial: si E_n es la energia del n -esimo nivel, la funcion de onda correspondiente tiene n nodos.

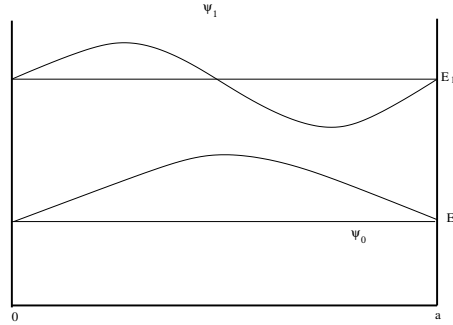


Figure 6: Representacion grafica de las funciones de onda (4.23) para $n = 0$ y $n = 1$. La funcion $\psi_0(x)$ no se anula en el intervalo $0 < x < a$, mientras que $\psi_1(x)$ se anula una vez en dicho intervalo.

4.3 Efecto tunel

Estudiemos la transmision de una partícula a través de una barrera de potencial del tipo:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } |x| < a/2, \\ 0 & \text{si } |x| > a/2. \end{cases} \quad (4.24)$$

que se representa graficamente en la figura 7. Consideremos una partícula con energia E mas baja que la barrera, es decir cuando $E < V_0$. Definamos:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad \lambda = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}. \quad (4.25)$$

La solucion correspondiente a una partícula que incide desde la izquierda es:

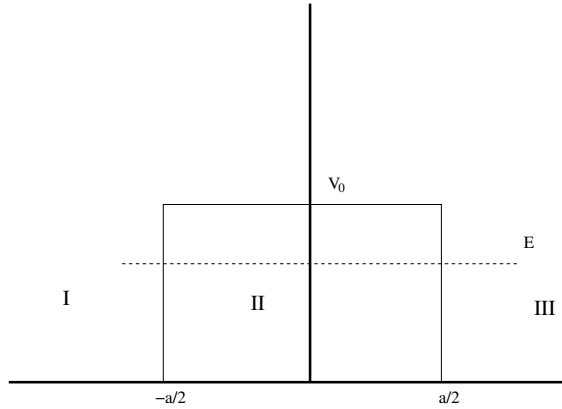


Figure 7: Representacion grafica de la barrera de potencial (4.24).

$$\begin{aligned}
 \psi(x) &= e^{ikx} + B e^{-ikx}, & x \leq \frac{a}{2} & \implies & \text{Region I,} \\
 \psi(x) &= C e^{-\lambda x} + D e^{\lambda x}, & |x| \leq \frac{a}{2} & \implies & \text{Region II,} \\
 \psi(x) &= F e^{ikx}, & x \geq \frac{a}{2} & \implies & \text{Region III.} \quad (4.26)
 \end{aligned}$$

Las condiciones de continuidad entre las regiones I y II son (cuando $x = -\frac{a}{2}$):

$$e^{-\frac{ika}{2}} + B e^{\frac{ika}{2}} = C e^{\frac{\lambda a}{2}} + D e^{-\frac{\lambda a}{2}}, \quad (4.27)$$

$$ik \left(e^{-\frac{ika}{2}} - B e^{\frac{ika}{2}} \right) = -\lambda \left(C e^{\frac{\lambda a}{2}} - D e^{-\frac{\lambda a}{2}} \right). \quad (4.28)$$

De forma similar, las condiciones de regularidad en $x = \frac{a}{2}$ son:

$$C e^{-\frac{\lambda a}{2}} + D e^{\frac{\lambda a}{2}} = F e^{\frac{ika}{2}}, \quad (4.29)$$

$$-\lambda \left(C e^{-\frac{\lambda a}{2}} - D e^{\frac{\lambda a}{2}} \right) = ik F e^{\frac{ika}{2}} \quad (4.30)$$

Tenemos cuatro ecuaciones con cuatro incognitas (B , C , D y F). Para eliminar B entre (4.27) y (4.28), hagamos la combinacion $ik(4.27) + (4.28)$. Procediendo de esta manera obtenemos:

$$2ik e^{-\frac{ika}{2}} = e^{\frac{\lambda a}{2}} (ik - \lambda) C + e^{-\frac{\lambda a}{2}} (ik + \lambda) D. \quad (4.31)$$

Multiplicando esta ultima ecuacion por $e^{-\frac{\lambda a}{2}}$, obtenemos:

$$(ik - \lambda) C + e^{-\lambda a} (ik + \lambda) D = 2ik e^{-\frac{ik+\lambda}{2} a}. \quad (4.32)$$

Por otra parte, si dividimos (4.30) por (4.29), llegamos a una ecuacion en la que no aparece la constante F :

$$-\lambda(C e^{-\frac{\lambda a}{2}} - D e^{\frac{\lambda a}{2}}) = ik(C e^{-\frac{\lambda a}{2}} + D e^{\frac{\lambda a}{2}}). \quad (4.33)$$

Multiplicando esta ultima expresion por $e^{\frac{\lambda a}{2}}$, llegamos a:

$$(ik + \lambda)C + (ik - \lambda)D e^{\lambda a} = 0. \quad (4.34)$$

A partir de (4.32) y (4.34) podemos obtener las constantes C y D . Despejando C de (4.34) llegamos a la relacion:

$$C = \frac{\lambda - ik}{ik + \lambda} D e^{\lambda a}. \quad (4.35)$$

que, despues de substituir en (4.34) y tras realizar algunos calculos, permite escribir D como:

$$D = \frac{2ik(\lambda + ik)e^{-\frac{\lambda + ik}{2}a}}{2(k^2 - \lambda^2)\sinh(\lambda a) + 4ik\lambda\cosh(\lambda a)} \quad (4.36)$$

Substituyendo este resultado en (4.35), obtenemos C :

$$C = \frac{2ik(\lambda - ik)e^{\frac{\lambda - ik}{2}a}}{2(k^2 - \lambda^2)\sinh(\lambda a) + 4ik\lambda\cosh(\lambda a)} \quad (4.37)$$

Por otra parte, usando (4.36) y (4.37) en (4.29) obtenemos F :

$$F = \frac{e^{-ika}}{\cosh(\lambda a) + i\frac{\lambda^2 - k^2}{2\lambda k}\sinh(\lambda a)} \quad (4.38)$$

A partir de (4.38) se puede obtener inmediatamente el coeficiente de transmision $T = |F|^2$:

$$T = \frac{1}{\cosh^2(\lambda a) + \frac{(\lambda^2 - k^2)^2}{4\lambda^2 k^2}\sinh^2(\lambda a)} \quad (4.39)$$

Simplifiquemos esta expresion usando en el denominador que $\cosh^2 x = 1 + \sinh^2 x$. Se tiene:

$$T = \frac{1}{1 + \frac{(\lambda^2 + k^2)^2}{4\lambda^2 k^2}\sinh^2(\lambda a)} \quad (4.40)$$

De (4.40) se sigue que el coeficiente de transmision T es no nulo y, en consecuencia, las particulas con energia menor que la barrera pueden atravesarla, algo que esta prohibido clasicamente. Este es el denominado **efecto tunel**.

Si $\lambda a \gg 1$, podemos aproximar $\sinh(\lambda a) \approx \frac{e^{\lambda a}}{2}$ y la ecuacion (4.40) se reduce a:

$$T \approx \frac{16\lambda^2 k^2}{(\lambda^2 + k^2)^2} e^{-2\lambda a} \quad (4.41)$$

En este limite $\lambda a \gg 1$, la altura de la barrera es muy alta y tenemos una supresion exponencial del efecto tunel.

5 El oscilador armonico unidimensional

En mecanica clasica un oscilador armonico es una particula que experimenta una fuerza proporcional al desplazamiento con respecto a su posicion de equilibrio x_0 , es decir tal que $F = -k(x - x_0)$, siendo k la constante recuperadora elastica, que no debe confundirse con el numero de onda de la particula, tambien denotado por k en secciones precedentes. Esta fuerza se puede deducir de un potencial cuadratico, $F = -\frac{dV}{dx}$, donde $V(x) = \frac{1}{2} k (x - x_0)^2$.

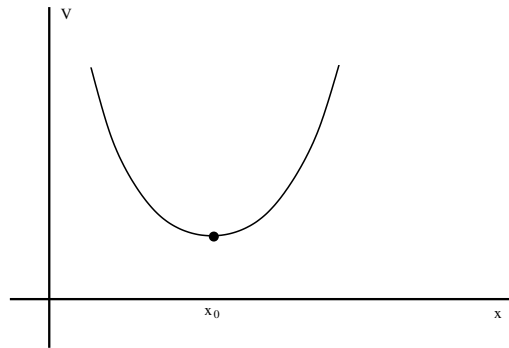


Figure 8: Todo potencial se puede representar como el potencial de un oscilador armonico cerca de un minimo de potencial x_0 .

Mas generalmente, una particula que realiza pequeñas oscilaciones en torno a un minimo de potencial puede describirse aproximadamente como un oscilador armonico. En efecto, sea $x = x_0$ el minimo de potencial de $V(x)$. En torno a $x = x_0$ podemos efectuar el siguiente desarrollo en serie de Taylor:

$$V(x) = V(x_0) + \frac{1}{2} V''(x_0) (x - x_0)^2 + \dots , \quad (5.1)$$

donde ya hemos tenido en cuenta que $x = x_0$ es un minimo de potencial y, por lo tanto, $V'(x_0) = 0$. Si el desplazamiento $x - x_0$ es pequeño podemos despreciar los terminos de orden superior en la expansion de Taylor. Ademas, el termino constante $V(x_0)$ se puede reabsorber redefiniendo el origen de la energia. Por tanto, si definimos k como:

$$k \equiv V''(x_0) , \quad (5.2)$$

podemos escribir $V(x)$ cerca de x_0 como:

$$V(x) = \frac{1}{2} k (x - x_0)^2 . \quad (5.3)$$

Observese que $k = V''(x_0) > 0$ si $x = x_0$ es un minimo de $V(x)$. Si m es la masa de la particula, la frecuencia de oscilacion en torno al punto de equilibrio es:

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} = \sqrt{\frac{V''(x_0)}{m}} . \quad (5.4)$$

Por consiguiente, el potencial puede escribirse como:

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 (x - x_0)^2 . \quad (5.5)$$

En lo que sigue redefiniremos el origen de la coordenada x de modo que el punto de equilibrio corresponda a $x_0 = 0$. El hamiltoniano del oscilador en la teoria cuantica sera entonces:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 , \quad (5.6)$$

donde X y P son respectivamente los operadores posicion y momento.

En la representacion de posicion la ecuacion de Schrödinger independiente del tiempo satisfecha por la funcion de onda $\psi(x)$ es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi(x) = E \psi(x) , \quad (5.7)$$

siendo E la energia. En lugar de resolver esta ecuacion diferencial y, a partir de las soluciones encontrar los autovalores de E , vamos a seguir un metodo algebraico que resulta ser muy util. Definamos, en primer lugar, el operador a y su hermitico conjugado a^\dagger como las siguientes combinaciones de X y P :

$$\begin{aligned} a &\equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}} P , \\ a^\dagger &\equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X - \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}} P \end{aligned}$$

A partir de la relacion canonica de conmutacion $[X, P] = i\hbar$, obtenemos:

$$[a, a^\dagger] = -\frac{i}{2\hbar} [X, P] + \frac{i}{2\hbar} [P, X] = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} . \quad (5.8)$$

Es decir:

$$\boxed{[a, a^\dagger] = 1} \quad (5.9)$$

Ademas:

$$a^\dagger a = \frac{m\omega}{2\hbar} X^2 + \frac{1}{2\hbar m\omega} P^2 + \frac{i}{2\hbar} [X, P] = \frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} . \quad (5.10)$$

Equivalentemente, podemos escribir:

$$\boxed{H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)} \quad (5.11)$$

Definamos el operador numero como:

$$\boxed{N \equiv a^\dagger a} \quad (5.12)$$

Claramente, el hamiltoniano puede ponerse en terminos de N como:

$$\boxed{H = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right)} \quad (5.13)$$

Por lo tanto diagonalizar N es equivalente a diagonalizar H . Probemos que:

$$\boxed{[N, a] = -a} \quad \boxed{[N, a^\dagger] = a^\dagger} \quad (5.14)$$

En efecto, calculemos los conmutadores usando (5.9):

$$\begin{aligned} [N, a] &= [a^\dagger a, a] = [a^\dagger, a] a = -a , \\ [N, a^\dagger] &= [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger [a, a^\dagger] = a^\dagger . \end{aligned} \quad (5.15)$$

Sea $|\nu\rangle$ un autovector de N con autovalor ν . Supongamos que $|\nu\rangle$ es normalizable, pero no necesariamente de norma unidad. Por hipotesis

$$N |\nu\rangle = \nu |\nu\rangle . \quad (5.16)$$

Probemos que $\nu \geq 0$. De hecho:

$$\|a|\nu\rangle\|^2 = \langle \nu | a^\dagger a | \nu \rangle = \langle \nu | N | \nu \rangle = \nu \langle \nu | \nu \rangle , \quad (5.17)$$

y por tanto:

$$\|a|\nu\rangle\|^2 \geq 0 \quad \implies \quad \nu \langle \nu | \nu \rangle \geq 0 \quad \implies \quad \nu \geq 0 , \quad (5.18)$$

tal como queriamos demostrar. Hay dos posibilidades:

$$\begin{aligned} \nu = 0 &\implies a|\nu\rangle = 0 , \\ \nu > 0 &\implies a|\nu\rangle \neq 0 . \end{aligned} \quad (5.19)$$

Si $a|\nu\rangle \neq 0$, entonces $a|\nu\rangle$ es un autovector de N con autovalor $\nu - 1$. En efecto, puesto que:

$$N a|\nu\rangle = \left([N, a] + aN \right) |\nu\rangle = -a|\nu\rangle + aN |\nu\rangle , \quad (5.20)$$

y si tenemos en cuenta (5.16), llegamos a:

$$\boxed{N a|\nu\rangle = (\nu - 1) a|\nu\rangle} \quad (5.21)$$

que es el resultado que queriamos probar. Asi pues, actuando con el operador a disminuimos el autovalor de N en una unidad. Partiendo de un autoestado $|\nu\rangle$ podemos construir la secuencia de estados:

$$|\nu\rangle, a|\nu\rangle, a^2|\nu\rangle, \dots, a^p|\nu\rangle, \dots, \quad (5.22)$$

que son autoestados de N con autovalores:

$$\nu, \nu - 1, \nu - 2, \dots, \nu - p, \dots \quad (5.23)$$

Para p suficientemente grande $\nu - p$ se hace negativo. La existencia de un vector no nulo con autovalor negativo del operador N esta en contradiccion con las conclusiones extraidas del analisis efectuado mas arriba. La unica posibilidad que queda es que ν sea un entero no negativo, es decir que $\nu = p$ con $p \geq 0$ entero, y que la serie termine porque $a^{p+1}|\nu\rangle = 0$. En este caso el vector $a^{p+1}|\nu\rangle = a(a^p|\nu\rangle)$ se anula debido a la primera ecuacion en (5.19) porque $a^p|\nu\rangle$ es un autovector de N con autovalor nulo cuando $\nu = p$. Asi pues, los autovalores de N son los enteros n y los correspondientes vectores propios los designaremos por $|n\rangle$:

$$\boxed{N|n\rangle = n|n\rangle, \quad n = 0, 1, 2, \dots} \quad (5.24)$$

Observemos que $a^\dagger|n\rangle$ es un autoestado de N con autovalor $n + 1$:

$$N a^\dagger|n\rangle = ([N, a^\dagger] + a^\dagger N)|n\rangle = a^\dagger|n\rangle + a^\dagger N|n\rangle = (n + 1)(a^\dagger|n\rangle). \quad (5.25)$$

De esta ultima ecuacion se sigue que los vectores:

$$|n\rangle, a^\dagger|n\rangle, (a^\dagger)^2|n\rangle, \dots, (a^\dagger)^p|n\rangle, \dots, \quad (5.26)$$

Son autovectores de N con autovalores:

$$n, n + 1, n + 2, \dots, n + p, \dots. \quad (5.27)$$

Los operadores a y a^\dagger se llaman **operadores escalera**: a es el operador de **descenso** y a^\dagger es el operador de **ascenso**. Estos operadores tambien se llaman de **aniquilacion** (a) y de **creacion** (a^\dagger). Para explicar la razon de esta terminologia observemos que los niveles de energia son:

$$\boxed{H|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots} \quad (5.28)$$

Es decir la energia E_n esta cuantizada y los cuantos de energia son $\hbar\omega$. El operador a^\dagger incrementa la energia en una cantidad $\hbar\omega$, y por tanto crea un cuanto de energia, mientras que a disminuye la energia en $\hbar\omega$, es decir destruye un cuanto de energia.

Observemos que el estado fundamental $|n = 0\rangle = |0\rangle$ tiene una energia no nula $E_0 = \hbar\omega/2$, que se denomina **energia del punto cero** del oscilador armonico. Esto

contrasta con el oscilador clasico, en el cual el estado de minima energia es aquel en el cual el oscilador esta en reposo y su energia total es nula. Observemos tambien que el estado fundamental $|0\rangle$ no debe de ser confundido con el vector nulo $|\varphi\rangle = 0$ del espacio de Hilbert \mathcal{H} . El estado fundamental $|0\rangle$ satisface la ecuacion:

$$\boxed{a|0\rangle = 0} \quad (5.29)$$

Ademas, como se sigue de la expresion de E_n en (5.28), los estados son equidistantes en energia.

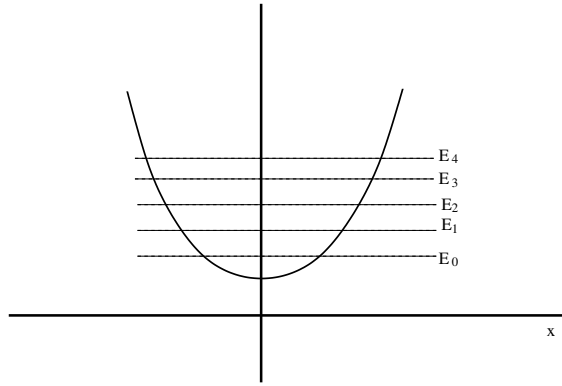


Figure 9: Niveles de energia del oscilador armonico.

Encontremos ahora mas precisamente la accion de a y a^\dagger sobre los estados $|n\rangle$. Sabemos que:

$$a|n\rangle = \alpha_n|n-1\rangle, \quad (5.30)$$

siendo α_n una constante. Multipliquemos esta ecuacion por su adjunto, es decir por $\langle n|a^\dagger = \langle n-1|\alpha_n^*$. Obtenemos:

$$\langle n|a^\dagger a|n\rangle = |\alpha_n|^2 \langle n-1|n-1\rangle = |\alpha_n|^2. \quad (5.31)$$

El primer miembro de esta ultima ecuacion es $\langle n|N|n\rangle = n\langle n|n\rangle = n$. Por lo tanto, se sigue que:

$$|\alpha_n|^2 = n. \quad (5.32)$$

Tomando $\alpha_n \in \mathbb{R}$, obtenemos:

$$\alpha_n = \sqrt{n}. \quad (5.33)$$

De forma similar:

$$a^\dagger|n\rangle = \beta_n|n+1\rangle. \quad (5.34)$$

Multiplcando por el adjunto, llegamos a:

$$\langle n|a a^\dagger|n\rangle = |\beta_n|^2 \langle n+1|n+1\rangle = |\beta_n|^2. \quad (5.35)$$

Pero $a a^\dagger = [a, a^\dagger] + a^\dagger a = 1 + N$ y, entonces:

$$\langle n | a a^\dagger | n \rangle = \langle n | (N + 1) | n \rangle = n + 1 . \quad (5.36)$$

Se sigue que $|\beta_n|^2 = n + 1$. Tomando $\beta_n \in \mathbb{R}$, obtenemos:

$$\beta_n = \sqrt{n + 1} . \quad (5.37)$$

En definitiva, la accion de los operadores de creacion y aniquilacion sobre los estados $|n\rangle$ es:

$$\boxed{a |n\rangle = \sqrt{n} |n - 1\rangle} \quad \boxed{a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n + 1} |n + 1\rangle} \quad (5.38)$$

Actuemos n veces con a^\dagger sobre el estado fundamental $|0\rangle$:

$$(a^\dagger)^n |0\rangle = (a^\dagger)^{n-1} |1\rangle = \sqrt{2} (a^\dagger)^{n-2} |2\rangle = \dots = \sqrt{n!} |n\rangle . \quad (5.39)$$

Por lo tanto:

$$\boxed{|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle} \quad (5.40)$$

Es decir, el autoestado n -esimo de la energia puede obtenerse actuando n veces con el operador de creacion sobre el estado fundamental $|0\rangle$.

Vamos a obtener ahora las funciones de onda de los estados $|n\rangle$ en la representacion de posicion. Para ello definamos la variable y como:

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad \Longrightarrow \quad x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} y . \quad (5.41)$$

El operador momento es:

$$P = -i\hbar \frac{d}{dx} = -i\sqrt{m\hbar\omega} \frac{d}{dy} . \quad (5.42)$$

Entonces, el operador de aniquilacion a es:

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} y + i \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (-i\sqrt{\hbar m\omega}) \frac{d}{dy} . \quad (5.43)$$

Simplificando esta expresion, tenemos:

$$\boxed{a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y + \frac{d}{dy} \right)} \quad (5.44)$$

De forma similar:

$$\boxed{a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y - \frac{d}{dy} \right)} \quad (5.45)$$

Obtengamos la función de onda del estado fundamental en la representación de posiciones a partir de (5.29) que, en términos de los estados $|y\rangle$, puede escribirse como:

$$0 = \langle y|a|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y + \frac{d}{dy} \right) \psi_0(y), \quad (5.46)$$

siendo $\psi_0(y) = \langle y|0\rangle$. Entonces, tenemos la siguiente ecuación diferencial de primer orden para $\psi_0(y)$:

$$\frac{1}{\psi_0} \frac{d\psi_0}{dy} = -y. \quad (5.47)$$

Esta ecuación se integra de forma inmediata, con el resultado:

$$\psi_0(y) = C e^{-\frac{y^2}{2}}, \quad (5.48)$$

siendo C una constante. En términos de la variable x , tenemos:

$$\psi_0(x) = C e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}. \quad (5.49)$$

La constante C se determina imponiendo la condición de normalización:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi_0(x)|^2 = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx \quad (5.50)$$

La integral gaussiana del segundo miembro se obtiene fácilmente:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi \hbar}}{\sqrt{m\omega}} \quad (5.51)$$

Escogiendo $C \in \mathbb{R}$, tenemos:

$$C = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}}. \quad (5.52)$$

Por lo tanto, la función de onda $\psi_0(x)$ del estado fundamental será:

$$\boxed{\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}} \quad (5.53)$$

Encontremos ahora la función de onda de cualquier estado $|n\rangle$. Para ello usaremos (5.40), que en la representación de posición toma la forma:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(y - \frac{d}{dy} \right) \right]^n \psi_0(y) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \left(y - \frac{d}{dy} \right)^n e^{-\frac{y^2}{2}}. \quad (5.54)$$

Estas funciones están relacionadas con los llamados **polinomios de Hermite** $H_n(y)$, definidos como:

$$\boxed{e^{-\frac{y^2}{2}} H_n(y) = \left(y - \frac{d}{dy} \right)^n e^{-\frac{y^2}{2}}} \quad (5.55)$$

Los primeros de estos polinomios son

$$\begin{aligned} H_0(y) &= 1, & H_1(y) &= 2y, \\ H_2(y) &= 4y^2 - 2, & H_3(y) &= 8y^3 - 12y. \end{aligned} \quad (5.56)$$

En general $H_n(y)$ es un polinomio de grado n en la variable y ($H_{2n}(y)$ es una funcion par de y , mientras que $H_{2n+1}(y)$ es una funcion impar de y). Asi pues:

$$\psi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{y^2}{2}} H_n(y). \quad (5.57)$$

En terminos de la variable x , la funcion de onda del n -esimo estado del oscilador es:

$$\boxed{\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)} \quad (5.58)$$

Por supuesto, puede obtenerse tambien este resultado (y el espectro de energia (5.28)) integrando directamente la ecuacion de Schrödinger (5.7).

6 Particula cargada en un campo electromagnetico

Consideremos una particula con carga electrica q moviendose bajo la accion de un campo electrico $\vec{E}(\vec{r}, t)$ y de un campo magnetico $\vec{B}(\vec{r}, t)$. La fuerza ejercida por los campos electromagneticos sobre la carga viene dada por la denominada formula de Lorentz:

$$\vec{F} = q \left[\vec{E}(\vec{r}, t) + \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{B}(\vec{r}, t) \right], \quad (6.1)$$

siendo $\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt}$ el vector velocidad de la particula y c la velocidad de la luz. La ecuacion clasica de movimiento de la carga es:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = q \left[\vec{E}(\vec{r}, t) + \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{B}(\vec{r}, t) \right]. \quad (6.2)$$

Los campos \vec{E} y \vec{B} satisfacen las ecuaciones de Maxwell de la electrodinamica:

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{\nabla} \times \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, & \vec{\nabla} \cdot \vec{B} &= 0, \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{E} &= \rho_e, & \vec{\nabla} \times \vec{B} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{1}{c} \vec{j}_{em} \end{aligned}}$$

En estas ecuaciones ρ_e y \vec{j}_{em} son, respectivamente, las densidades de carga y la corriente electromagnetica, que deben de satisfacer la ecuacion de continuidad:

$$\boxed{\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_{em} = 0} \quad (6.3)$$

Esta ultima ecuacion expresa la conservacion de la carga electrica. En las ecuaciones anteriores estamos utilizando el sistema de unidades de Lorentz-Heaviside (sistema CGS racionalizado), en el cual la unica constante que aparece es la velocidad de la luz.

Vamos a tratar de encontrar una funcion lagrangiana para una partícula cargada, que de lugar a la ecuacion de Lorentz (6.2) como ecuacion de movimiento. Para ello observemos que el primer par de ecuaciones de Maxwell (las que no contienen las fuentes ρ_e y \vec{j}_{em}) se pueden resolver representando \vec{E} y \vec{B} en terminos de un potencial escalar $\phi(\vec{r}, t)$ y de un potencial vector $\vec{A}(\vec{r}, t)$ en la forma:

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}, t) &= -\vec{\nabla}\phi(\vec{r}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t}, \\ \vec{B}(\vec{r}, t) &= \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}, t) \end{aligned}}$$

En efecto, la ecuacion $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$ se verifica entonces automaticamente (la divergencia de un rotacional es cero). Ademas:

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla}\phi) - \frac{1}{c} \vec{\nabla} \times \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (6.4)$$

que es una de las ecuaciones de Maxwell. Para obtener los potenciales (ϕ, \vec{A}) debemos de resolver las otras dos ecuaciones de Maxwell que no se satisfacen automaticamente.

Veamos ahora que la funcion lagrangiana que buscamos puede escribirse en terminos de los potenciales en la forma:

$$\boxed{L = \frac{1}{2} m \left(\frac{d\vec{r}}{dt} \right)^2 - q \left[\phi(\vec{r}, t) - \frac{1}{c} \frac{d\vec{r}}{dt} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) \right]} \quad (6.5)$$

En efecto, sea $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3)$. Entonces:

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m \dot{x}_i + \frac{q}{c} A_i(\vec{r}, t) \quad \Longrightarrow \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) = m \ddot{x}_i + \frac{q}{c} \frac{d}{dt} A_i(\vec{r}, t). \quad (6.6)$$

Por otra parte, como:

$$\frac{d}{dt} A_i(\vec{r}, t) = \sum_j \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \dot{x}_j + \frac{\partial A_i}{\partial t}, \quad (6.7)$$

se sigue que:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) = m \ddot{x}_i + \frac{q}{c} \sum_j \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \dot{x}_j + \frac{q}{c} \frac{\partial A_i}{\partial t} . \quad (6.8)$$

Ademas:

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} = -q \frac{\partial \phi}{\partial x_i} + \frac{q}{c} \sum_j \dot{x}_j \frac{\partial A_j}{\partial x_i} . \quad (6.9)$$

Definamos el tensor antisimetrico F_{ij} como:

$$F_{ij} = \frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j} = -F_{ji} . \quad (6.10)$$

Entonces:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial L}{\partial x_i} = m \ddot{x}_i + q \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_i} + \frac{1}{c} \frac{\partial A_i}{\partial t} \right) + \frac{q}{c} \sum_j \left(\frac{\partial A_i}{\partial x_j} - \frac{\partial A_j}{\partial x_i} \right) \dot{x}_j . \quad (6.11)$$

Por lo tanto, teniendo en cuenta la primera ecuacion de (6.4) y la definicion (6.10), la ecuacion de movimiento que se obtiene de la lagrangiana (6.5) es:

$$\boxed{m \ddot{x}_i = q E_i + \frac{q}{c} \sum_j F_{ij} \dot{x}_j} \quad (6.12)$$

La relacion entre el campo magnetico \vec{B} y el potencial vector \vec{A} es:

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = \begin{vmatrix} \vec{e}_1 & \vec{e}_2 & \vec{e}_3 \\ \frac{\partial}{\partial x_1} & \frac{\partial}{\partial x_2} & \frac{\partial}{\partial x_3} \\ A_1 & A_2 & A_3 \end{vmatrix} . \quad (6.13)$$

Explicitamente, esta relacion es:

$$\vec{B} = \left(\frac{\partial A_3}{\partial x_2} - \frac{\partial A_2}{\partial x_3} \right) \vec{e}_1 + \left(\frac{\partial A_1}{\partial x_3} - \frac{\partial A_3}{\partial x_1} \right) \vec{e}_2 + \left(\frac{\partial A_2}{\partial x_1} - \frac{\partial A_1}{\partial x_2} \right) \vec{e}_3 , \quad (6.14)$$

que, en terminos de las componentes del tensor antisimetrico F_{ij} , se convierte en:

$$B_1 = F_{23} , \quad B_2 = F_{31} , \quad B_3 = F_{12} . \quad (6.15)$$

Esta ultima ecuacion se puede escribir de forma mas compacta como:

$$B_i = \frac{1}{2} \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} F_{jk} , \quad (6.16)$$

cuya inversa es:

$$\boxed{F_{ij} = \sum_k \epsilon_{ijk} B_k} \quad (6.17)$$

Utilicemos esta ultima ecuacion para calcular el segundo termino de segundo miembro de (6.12):

$$\sum_j F_{ij} \dot{x}_j = \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} B_k \dot{x}_j = \left(\frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{B} \right)_i, \quad (6.18)$$

donde hemos utilizado que $(\vec{C} \times \vec{D})_i = \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} C_j D_k$ para cualesquiera dos vectores \vec{C} y \vec{D} . Entonces, la ecuacion de movimiento que se sigue de la lagrangiana L es:

$$m\ddot{x}_i = q E_i + \frac{q}{c} \left(\frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{B} \right)_i, \quad (6.19)$$

tal como queriamos demostrar.

6.1 Cuantizacion

Para estudiar el problema de la particula cargada acoplada un campo electromagnetico a nivel cuantico, analizemos el problema desde el punto de vista del formalismo hamiltoniano. El momento canonico conjugado a x_i es:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m \dot{x}_i + \frac{q}{c} A_i(\vec{r}, t), \quad (6.20)$$

y el hamiltoniano se obtiene haciendo una transformada de Legendre:

$$\begin{aligned} H &= \sum_i p_i \dot{x}_i - L = \sum_i \left(m \dot{x}_i + \frac{q}{c} A_i \right) \dot{x}_i - L = \\ &= \sum_i \left(m \dot{x}_i + \frac{q}{c} A_i \right) \dot{x}_i - \frac{1}{2} \sum_i m \dot{x}_i^2 + q\phi - \frac{q}{c} \sum_i \dot{x}_i A_i, \end{aligned} \quad (6.21)$$

es decir:

$$H = \frac{1}{2} m \sum_i \dot{x}_i^2 + q\phi. \quad (6.22)$$

Pero, invirtiendo la relacion (6.20), las componentes \dot{x}_i se pueden poner en terminos del momento como:

$$\dot{x}_i = \frac{1}{m} \left(p_i - \frac{q}{c} A_i \right), \quad (6.23)$$

y, por consiguiente, el primer termino de H en (6.22) puede escribirse como:

$$\frac{m}{2} \sum_i \dot{x}_i^2 = \frac{m}{2} \frac{1}{m^2} \sum_i \left(p_i - \frac{q}{c} A_i \right)^2 = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2. \quad (6.24)$$

En definitiva el hamiltoniano del sistema es:

$$\boxed{H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + q \phi(\vec{r}, t)} \quad (6.25)$$

Estudiemos ahora la version cuantica de H . Para ello convertimos x_i y p_j en los operadores posicion X_i y momento P_j e imponemos entre ellos las relaciones canonicas de conmutacion:

$$\begin{aligned} [X_i, P_j] &= i\hbar \delta_{ij} , \\ [X_i, X_j] &= [P_i, P_j] = 0 . \end{aligned} \quad (6.26)$$

Ello significa que en la representacion de posicion el operador X_i se representa simplemente por la multiplicacion por x_i y el operador momento \vec{P} por:

$$\vec{P} = -i\hbar \vec{\nabla} . \quad (6.27)$$

El hamiltoniano es pues el operador:

$$\boxed{H = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + q \phi(\vec{r}, t)} \quad (6.28)$$

y la ecuacion de Schrödinger es:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + q \phi(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}, t)} \quad (6.29)$$

Notese que $\frac{1}{m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)$ es el operador velocidad en la teoria cuantica. Observemos tambien que la ecuacion (6.29) puede ponerse como:

$$i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} q \phi \right) \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\vec{\nabla} - \frac{i}{\hbar c} q \vec{A} \right)^2 \psi . \quad (6.30)$$

Esta claro entonces que acoplar la particula cargada al campo electromagnetico es equivalente a hacer la siguiente substitution en la ecuacion de Schrödinger:

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} q \phi} \quad \boxed{\vec{\nabla} \rightarrow \vec{\nabla} - \frac{i}{\hbar c} q \vec{A}} \quad (6.31)$$

El acoplamiento generado de esta manera se denomina **acoplamiento minimo**.

Vemos pues que la ecuacion de Schrödinger depende de los potenciales ϕ y \vec{A} , a diferencia de las ecuaciones clasicas que dependen de los campos \vec{E} y \vec{B} . Sin embargo, dados \vec{E} y \vec{B} los potenciales escalar y vectorial no estan univocamente definidos pues podemos tomar como nuevos potenciales ϕ' y \vec{A}' , relacionados con ϕ y \vec{A} en la forma:

$$\begin{aligned}\phi'(\vec{r}, t) &= \phi(\vec{r}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi(\vec{r}, t)}{\partial t}, \\ \vec{A}'(\vec{r}, t) &= \vec{A}(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \chi(\vec{r}, t)\end{aligned}$$

siendo $\chi(\vec{r}, t)$ una funcion arbitraria de las coordenadas y del tiempo. En efecto, comprobemos que ϕ' y \vec{A}' dan lugar a los mismos campos electrico y magnetico que ϕ y \vec{A} :

$$\begin{aligned}\vec{E}' &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}'}{\partial t} - \vec{\nabla} \phi' = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\nabla} \chi}{\partial t} - \vec{\nabla} \phi + \frac{1}{c} \vec{\nabla} \left(\frac{\partial \chi}{\partial t} \right) = \vec{E}, \\ \vec{B}' &= \vec{\nabla} \times \vec{A}' = \vec{\nabla} \times \vec{A} + \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \chi) = \vec{B}.\end{aligned}\tag{6.32}$$

La transformacion $(\phi, \vec{A}) \rightarrow (\phi', \vec{A}')$ se denomina **transformacion de gauge**. Dado que los campos fisicos son \vec{E} y \vec{B} , la transformacion anterior debe de ser una simetria, que denominaremos **simetria gauge**. Los resultados fisicos en mecanica cuantica deben de ser invariantes bajo una transformacion de gauge. Sin embargo esto no es evidente porque la ecuacion de Schrödinger depende de los potenciales y es claro que debemos de transformar la funcion de onda para que la ecuacion quede invariante.

Sea $\psi(\vec{r}, t)$ la funcion de onda del estado $|\psi(t)\rangle$ en el gauge en el cual los potenciales son $\phi(\vec{r}, t)$ y $\vec{A}(\vec{r}, t)$. Sea $\psi'(\vec{r}, t)$ la funcion de onda del mismo estado en el gauge en el cual los potenciales son $\phi' = \phi - \frac{1}{c} \partial_t \chi$ y $\vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} \chi$. El valor medio del operador posicion no deberia depender del gauge, por tanto se debe de verificar:

$$\int d^3 \vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) \vec{r} \psi(\vec{r}, t) = \int d^3 \vec{r} [\psi'(\vec{r}, t)]^* \vec{r} \psi'(\vec{r}, t).\tag{6.33}$$

Para que esto sea verdad debemos de tener la siguiente relacion entre ψ y ψ' :

$$\psi'(\vec{r}, t) = e^{i F_\chi(\vec{r}, t)} \psi(\vec{r}, t),\tag{6.34}$$

siendo $F_\chi(\vec{r}, t)$ una funcion real de (\vec{r}, t) dependiente de $\chi(\vec{r}, t)$. El valor esperado del operador velocidad $\vec{v} = \frac{1}{m} [-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A}]$ tampoco deberia depender del gauge. En el gauge transformado este valor esperado es:

$$\langle \vec{v} \rangle_{\psi'} = \frac{1}{m} \int d^3 \vec{r} [\psi'(\vec{r}, t)]^* \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A}' \right) \psi'(\vec{r}, t)\tag{6.35}$$

Observemos que:

$$-i\hbar \vec{\nabla} \psi' = -i\hbar \vec{\nabla} [e^{i F_\chi} \psi] = e^{i F_\chi} [-i\hbar \vec{\nabla} + \hbar \vec{\nabla} F_\chi] \psi.\tag{6.36}$$

Entonces, se sigue que:

$$\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}'\right)\psi' = e^{iF\chi} \left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A} + \hbar\vec{\nabla}F_\chi - \frac{q}{c}\vec{\nabla}\chi\right)\psi. \quad (6.37)$$

Esta claro entonces que $\langle \vec{v} \rangle_{\psi'}$ no depende de χ si imponemos que

$$\hbar\vec{\nabla}F_\chi - \frac{q}{c}\vec{\nabla}\chi = \hbar\vec{\nabla}\left(F_\chi - \frac{q}{\hbar c}\chi\right) = 0. \quad (6.38)$$

Esto se consigue tomando

$$F_\chi(\vec{r}, t) = \frac{q}{\hbar c}\chi(\vec{r}, t) + \varphi(t). \quad (6.39)$$

Escogiendo convenientemente la fase global de ψ podemos tomar $\varphi(t) = 0$. Entonces la funcion de onda se transforma como:

$$\boxed{\psi'(\vec{r}, t) = e^{i\frac{q}{\hbar c}\chi(\vec{r}, t)}\psi(\vec{r}, t)} \quad (6.40)$$

Veamos que, en efecto, la ecuacion de Schrödinger (6.29) es invariante gauge. Acabamos de probar que:

$$\boxed{\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}'\right)\psi' = e^{i\frac{q}{\hbar c}\chi} \left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)\psi} \quad (6.41)$$

Iteremos una segunda vez esta transformacion. Para ello definamos:

$$\Lambda \equiv \left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)\psi. \quad (6.42)$$

Se sigue de (6.41) que Λ se transforma como ψ en (6.40) bajo una transformacion de gauge. Ademas, se tiene:

$$\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}'\right)^2\psi' = \left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}'\right)e^{i\frac{q}{\hbar c}\chi}\Lambda = e^{i\frac{q}{\hbar c}\chi} \left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)\Lambda, \quad (6.43)$$

donde, en el primer paso hemos utilizado (6.41) y, para probar la segunda igualdad hemos aplicado de nuevo (6.41) cambiando ψ por Λ . Tendiendo en cuenta la definicion de Λ , obtenemos:

$$\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}'\right)^2\psi' = e^{i\frac{q}{\hbar c}\chi} \left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)^2\psi. \quad (6.44)$$

Observemos que esta es la ley de transformacion del segundo miembro de la ecuacion de Schrödinger (6.29) una vez que se pasa el potencial escalar ϕ al primer miembro y se escribe como en (6.30). Ademas:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} + i\frac{q}{\hbar}\phi'\right)\psi' &= \left(\frac{\partial}{\partial t} + i\frac{q}{\hbar}\phi - \frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\partial_t\chi\right)\left(e^{i\frac{q}{\hbar c}\chi}\psi\right) = \\ &= e^{i\frac{q}{\hbar c}\chi} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{iq}{\hbar c}\partial_t\chi + i\frac{q}{\hbar}\phi - \frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\partial_t\chi\right)\psi. \end{aligned} \quad (6.45)$$

Los terminos del segundo miembro de esta ecuacion que contienen $\partial_t \chi$ se cancelan y por lo tanto podemos escribir:

$$\boxed{\left(\frac{\partial}{\partial t} + i\frac{q}{\hbar}\phi'\right)\psi' = e^{i\frac{q}{\hbar c}\chi}\left(\frac{\partial}{\partial t} + i\frac{q}{\hbar}\phi\right)\psi} \quad (6.46)$$

Esta ecuacion, junto con (6.44), implican que la ecuacion de Schrödinger es invariante gauge. Observemos que si definimos las llamadas **derivadas covariantes gauge** D_t y D_i como:

$$\boxed{D_t \equiv \frac{\partial}{\partial t} + i\frac{q}{\hbar}\phi} \quad \boxed{D_i \equiv \frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{i}{\hbar} \frac{q}{c} A_i} \quad (6.47)$$

hemos demostrado que:

$$(D_t \psi)' = e^{i\frac{q}{\hbar c}\chi} (D_t \psi), \quad (D_i \psi)' = e^{i\frac{q}{\hbar c}\chi} (D_i \psi), \quad (6.48)$$

es decir que $D_t \psi$ y $D_i \psi$ se transforman igual que ψ bajo una transformacion de gauge.

7 Efecto Aharonov-Bohm

En electrodinamica clasica los potenciales escalar y vector se introducen como una herramienta matematica para poder representar los campos electrico y magnetico. Solo los campos \vec{E} y \vec{B} tienen significado fisico pues son los unicos que aparecen en las ecuaciones de Maxwell y en la expresion de la fuerza de Lorentz. Como vamos a ver, en mecanica cuantica la situacion es muy diferente.

Consideremos un solenoide infinito extendido en la direccion perpendicular al plano de la figura 10. El solenoide crea un campo magnetico en su interior, mientras que el campo \vec{B} es nulo en su exterior. Claramente, una partícula clasica que se mueva en el plano xy en el exterior del solenoide no se vera afectada por el campo de este. Observemos, sin embargo que no es posible tomar el potencial vector $\vec{A} = 0$ en toda la region exterior del solenoide. En efecto, sea C un camino exterior al solenoide que rodea a este en el sentido contrario a las agujas del reloj, tal como se muestra en la figura 10. Calculemos la integral de linea de \vec{A} a lo largo de C y apliquemos el teorema de Stokes:

$$\oint_C \vec{A} \cdot d\vec{r} = \iint_D (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \cdot d\vec{s} = \iint_D \vec{B} \cdot d\vec{s} = \phi_D \neq 0, \quad (7.1)$$

siendo D la region encerrada por la curva C ($\partial D = C$) y ϕ_D el flujo del campo magnetico que atraviesa la superficie D . Es evidente que $\phi_D \neq 0$ y, por consiguiente, no es posible tomar $\vec{A} = 0$ en todo el exterior del solenoide. Podriamos intentar tomar $\vec{A} = \vec{\nabla} \chi$ para alguna funcion univaluada χ en toda la region exterior. Para

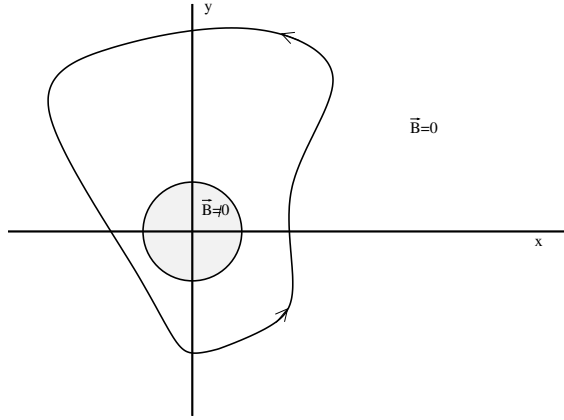


Figure 10: Un solenoide infinito perpendicular al plano de la figura genera un campo magnetico $\vec{B} = (0, 0, B) \neq 0$ confinado a una region acotada del plano xy en torno al origen de coordenadas. Esta region puede ser rodeada por un camino en el plano que esta totalmente contenido en su exterior, donde $\vec{B} = 0$.

este potencial vector el campo magnetico es nulo (el rotacional de un gradiente es cero). Sin embargo, tambien la integral $\oint_C \vec{A} \cdot d\vec{r}$ seria nula al tratarse de una curva cerrada:

$$\oint_C \vec{A} \cdot d\vec{r} = \oint_C \vec{\nabla}\chi \cdot d\vec{r} = \chi \Big|_{\text{punto inicial de } C}^{\text{punto final de } C} = 0 . \quad (7.2)$$

El problema reside en que la region con $\vec{B} = 0$ (exterior al solenoide) no es simplemente conexa y no se pueden definir \vec{A} y χ globalmente. La solucion consiste en definir χ de forma distinta en dos regiones exteriores al solenoide. Por ejemplo:

$$\chi(\vec{r}) = \begin{cases} \chi_+(\vec{r}), & \text{si } y > 0 , \\ \chi_-(\vec{r}), & \text{si } y < 0 . \end{cases} \quad (7.3)$$

Ahora podemos calcular $\oint_C \vec{A} \cdot d\vec{r}$ dividiendo la curva C en dos porciones C_+ y C_- :

$$C = C_+ \cup C_- . \quad (7.4)$$

Tal como se muestra en la figura 11, el tramo C_+ (C_-) esta contenido en la region $y > 0$ ($y < 0$). Entonces, se tiene:

$$\begin{aligned} \phi_D &= \oint_C \vec{A} \cdot d\vec{r} = \int_{C_-} \vec{\nabla}\chi \cdot d\vec{r} + \int_{C_+} \vec{\nabla}\chi \cdot d\vec{r} = \\ &= \chi_-(b) - \chi_-(a) + \chi_+(a) - \chi_+(b) . \end{aligned} \quad (7.5)$$

Observemos que las funciones χ_{\pm} estan definidas salvo una constante, que se puede ajustar de modo que $\chi_+(a) = \chi_-(a)$, es decir de forma que las funciones χ_+

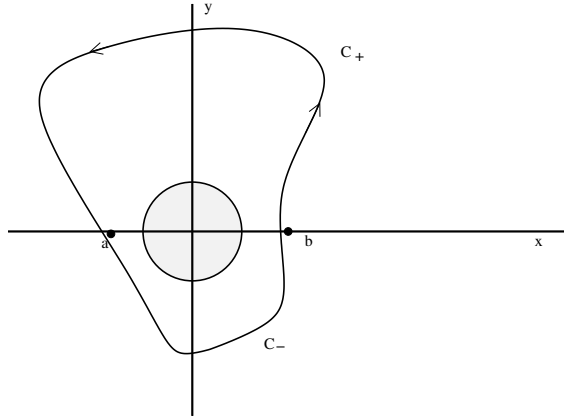


Figure 11: El camino C que rodea al solenoide se puede dividir en dos tramos C_+ y C_- contenidos respectivamente en las regiones $y > 0$ e $y < 0$.

y χ_- coincidan en el punto a . Entonces, el flujo magnetico del solenoide a traves del plano es:

$$\boxed{\phi_D = \chi_-(b) - \chi_+(b)} \quad (7.6)$$

Consideremos ahora el problema a nivel cuantico. Un potencial vector de la forma $\vec{A} = \vec{\nabla}\chi$ se puede generar haciendo una transformacion gauge con una funcion $\chi(\vec{r})$ al campo $\vec{A} = 0$. Como sabemos esto cambia la solucion de la ecuacion de Schrödinger en la forma:

$$\psi = \psi^{(0)} e^{\frac{iq}{\hbar c} \chi} , \quad (7.7)$$

siendo $\psi^{(0)}$ la funcion de onda con potencial vector nulo.

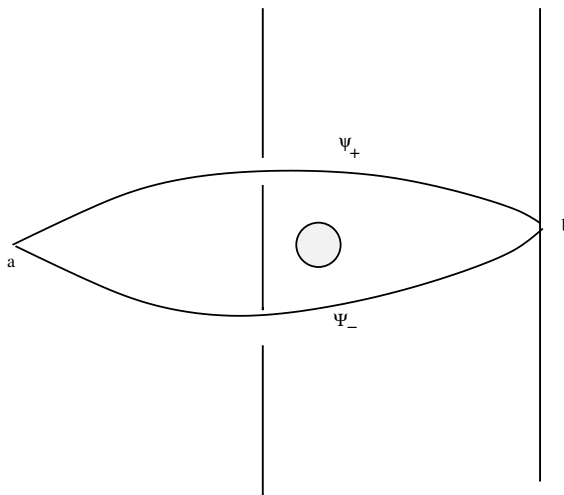


Figure 12: El experimento de la doble rendija con un solenoide entre las rendijas y la pantalla.

Supongamos que hacemos el experimento de la doble rendija con un solenoide detras de las rendijas y antes de la pantalla, tal como se ilustra en la figura 12. Sea el punto a la fuente de nuestras particulas cargadas (electrones) y b el punto de la pantalla donde observamos la interferencia. Supongamos que ψ_{\pm} sean las funciones de onda de los electrones que pasan por cada una de las dos rendijas y que ψ_{\pm} son cero (o muy pequeñas) en el interior del solenoide. Claramente en el punto b la funcion de onda de las particulas que pasan por cada una de las rendijas es:

$$\psi_+(b) = \psi_+^{(0)}(b) e^{\frac{iq}{\hbar c} \chi_+(b)}, \quad \psi_-(b) = \psi_-^{(0)}(b) e^{\frac{iq}{\hbar c} \chi_-(b)}. \quad (7.8)$$

La funcion de onda total en el punto b es una superposicion:

$$\begin{aligned} \psi(b) &= \psi_+^{(0)}(b) e^{\frac{iq}{\hbar c} \chi_+(b)} + \psi_-^{(0)}(b) e^{\frac{iq}{\hbar c} \chi_-(b)} = \\ &= e^{\frac{iq}{\hbar c} \chi_+(b)} \left[\psi_+^{(0)}(b) + e^{\frac{iq}{\hbar c} (\chi_-(b) - \chi_+(b))} \psi_-^{(0)}(b) \right] = \\ &= e^{\frac{iq}{\hbar c} \chi_+(b)} \left[\psi_+^{(0)}(b) + e^{\frac{iq}{\hbar c} \phi_D} \psi_-^{(0)}(b) \right]. \end{aligned} \quad (7.9)$$

La intensidad en la pantalla en el punto b es:

$$\boxed{|\psi(b)|^2 = |\psi_+^{(0)}(b) + e^{\frac{iq}{\hbar c} \phi_D} \psi_-^{(0)}(b)|^2} \quad (7.10)$$

Notemos ahora que hay una diferencia de fase adicional δ entre los dos caminos igual a:

$$\boxed{\delta = \frac{q \phi_D}{\hbar c}} \quad (7.11)$$

Esta diferencia de fase depende del flujo del campo magnetico $\phi_D = \iint_D \vec{B} \cdot d\vec{s}$ y hace que cambie la figura de interferencia cambiando el campo magnetico del solenoide. Este efecto se denomina **efecto Aharonov-Bohm**. Notemos que:

- El desfase no depende de los caminos concretos puesto que el flujo ϕ_D es el mismo siempre que rodeemos al solenoide.
- El desfase es invariante gauge porque depende de una integral del campo magnetico \vec{B} .
- La figura de interferencia depende del flujo en el cilindro del solenoide, aunque las particulas nunca pasan a traves de la region en la que \vec{B} es no nulo. Sin embargo la existencia del solenoide cambia la topologia de la region en donde $\vec{B} = 0$ (ya no es simplemente conexa) y la mecanica cuantica es sensible al cambio de la topologia.

Todo lo anterior implica que en mecanica cuantica los potenciales son mas que meros artificios matematicos para representar los campos \vec{E} y \vec{B} y deben de considerarse como campos con significado fisico, aunque altamente redundantes debido a la invariancia gauge.

8 Particula cargada en un campo magnetico

Consideremos una particula de carga q moviendose bajo la accion de un campo magnetico constante \vec{B} , que supondremos que esta dirigido a lo largo del eje z :

$$\vec{B} = B \vec{e}_z = (0, 0, B) . \quad (8.1)$$

Estudiemos, en primer lugar, el problema a nivel clasico. La fuerza \vec{F} que actua sobre la particula es la fuerza de Lorentz:

$$\vec{F} = \frac{q}{c} (\vec{v} \times \vec{B}) = \frac{q}{c} \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ v_x & v_y & v_z \\ 0 & 0 & B \end{vmatrix} = \frac{qB}{c} (v_y, -v_x, 0) . \quad (8.2)$$

Las ecuaciones clasicas del movimiento son:

$$m \ddot{x} = \frac{qB}{c} \dot{y} , \quad m \ddot{y} = -\frac{qB}{c} \dot{x} , \quad m \ddot{z} = 0 . \quad (8.3)$$

El movimiento en la direccion del eje z es el que corresponden a una particula libre y su ecuacion se integra trivialmente. Concentremonos pues en el movimiento en el plano xy . Sea ω la denominada **frecuencia de Larmor**, definida como:

$$\boxed{\omega = \frac{qB}{mc}} \quad (8.4)$$

Entonces, las ecuaciones para x e y son:

$$\ddot{x} = \omega \dot{y} , \quad \ddot{y} = -\omega \dot{x} . \quad (8.5)$$

Para resolver este sistema de ecuaciones introduzcamos la variable compleja z del plano (x, y) :

$$Z = x + iy . \quad (8.6)$$

Entonces las dos ecuaciones anteriores se reducen a una unica ecuacion compleja:

$$\ddot{Z} = \ddot{x} + i \ddot{y} = \omega (\dot{y} - i \dot{x}) = -i\omega (\dot{x} + i \dot{y}) , \quad (8.7)$$

o, de forma equivalente:

$$\boxed{\ddot{Z} + i\omega \dot{Z} = 0} \quad (8.8)$$

La solucion general de este ecuacion es:

$$Z = Z_0 + d e^{-i\omega t} , \quad (8.9)$$

siendo Z_0 y d dos constantes de integracion complejas. Verifiquemos que (8.9) es solucion de (8.8) calculando las derivadas de $Z(t)$:

$$i\omega \dot{Z} = i\omega(-di\omega e^{-i\omega t}) = d\omega^2 e^{-i\omega t} = -\ddot{Z} . \quad (8.10)$$

Pongamos ahora $Z_0 = x_0 + iy_0$ y $d = \rho e^{-i\varphi}$ con $x_0, y_0, \rho, \varphi \in \mathbb{R}$. En estas variables reales la solucion (8.9) se puede escribir en la forma:

$$\boxed{x = x_0 + \rho \cos(\omega t + \varphi)} \quad \boxed{y = y_0 - \rho \sen(\omega t + \varphi)} \quad (8.11)$$

Observemos que la trayectoria (8.11) verifica la ecuacion:

$$(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 = \rho^2 , \quad (8.12)$$

que corresponde a una circunferencia en el plano xy con centro en el punto (x_0, y_0) y radio ρ . La velocidad a la que se recorre esta circunferencia es:

$$\vec{v} = (v_x, v_y) = -\rho\omega (\sen(\omega t + \varphi), \cos(\omega t + \varphi)) \quad (8.13)$$

Por lo tanto, el modulo v de la velocidad es

$$v = \rho\omega , \quad (8.14)$$

siendo $\omega = qB/mc$ la velocidad angular con la que se recorre la circunferencia.

Estudiemos ahora el sistema a nivel cuantico. Si \vec{A} es el potencial vector, el hamiltoniano del sistema es:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{P} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 . \quad (8.15)$$

Si el campo magnetico \vec{B} es constante, siempre se puede escoger el siguiente potencial vector:

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r} . \quad (8.16)$$

Comprobemoslo en el caso de que $\vec{B} = (0, 0, B)$. El potencial en este caso seria:

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ 0 & 0 & B \\ x & y & z \end{vmatrix} = \frac{1}{2} (-By, Bx, 0) , \quad (8.17)$$

cuyo rotacional es:

$$\vec{\nabla} \times \vec{A} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ -By & Bx & 0 \end{vmatrix} = \frac{1}{2} (0, 0, \partial_x(Bx) + \partial_y(By)) = (0, 0, B) , \quad (8.18)$$

tal como queriamos demostrar. Utilizando este potencial vector, el hamiltoniano sera:

$$H = \frac{1}{2m} \left(P_x + \frac{qB}{2c} y \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(P_y - \frac{qB}{2c} x \right)^2 + \frac{P_z^2}{2m}, \quad (8.19)$$

donde P_x , P_y y P_z son los momentos canonicos conjugados a $\vec{r} = (x, y, z)$, que pueden representarse como $\vec{P} = -i\hbar\vec{\nabla}$. La parte no trivial del hamiltoniano (8.19) es la que corresponde al plano xy . Concentremonos en ella y definamos los operadores:

$$\boxed{\Pi_x = P_x + \frac{qB}{2c} y}, \quad \boxed{\Pi_y = P_y - \frac{qB}{2c} x} \quad (8.20)$$

Los operadores Π_x y Π_y se denominan **momentos dinamicos**. En terminos de la frecuencia de Larmor pueden escribirse como:

$$\Pi_x = P_x + \frac{m\omega}{2} y, \quad \Pi_y = P_y - \frac{m\omega}{2} x. \quad (8.21)$$

Calculemos el conmutador $[\Pi_x, \Pi_y]$ usando la relacion canonica de conmutacion $[x_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}$:

$$\begin{aligned} [\Pi_x, \Pi_y] &= \left[P_x + \frac{qB}{2c} y, P_y - \frac{qB}{2c} x \right] = [P_x, -\frac{qB}{2c} x] + \left[\frac{qB}{2c} y, P_y \right] = \\ &= \frac{qB}{2c} i\hbar + \frac{qB}{2c} i\hbar. \end{aligned} \quad (8.22)$$

Es decir:

$$\boxed{[\Pi_x, \Pi_y] = i\hbar \frac{qB}{c} = i\hbar m\omega} \quad (8.23)$$

Definamos ahora los operadores \mathcal{P} y \mathcal{Q} como:

$$\mathcal{P} \equiv \Pi_x, \quad \mathcal{Q} \equiv -\frac{c}{qB} \Pi_y. \quad (8.24)$$

Entonces, el conmutador de estos dos operadores es:

$$[\mathcal{Q}, \mathcal{P}] = -\frac{c}{qB} [\Pi_y, \Pi_x]. \quad (8.25)$$

Utilizando el resultado (8.23), obtenemos:

$$\boxed{[\mathcal{Q}, \mathcal{P}] = i\hbar} \quad (8.26)$$

Es decir, \mathcal{Q} y \mathcal{P} satisfacen las relaciones canonicas de conmutacion de una coordenada y su momento conjugado. Expresemos el hamiltoniano en terminos de \mathcal{Q} y \mathcal{P} :

$$H = \frac{\mathcal{P}^2}{2m} + \frac{1}{2m} \left[-\frac{qB}{c} \right]^2 \mathcal{Q}^2 + \frac{P_z^2}{2m}. \quad (8.27)$$

El termino con Q^2 de esta ultima expresion se puede escribir como:

$$\frac{1}{2m} \left[-\frac{qB}{c} \right]^2 Q^2 = \frac{1}{2} m \left[\frac{qB}{mc} \right]^2 Q^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 Q^2, \quad (8.28)$$

siendo ω la misma frecuencia de Larmor (8.4) que aparece en el problema clasico. Asi pues, tenemos:

$$H = \frac{\mathcal{P}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 Q^2 + \frac{P_z^2}{2m} \quad (8.29)$$

El operador H es la suma de un hamiltoniano de un oscilador armonico de frecuencia ω y de una particula libre de momento P_z . Los niveles de energia son pues:

$$E_{n,k_z} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}, \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (8.30)$$

En (8.30) k_z es el vector de onda de una onda plana en la direccion del eje z . Los niveles de energia (8.30) se denominan **niveles de Landau**. Se representan graficamente en la figura 13.

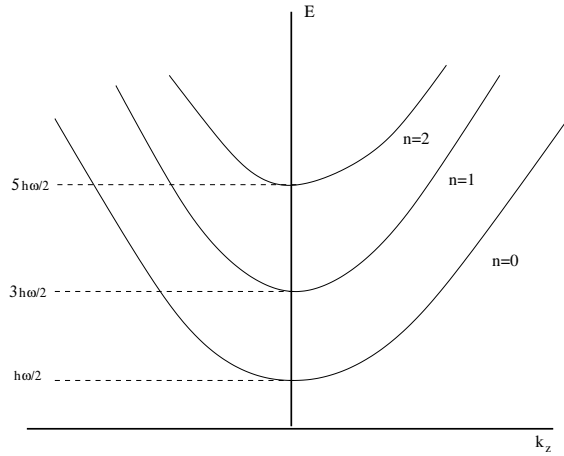


Figure 13: Los niveles de energia de Landau.

Consideremos ahora las componentes del vector velocidad en el plano xy , definidas como:

$$\dot{x} = \frac{i}{\hbar} [H, x], \quad \dot{y} = \frac{i}{\hbar} [H, y]. \quad (8.31)$$

Calculemos \dot{x} utilizando el hamiltoniano (8.19) escrito en terminos de Π_x y Π_y . Teniendo en cuenta que $[x, \Pi_y] = 0$, obtenemos:

$$\dot{x} = \frac{i}{\hbar} \left[\frac{\Pi_x^2}{2m}, x \right] = \frac{i}{\hbar} 2 \frac{\Pi_x}{2m} [\Pi_x, x] = \frac{i}{\hbar} (-i\hbar) \frac{\Pi_x}{m}. \quad (8.32)$$

Es decir:

$$\dot{x} = \frac{\Pi_x}{m} \quad (8.33)$$

De forma similar, se demuestra que:

$$\boxed{\dot{y} = \frac{\Pi_y}{m}} \quad (8.34)$$

Utilicemos estas ultimas expresiones para obtener el conmutador entre \dot{x} y \dot{y} :

$$[\dot{x}, \dot{y}] = \frac{1}{m^2} [\Pi_x, \Pi_y] = \frac{1}{m^2} i\hbar \frac{qB}{c} = \frac{i\hbar}{m} \frac{qB}{mc}, \quad (8.35)$$

que se puede escribir como:

$$\boxed{[\dot{x}, \dot{y}] = \frac{i\hbar\omega}{m}} \quad (8.36)$$

Observemos que la parte del hamiltoniano que depende del plano xy es:

$$H_{xy} = \frac{\Pi_x^2}{2m} + \frac{\Pi_y^2}{2m} = \frac{1}{2m} m^2 (\dot{x}^2 + \dot{y}^2), \quad (8.37)$$

o, equivalentemente:

$$\boxed{H_{xy} = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2)} \quad (8.38)$$

Utilizando (8.11), el radio ρ de la trayectoria circular clasica se puede expresar en terminos de \dot{x} y \dot{y} como:

$$\rho^2 = \frac{1}{\omega^2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2). \quad (8.39)$$

En la teoria cuantica definimos el operador R^2 como:

$$\boxed{R^2 \equiv \frac{1}{\omega^2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2)} \quad (8.40)$$

Este operador representa el “radio” cuantico de la trayectoria. Observemos que R^2 esta relacionado con H_{xy} en la forma:

$$\boxed{R^2 = \frac{2H_{xy}}{m\omega^2}} \quad (8.41)$$

Claramente R^2 esta cuantizado. Su valor en el nivel de Landau n -esimo es:

$$\langle R^2 \rangle_n = \frac{2}{m\omega^2} \langle n | H_{xy} | n \rangle = \frac{2}{m\omega^2} \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (8.42)$$

Es decir:

$$\boxed{\langle R^2 \rangle_n = \frac{2\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)} \quad n = 0, 1, \dots \quad (8.43)$$

Definamos ahora la **longitud magnetica** l_B como:

$$\boxed{l_B = \sqrt{\frac{\hbar c}{q B}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}} \quad (8.44)$$

Entonces, la ley de cuantizacion del radio de la orbita es:

$$\boxed{\langle R^2 \rangle_n = l_B^2 (1 + 2n)} \quad n = 0, 1, \dots \quad (8.45)$$

El radio (8.45) crece linealmente con el entero de cuantizacion n . En el nivel de Landau mas bajo $\langle R^2 \rangle_{n=0} = l_B^2$. Entonces l_B se puede interpretar como el radio cuantico de la orbita circular mas pequeña.

El flujo del campo magnetico a traves de la orbita correspondiente al nivel n -esimo de Landau es:

$$\phi = \pi \langle R^2 \rangle_n B = \frac{2\pi\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) B, \quad (8.46)$$

que constituye una regla de cuantizacion del flujo magnetico. Como $2\pi\hbar = h$ y $\frac{B}{m\omega} = B \frac{c}{qB} = \frac{c}{q}$, dicha ley de cuantizacion del flujo puede escribirse como:

$$\boxed{\phi = \frac{hc}{q} \left(n + \frac{1}{2} \right)} \quad n = 0, 1, \dots \quad (8.47)$$

De esta ecuacion se sigue que el cuanto elemental de flujo es:

$$\boxed{\phi_0 = \frac{hc}{q}} \quad (8.48)$$

Observemos que:

$$\phi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{q} = 2\pi \frac{\hbar c}{qB} B, \quad (8.49)$$

que, teniendo en cuenta la definicion de la longitud magnetica l_B en (8.44), equivale a:

$$\boxed{\phi_0 = 2\pi l_B^2 B} \quad (8.50)$$

Es decir el cuanto de flujo ϕ_0 es el flujo a traves de la orbita circular mas pequeña.

Recordemos que la trayectoria clasica de la particula es:

$$x = x_0 + \rho \cos(\omega t + \varphi), \quad y = y_0 - \rho \sin(\omega t + \varphi). \quad (8.51)$$

Las componentes de la velocidad en el plano xy son:

$$\dot{x} = -\rho\omega \sin(\omega t + \varphi), \quad \dot{y} = -\rho\omega \cos(\omega t + \varphi). \quad (8.52)$$

Las coordenadas (x_0, y_0) del centro de la orbita (llamada **centro de guia**) pueden ponerse en terminos de x, y, \dot{x} e \dot{y} . En efecto, puede comprobarse facilmente de las ecuaciones escritas mas arriba que:

$$x_0 = x + \frac{\dot{y}}{\omega}, \quad y_0 = y - \frac{\dot{x}}{\omega}. \quad (8.53)$$

En la teoria cuantica sustituimos en la expresion anterior \dot{x} y \dot{y} por sus valores en terminos de los operadores Π_x y Π_y , vease (8.33) y (8.34), y definimos los operadores x_0 e y_0 como:

$$x_0 = x + \frac{\Pi_y}{m\omega}, \quad y_0 = y - \frac{\Pi_x}{m\omega}. \quad (8.54)$$

Utilizando en (8.54) la relacion (8.20) entre el momento y el momento dinamico, obtenemos:

$$\boxed{x_0 = \frac{x}{2} + \frac{P_y}{m\omega}} \quad \boxed{y_0 = \frac{y}{2} - \frac{P_x}{m\omega}} \quad (8.55)$$

Observemos que x_0 e y_0 no conmutan:

$$[x_0, y_0] = -\frac{1}{2m\omega} [x, P_x] + \frac{1}{2m\omega} [P_y, y], \quad (8.56)$$

es decir:

$$\boxed{[x_0, y_0] = -\frac{i\hbar}{m\omega}} \quad (8.57)$$

Definamos tambien el operador R_0 , que corresponde a la coordenada radial del centro de la orbita:

$$\boxed{R_0^2 = (x_0)^2 + (y_0)^2} \quad (8.58)$$

Vamos a ver que R_0 esta cuantizado y vamos a obtener sus autovalores. Para ello definamos los operadores:

$$\boxed{\mathcal{Q}_0 \equiv y_0} \quad \boxed{\mathcal{P}_0 \equiv m\omega x_0} \quad (8.59)$$

Claramente se tiene:

$$[\mathcal{Q}_0, \mathcal{P}_0] = m\omega [y_0, x_0] = m\omega \frac{i\hbar}{m\omega}, \quad (8.60)$$

que implica que \mathcal{Q}_0 y \mathcal{P}_0 tienen la relacion de conmutacion canonica entre coordenada y momento:

$$\boxed{[\mathcal{Q}_0, \mathcal{P}_0] = i\hbar} \quad (8.61)$$

Ademas se tiene:

$$\begin{aligned}
[\mathcal{Q}_0, \Pi_x] &= [y_0, \Pi_x] = \left[\frac{y}{2} - \frac{P_x}{m\omega}, P_x + \frac{m\omega}{2} y \right] = 0, \\
[\mathcal{Q}_0, \Pi_y] &= \left[\frac{y}{2} - \frac{P_x}{m\omega}, P_y - \frac{m\omega}{2} x \right] = \frac{1}{2}[y, P_y] + \frac{1}{2}[P_x, x] = 0, \\
[\mathcal{P}_0, \Pi_x] &= m\omega \left[\frac{x}{2} + \frac{P_y}{m\omega}, P_x + \frac{m\omega}{2} y \right] = m\omega \left(\frac{1}{2}[x, P_x] + \frac{1}{2}[P_y, y] \right) = 0, \\
[\mathcal{P}_0, \Pi_y] &= m\omega \left[\frac{x}{2} + \frac{P_y}{m\omega}, P_y - \frac{m\omega}{2} x \right] = 0.
\end{aligned} \tag{8.62}$$

Es decir:

$$\boxed{[\mathcal{Q}_0, \Pi_x] = [\mathcal{Q}_0, \Pi_y] = [\mathcal{P}_0, \Pi_x] = [\mathcal{P}_0, \Pi_y] = 0} \tag{8.63}$$

Esto implica que \mathcal{Q}_0 y \mathcal{P}_0 conmutan con H_{xy} . Por otra parte R_0^2 esta relacionado con \mathcal{Q}_0 y \mathcal{P}_0 en la forma:

$$R_0^2 = \mathcal{Q}_0^2 + \frac{1}{m^2\omega^2} \mathcal{P}_0^2, \tag{8.64}$$

y, en consecuencia, R_0^2 y H_{xy} conmutan, lo cual implica que estos dos operadores se pueden diagonalizar simultaneamente. Para encontrar los autovalores de R_0^2 escribamoslo como:

$$R_0^2 = \frac{2}{m\omega^2} \left[\frac{\mathcal{P}_0^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \mathcal{Q}_0^2 \right], \tag{8.65}$$

Entonces, si definimos H_0 como:

$$H_0 = \frac{\mathcal{P}_0^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \mathcal{Q}_0^2, \tag{8.66}$$

y tenemos en cuenta la relacion de conmutacion (8.61) entre \mathcal{Q}_0 y \mathcal{P}_0 , concluimos que H_0 es el hamiltoniano de un oscilador armonico cuantico de frecuencia ω , cuyos autovalores son $\hbar\omega(p + \frac{1}{2})$ para $p = 0, 1, 2, \dots$. El operador R_0^2 es proporcional a H_0 :

$$R_0^2 = \frac{2}{m\omega^2} H_0. \tag{8.67}$$

Por tanto, si r_0^2 denotan los autovalores de R_0^2 , entonces se sigue que la coordenada radial del centro de las orbitas esta cuantizada como:

$$\boxed{r_0^2 = \frac{2\hbar}{m\omega} \left(p + \frac{1}{2} \right)} \quad p = 0, 1, 2, \dots \tag{8.68}$$

Hemos pues reducido el problema de una partícula cargada en un campo magnetico al de dos osciladores armonicos desacoplados. El primero de ellos nos da el entero n del nivel de Landau, que determina la energia y el radio de la orbita. El segundo oscilador armonico nos da la posicion del centro de la orbita y determina

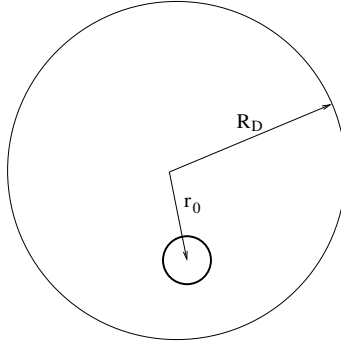


Figure 14: Si el sistema esta contenido en un disco de radio R_D , las orbitas contenidas en el deben de tener un radio $r_0 \leq R_D$.

la degeneracion de los niveles de Landau. Esta degeneracion es el numero de puntos en donde podemos centrar las orbitas, es decir el numero de orbitas posibles. Para determinarla supongamos que nuestro sistema es un disco de radio R_D , tal como se muestra en la figura 14. Las orbitas que caben en el disco son aquellas en las cuales su coordenada radial r_0 es menor o igual que R_D , es decir tales que:

$$r_0^2 \leq R_D^2 . \quad (8.69)$$

Substituyendo los valores posibles de r_0^2 , obtenemos:

$$\frac{2\hbar}{m\omega} \left(p + \frac{1}{2} \right) \leq R_D^2 \quad \Longrightarrow \quad p \leq \frac{m\omega}{2\hbar} R_D^2 - \frac{1}{2} = \frac{R_D^2}{2l_B^2} - \frac{1}{2} . \quad (8.70)$$

Supondremos que $R_D \gg l_B$, con lo cual podemos despreciar el $1/2$ en de la ecuacion anterior y esta ultima se reduce a:

$$p \leq \frac{R_D^2}{2l_B^2} . \quad (8.71)$$

La degeneracion g es pues el p maximo, es decir:

$$g = \frac{R_D^2}{2l_B^2} = \frac{\pi R_D^2}{2\pi l_B^2} . \quad (8.72)$$

Sea $S = \pi R_D^2$ el area del circulo. Entonces, g puede escribirse como:

$$\boxed{g = \frac{S}{2\pi l_B^2}} \quad (8.73)$$

Por otra parte, el flujo del campo magnetico a traves del disco es:

$$\phi = B S . \quad (8.74)$$

En terminos de ϕ la degeneracion g puede ponerse como:

$$g = \frac{S B}{2\pi l_B^2 B} = \frac{\phi}{2\pi l_B^2 B}. \quad (8.75)$$

Teniendo en cuenta que $2\pi l_B^2 B = \phi_0$ es el cuanto elemental de flujo, podemos escribir la degeneracion g en la forma:

$$g = \frac{\phi}{\phi_0} \quad (8.76)$$

La imagen fisica que obtenemos como resultado de este analisis es la siguiente. El plano xy transverso al campo magnetico B se puede pensar que esta dividido en celdas distintas de area $2\pi l_B^2$, en las cuales el centro de guia se puede localizar. Estas celdas estan atravesadas por un cuanto elemental de flujo ϕ_0 . Los electrones se comportan como si hubiesen adquirido un tamaño $2\pi l_B^2$ bajo la accion del campo magnetico. Este comportamiento se representa en la figura 15.

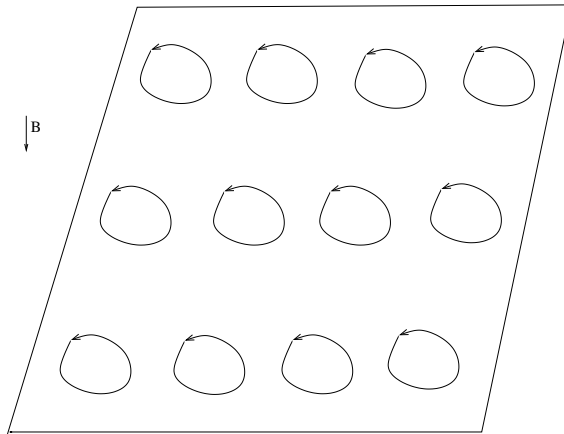


Figure 15: El plano transversal al campo magnetico puede visualizarse como dividido en pequeñas celdillas circulares correspondientes a orbitas de radio l_B , atravesadas por un cuanto elemental de flujo ϕ_0 .

9 Apendice: Sistemas cuanticos de dos estados

Vamos a estudiar varios sistemas fisicos que pueden aproximarse por un sistema cuantico de dos niveles

9.1 La molecula de amoniaco

La molecula de amoniaco NH_3 tiene forma de piramide con los tres atomos de hidrogeno formando un triangulo equilatero en la base de la piramide. Existen de

hecho dos configuraciones que estan relacionadas por medio de la reflexion en un plano, tal como se muestra en la figura 16.

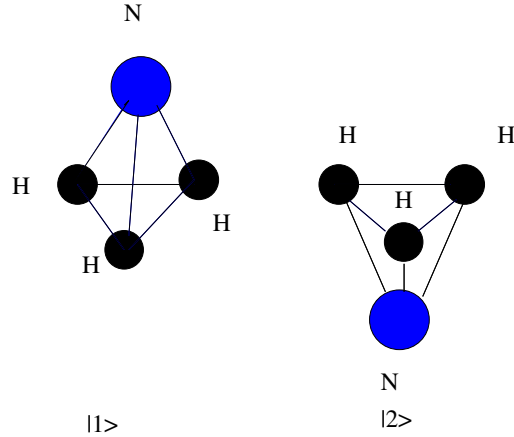


Figure 16: Las dos configuraciones de la molecula de amoniaco, que representamos por los estados $|1\rangle$ y $|2\rangle$.

Para pasar de una configuracion a la otra el atomo de nitrogeno debe de cruzar el plano formado por los atomos de hidrogeno. En cierto rango de energias nos podemos restringir a estas dos configuraciones y estudiar el sistema como un problema de dos estados que denotaremos por $|1\rangle$ y $|2\rangle$. El hamiltoniano en esta base de estados $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ es de la forma:

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix}. \quad (9.1)$$

El termino no diagonal A tiene en cuenta las transiciones entre los dos estados y hace que se rompa la degeneracion en energia de los dos niveles. Los autoestados de H en la base $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ son:

$$\begin{aligned} |+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle + |2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \text{simetrico}, \\ |-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle - |2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \rightarrow \text{antisimetrico}. \end{aligned} \quad (9.2)$$

Estos estados satisfacen:

$$H |+\rangle = (E_0 - A) |+\rangle, \quad H |-\rangle = (E_0 + A) |-\rangle, \quad (9.3)$$

tal como se puede comprobar aplicando directamente H sobre los estados $|+\rangle$ y $|-\rangle$. Asi pues el estado simetrico $|+\rangle$ es el estado de menor energia, tal como se ilustra

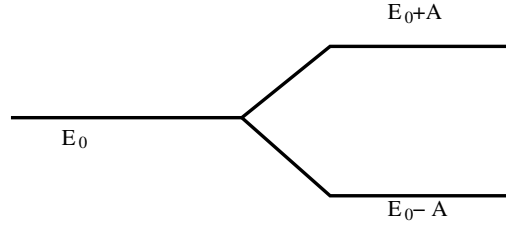


Figure 17: Niveles de energía de la molecula de amoniaco. El termino no diagonal del hamiltoniano rompe la degeneracion.

en la figura 17. Notese la diferencia de notacion con la utilizada en el estudio del ion hidrogeno (los estados $|+\rangle$ y $|-\rangle$ estan cambiados respecto a ese caso).

La molecula de NH_3 tiene un momento dipolar electrico que es perpendicular al plano de los atomos de hidrogeno y que apunta desde el nitrogeno hacia los hidrogenos. La energia clasica de un dipolo bajo la accion del campo electrico \vec{E} es:

$$-\vec{d} \cdot \vec{E} . \quad (9.4)$$

En mecanica cuantica \vec{d} se convierte en un operador \vec{D} que, en nuestra base $\{|1\rangle, |2\rangle\}$, toma la forma:

$$-\vec{D} = \begin{pmatrix} d & 0 \\ 0 & -d \end{pmatrix} \implies -\vec{D} \cdot \vec{E} = \begin{pmatrix} dE & 0 \\ 0 & -dE \end{pmatrix} . \quad (9.5)$$

Observemos que el estado $|1\rangle$ la energia del dipolo es dE puesto que el momento dipolar es antiparalelo al campo, mientras que en el estado $|2\rangle$ la energia es negativa porque el dipolo es paralelo al campo. Asi pues, el hamiltoniano total es:

$$H = \begin{pmatrix} E_0 + dE & -A \\ -A & E_0 - dE \end{pmatrix} . \quad (9.6)$$

Los elementos de matriz de este hamiltoniano son $H_{11} = E_0 + dE$, $H_{22} = E_0 - dE$, $H_{12} = H_{21} = -A$. Segun nuestra formula general para los sistemas de dos estados, los autovectores de la energia son:

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \left[H_{11} + H_{22} \mp \sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4|H_{12}|^2} \right] . \quad (9.7)$$

Aplicando esta ecuacion, obtenemos:

$$\boxed{E_{\pm} = E_0 \mp \sqrt{A^2 + (dE)^2}} \quad (9.8)$$

El campo electrico contribuye a romper la degeneracion de los niveles de energia, tal como se ilustra en la figura 18.

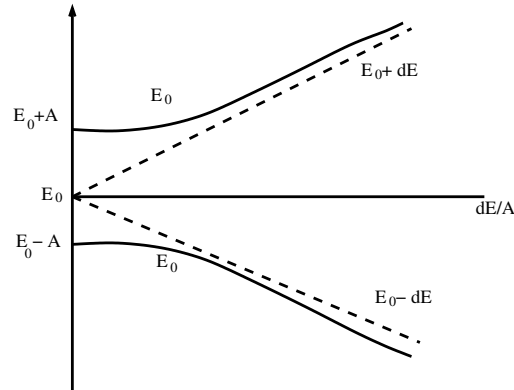


Figure 18: Niveles de energia de la molecula de amoniaco en funcion del campo electrico aplicado.

En el caso de que el campo electrico E sea muy intenso y $dE \gg A$, los niveles de energia dados por la ecuacion (9.8) se pueden aproximar como $E_{\pm} \approx E_0 \mp dE$, que corresponden a las rectas representadas en la figura 18 (en este caso los autoestados son aproximadamente $|1\rangle$ y $|2\rangle$).

El caso mas habitual es el regimen contrario, en el que $dE \ll A$, en el que se puede expandir hasta orden cuadratico la raiz cuadrada en la ecuacion de los niveles de energia:

$$\sqrt{A^2 + (dE)^2} = A \sqrt{1 + \frac{(dE)^2}{A^2}} \approx A \left(1 + \frac{1}{2} \frac{(dE)^2}{A^2}\right) = A + \frac{1}{2} \frac{(dE)^2}{A}. \quad (9.9)$$

Los niveles de energia resultantes en este limite de campo electrico poco intenso son pues:

$$\boxed{E_{\pm} \approx E_0 \mp A \mp \frac{1}{2} \frac{(dE)^2}{A}} \quad (9.10)$$

Puede verse que, al orden en el que estamos trabajando en dE/A , los autoestados de la energia siguen siendo $|+\rangle$ y $|-\rangle$. Si el campo E es no uniforme, es decir si depende de las coordenadas, la molecula esta sometida a una fuerza:

$$\vec{F}_{\pm} = -\vec{\nabla} E_{\pm} = \pm \frac{d^2}{2A} \vec{\nabla} E^2. \quad (9.11)$$

Esta fuerza es diferente para los dos estados, lo que permite separarlo experimentalmente como en el experimento de Stern-Gerlach (vease la figura 19).

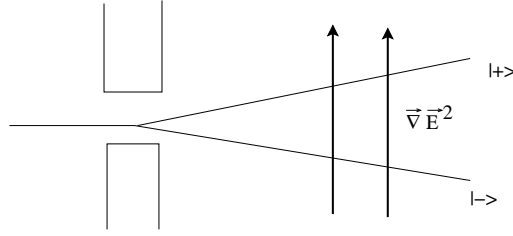


Figure 19: Un campo electrico no uniforme permite separar los estados $|+\rangle$ y $|-\rangle$.

9.2 La molecula de amoniaco en un campo electrico oscilante

Supongamos ahora que las moleculas de NH_3 se encuentran bajo la accion de un campo electrico oscilatorio en tiempo de la forma:

$$E(t) = \mathcal{E}_0 \cos \omega t = \frac{\mathcal{E}_0}{2} [e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}] \quad (9.12)$$

donde $\mathcal{E}_0 \in \mathbb{R}$ y $\mathcal{E}_0 > 0$. En la base $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ el hamiltoniano tiene la forma:

$$H = \begin{pmatrix} E_0 + d E(t) & -A \\ -A & E_0 - d E(t) \end{pmatrix}, \quad (\text{base } \{|1\rangle, |2\rangle\}) . \quad (9.13)$$

Vamos a obtener los elementos de matriz del hamiltoniano en la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$. Para ello hagamos actuar H sobre estos estados. Mediante un calculo sencillo se puede probar que:

$$\begin{aligned} H |+\rangle &= (E_0 - A) |+\rangle + d E(t) |-\rangle , \\ H |-\rangle &= d E(t) |+\rangle + (E_0 + A) |-\rangle . \end{aligned} \quad (9.14)$$

Por consiguiente, la forma matricial de H en la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ es:

$$H = \begin{pmatrix} E_0 - A & d E(t) \\ d E(t) & E_0 + A \end{pmatrix}, \quad (\text{base } \{|+\rangle, |-\rangle\}) . \quad (9.15)$$

Vamos ahora a escribir la ecuacion de Schrödinger para el vector de estado $|\psi(t)\rangle$. Para ello, pongamos:

$$|\psi(t)\rangle = c_+(t) |+\rangle + c_-(t) |-\rangle = \begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix} . \quad (9.16)$$

Entonces, la ecuacion de Schrödinger es:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = i\hbar \begin{pmatrix} \frac{dc_+(t)}{dt} \\ \frac{dc_-(t)}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 - A & dE(t) \\ dE(t) & E_0 + A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix}. \quad (9.17)$$

Por lo tanto, las componentes c_+ y c_- de $|\psi\rangle$ evolucionan temporalmente de acuerdo con el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales acopladas:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dc_+}{dt} &= (E_0 - A) c_+ + dE(t) c_- \\ i\hbar \frac{dc_-}{dt} &= dE(t) c_+ + (E_0 + A) c_- \end{aligned} \quad (9.18)$$

Antes de resolver este sistema de ecuaciones en general, consideremos el caso con $E(t) = 0$. En este caso las ecuaciones diferenciales estan desacopladas y pueden escribirse como:

$$i\hbar \frac{dc_+}{dt} = \omega_+ c_+, \quad i\hbar \frac{dc_-}{dt} = \omega_- c_-, \quad (9.19)$$

siendo ω_{\pm} las siguientes frecuencias:

$$\omega_{\pm} = \frac{E_0 \mp A}{\hbar}. \quad (9.20)$$

La integracion de las ecuaciones (9.19) es inmediata:

$$c_+(t) = \gamma_+ e^{-i\omega_+ t}, \quad c_-(t) = \gamma_- e^{-i\omega_- t}, \quad (9.21)$$

siendo γ_+ y γ_- dos constantes de integracion. Definamos tambien ω_0 como:

$$\omega_0 \equiv \omega_- - \omega_+ = \frac{2A}{\hbar} \quad (9.22)$$

Observe que ω_0 es la frecuencia angular de un foton emitido cuando el sistema efectua una transicion del estado excitado al estado fundamental.

Para resolver el caso general con $E(t) \neq 0$ consideremos el ansatz en el que en la solucion anterior con campo electrico nulo hacemos $\gamma_{\pm} \rightarrow \gamma_{\pm}(t)$, es decir:

$$\begin{aligned} c_+(t) &= \gamma_+(t) e^{-i\omega_+ t} \\ c_-(t) &= \gamma_-(t) e^{-i\omega_- t} \end{aligned} \quad (9.23)$$

Puesto que:

$$i \frac{d c_{\pm}}{dt} = \omega_{\pm} \gamma_{\pm} e^{-i\omega_{\pm} t} + i \frac{d \gamma_{\pm}}{dt} e^{-i\omega_{\pm} t} = \omega_{\pm} c_{\pm} + i \frac{d \gamma_{\pm}}{dt} e^{-i\omega_{\pm} t}, \quad (9.24)$$

las ecuaciones a resolver (9.18) son:

$$\begin{aligned} i \frac{d c_+}{dt} &= \omega_+ c_+ + \frac{d E(t)}{\hbar} c_- = \omega_+ c_+ + i \frac{d \gamma_+}{dt} e^{-i \omega_+ t} , \\ i \frac{d c_-}{dt} &= \omega_- c_- + \frac{d E(t)}{\hbar} c_+ = \omega_- c_- + i \frac{d \gamma_-}{dt} e^{-i \omega_- t} . \end{aligned} \quad (9.25)$$

Estas ecuaciones se reducen al siguiente sistema para las funciones $\gamma_{\pm}(t)$ de nuestro ansatz:

$$\boxed{i \frac{d \gamma_+}{dt} = \frac{d E(t)}{\hbar} e^{-i \omega_0 t} \gamma_-} \quad \boxed{i \frac{d \gamma_-}{dt} = \frac{d E(t)}{\hbar} e^{i \omega_0 t} \gamma_+} \quad (9.26)$$

donde hemos tenido en cuenta la definicion (9.22) de ω_0 en terminos de ω_+ y ω_- . Substituyendo la forma (9.12) del campo electrico oscilatorio, llegamos al siguiente sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden para las funciones γ_{\pm} :

$$\boxed{\begin{aligned} i \frac{d \gamma_+}{dt} &= \frac{d \mathcal{E}_0}{2 \hbar} \left[e^{i(\omega - \omega_0)t} + e^{-i(\omega + \omega_0)t} \right] \gamma_- , \\ i \frac{d \gamma_-}{dt} &= \frac{d \mathcal{E}_0}{2 \hbar} \left[e^{i(\omega + \omega_0)t} + e^{-i(\omega - \omega_0)t} \right] \gamma_+ \end{aligned}} \quad (9.27)$$

Estas ecuaciones no se pueden resolver exactamente de forma analitica . Lo haremos aproximadamente cuando se verifica la condicion:

$$\boxed{d \mathcal{E}_0 \ll A} \quad (9.28)$$

Esta condicion significa que la perturbacion debido al campo electrico es debil. Equivalentemente, dado que $A/\hbar = \omega_0/2$, podemos escribir (9.28) como:

$$\frac{d \mathcal{E}_0}{\hbar} \ll \frac{A}{\hbar} = \frac{\omega_0}{2} < \omega_0 . \quad (9.29)$$

Si definimos la **frecuencia de Rabi** como:

$$\boxed{\omega_1 \equiv \frac{d \mathcal{E}_0}{\hbar}} \quad (9.30)$$

entonces, la aproximacion de campo debil corresponde a tener:

$$\boxed{\omega_1 \ll \omega_0} \quad (9.31)$$

La segunda hipotesis que haremos es que la frecuencia del campo ω es proxima a la frecuencia de la transicion ω_0 . Para ello definamos el llamado **defasaje** (tambien llamado **detuning**) como:

$$\delta \equiv \omega - \omega_0 . \quad (9.32)$$

Supondremos en adelante que se verifica la condicion:

$$\boxed{|\delta| \ll \omega_0} \quad (9.33)$$

Las dos exponenciales que aparecen en el segundo miembro de las ecuaciones a integrar (9.27) son:

$$\begin{aligned} e^{\pm i(\omega+\omega_0)t} &\sim e^{\pm 2i\omega_0 t} && \rightarrow \text{varia rapido ,} \\ e^{\pm i(\omega-\omega_0)t} &\sim e^{\pm i\delta t} && \rightarrow \text{varia lento .} \end{aligned} \quad (9.34)$$

Supondremos que el efecto de las exponenciales de variacion rapida $e^{\pm 2i\omega_0 t}$ promedia a cero y, por tanto, en la llamada **aproximacion cuasiresonante**, despreciaremos en el sistema (9.27) el efecto de las exponenciales con $\omega + \omega_0$. Las ecuaciones resultantes en esta aproximacion son:

$$\boxed{i \frac{d\gamma_{\pm}}{dt} = \frac{\omega_1}{2} e^{\pm i(\omega-\omega_0)t} \gamma_{\mp}} \quad (9.35)$$

Estas ecuaciones se pueden resolver exactamente. Distinguiremos dos casos:

9.2.1 El caso resonante

Integraremos, en primer lugar, las ecuaciones (9.35) en el caso resonante, en el cual $\delta = 0$ o, equivalentemente, $\omega = \omega_0$. Las ecuaciones a integrar se convierten en este caso en:

$$i \frac{d\gamma_{\pm}}{dt} = \frac{\omega_1}{2} \gamma_{\mp} . \quad (9.36)$$

Para integrarlas, las diferenciamos otra vez y utilizamos la ecuacion a integrar (9.36):

$$i \frac{d^2 \gamma_{\pm}}{dt^2} = \frac{\omega_1}{2} \frac{d\gamma_{\pm}}{dt} = \frac{\omega_1}{2} \left(-i \frac{\omega_1}{2} \gamma_{\pm} \right) . \quad (9.37)$$

Es decir

$$\boxed{\frac{d^2 \gamma_{\pm}}{dt^2} + \frac{\omega_1^2}{4} \gamma_{\pm} = 0} \quad (9.38)$$

Esta es la ecuacion de un oscilador armonico clasico de frecuencia $\omega_1/2$. Escribamos la solucion para $\gamma_+(t)$ como:

$$\boxed{\gamma_+(t) = a \cos\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) + b \text{sen}\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right)} \quad (9.39)$$

siendo a y b constantes. La solución para $\gamma_-(t)$ es:

$$\gamma_- = \frac{2}{\omega_1} i \frac{d\gamma_+}{dt} = \frac{2i}{\omega_1} \left[-\frac{a\omega_1}{2} \operatorname{sen}\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) + \frac{b\omega_1}{2} \cos\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) \right], \quad (9.40)$$

es decir:

$$\boxed{\gamma_-(t) = -i a \operatorname{sen}\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) + i b \cos\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right)} \quad (9.41)$$

Las constantes de integración en la solución que acabamos de obtener se fijan a partir de las condiciones iniciales. Supongamos, por ejemplo, que en $t = 0$ la molécula está en el estado $|-\rangle$ de energía $E_0 + A$, es decir en el estado excitado. Entonces, claramente se verifica que:

$$c_+(t=0) = 0, \quad c_-(t=0) = 1 \rightarrow \gamma_+(t=0) = 0, \quad \gamma_-(t=0) = 1. \quad (9.42)$$

Estas condiciones permiten obtener las constantes a y b :

$$\begin{aligned} \gamma_+(t=0) &= a = 0, \\ \gamma_-(t=0) &= i b = 1 \rightarrow b = -i. \end{aligned} \quad (9.43)$$

Entonces, para un instante t arbitrario se tiene:

$$\gamma_+(t) = -i \operatorname{sen}\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right), \quad \gamma_-(t) = \cos\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right). \quad (9.44)$$

En consecuencia, las funciones $c_{\pm}(t)$ son:

$$\boxed{c_+(t) = -i \operatorname{sen}\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) e^{-i\omega_+ t}} \quad \boxed{c_-(t) = \cos\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right) e^{-i\omega_- t}} \quad (9.45)$$

Recordemos que el vector de estado $|\psi(t)\rangle$ está dado por la combinación lineal (9.16). Por lo tanto, las probabilidades de encontrar la molécula en los estados $|+\rangle$ y $|-\rangle$ en el instante t son:

$$\begin{aligned} P_-(t) &= |\langle -|\psi(t)\rangle|^2 = |c_-(t)|^2 = |\gamma_-(t)|^2, \\ P_+(t) &= |\langle +|\psi(t)\rangle|^2 = |c_+(t)|^2 = |\gamma_+(t)|^2. \end{aligned} \quad (9.46)$$

Para las condiciones iniciales consideradas más arriba estas probabilidades son:

$$\boxed{P_-(t) = \cos^2\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right)} \quad \boxed{P_+(t) = \operatorname{sen}^2\left(\frac{\omega_1 t}{2}\right)} \quad (9.47)$$

Asi pues, la molecula oscila entre el estado $|-\rangle$ y el estado $|+\rangle$ con frecuencia $\frac{\omega_1}{2} = \frac{d\mathcal{E}_0}{2\hbar}$. Estas son las denominadas **oscilaciones de Rabi**. La molecula que estaba inicialmente en el estado $|-\rangle$ se encuentra en el estado $|+\rangle$ cuando t es de la forma:

$$\boxed{\frac{\omega_1 t}{2} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots} \quad (9.48)$$

Cuando se aplica un campo durante este intervalo de tiempo se dice que se ha aplicado un π -pulso. Supongamos que, por medio de una campo electrico que separa los dos niveles, hemos preparado el sistema de forma que todas las moleculas de amoniaco estan inicialmente en el estado $|-\rangle$. Si a continuacion aplicamos un π -pulso todas las moleculas pasan al estado $|+\rangle$ de menor energia. Por conservacion de la energia todas las moleculas de amoniaco aportan energia al campo electromagnetico. Este proceso se denomina **emision estimulada** y es la base del MASER, que son las siglas de Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation.

De forma similar, para tener igual probabilidad de tener los niveles $|+\rangle$ y $|-\rangle$ el tiempo durante el cual se aplica el campo electrico es:

$$\boxed{\frac{\omega_1 t}{2} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\pi}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots} \quad (9.49)$$

Los pulsos que tienen esta duracion se denominan $\frac{\pi}{2}$ -pulsos. Este tipo de pulsos se usan en computacion cuantica para manipular los qubits.

9.2.2 El caso no resonante

Resolvamos ahora las ecuaciones de γ_{\pm} cuando la frecuencia del campo no es la resonante, es decir cuando $\delta = \omega - \omega_0 \neq 0$. Estas ecuaciones son:

$$i \frac{d\gamma_{\pm}}{dt} = \frac{\omega_1}{2} e^{\pm i\delta t} \gamma_{\mp}. \quad (9.50)$$

Procedamos como en el caso resonante y derivemos la ecuacion de γ_+ :

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \gamma_+}{dt^2} &= \frac{\omega_1}{2i} \frac{d}{dt} \left(e^{i\delta t} \gamma_- \right) = \frac{\omega_1}{2i} \left[i\delta e^{i\delta t} \gamma_- + e^{i\delta t} \frac{d\gamma_-}{dt} \right] = \\ &= \frac{\omega_1 \delta}{2} \left(\frac{2i}{\omega_1} \frac{d\gamma_+}{dt} \right) + \frac{\omega_1}{2i} e^{i\delta t} \left(\frac{\omega_1}{2i} e^{-i\delta t} \gamma_+ \right), \end{aligned} \quad (9.51)$$

donde, en el ultimo paso, hemos utilizado las ecuaciones de primer orden (9.50) para dejar el resultado en terminos de γ_+ . Simplificando y pasando todo a un miembro, obtenemos:

$$\boxed{\frac{d^2 \gamma_+}{dt^2} - i\delta \frac{d\gamma_+}{dt} + \frac{\omega_1^2}{4} \gamma_+ = 0} \quad (9.52)$$

Observemos que (9.52) se reduce a (9.38) cuando el defasaje δ se anula. Busquemos una solución del tipo:

$$\gamma_+ = e^{i\Gamma t} . \quad (9.53)$$

Puesto que para este ansatz se verifica que:

$$\frac{d^2 \gamma_{\pm}}{dt^2} = -\Gamma^2 e^{i\Gamma t} , \quad -i \frac{d\gamma_+}{dt} = \Gamma e^{i\Gamma t} , \quad (9.54)$$

la constante Γ debe de satisfacer la siguiente ecuación cuadrática:

$$\Gamma^2 - \delta \Gamma - \frac{\omega_1^2}{4} = 0 , \quad (9.55)$$

cuyas soluciones son:

$$\Gamma = \frac{1}{2} \left[\delta \pm \sqrt{\delta^2 + \omega_1^2} \right] \equiv \Gamma_{\pm} . \quad (9.56)$$

Definamos Ω como:

$$\boxed{\Omega = \sqrt{\delta^2 + \omega_1^2}} \quad (9.57)$$

Entonces, se tiene:

$$\boxed{\Gamma_{\pm} = \frac{1}{2} [\delta \pm \Omega]} \quad (9.58)$$

La solución general de $\gamma_+(t)$ será:

$$\gamma_+(t) = \lambda e^{i\Gamma_+ t} + \mu e^{i\Gamma_- t} , \quad (9.59)$$

siendo λ y μ constantes de integración que se determinan a partir de las condiciones iniciales. Observemos que $\gamma_-(t)$ puede obtenerse como:

$$\gamma_-(t) = \frac{2i}{\omega_1} e^{-i\delta t} \frac{d\gamma_+}{dt} . \quad (9.60)$$

Determinemos las constantes de integración imponiendo las condiciones iniciales:

$$\gamma_+(0) = 1 , \quad \gamma_-(0) = 0 . \quad (9.61)$$

Notese que son distintas a las que hemos tomado en el caso resonante. Además, a partir de (9.60) observamos que $\gamma_-(0)$ implica que:

$$\dot{\gamma}_+(0) = \frac{d\gamma_+}{dt}(t=0) = 0 . \quad (9.62)$$

Puesto que:

$$\gamma_+(0) = \lambda + \mu , \quad \dot{\gamma}_+(0) = i[\lambda \Gamma_+ + \mu \Gamma_-] , \quad (9.63)$$

entonces, se verifica:

$$\lambda + \mu = 1, \quad \lambda \Gamma_+ + \mu \Gamma_- = 0. \quad (9.64)$$

A partir de estas dos ecuaciones, podemos obtener λ y μ en funcion de Γ_+ y Γ_- :

$$\lambda = \frac{\Gamma_-}{\Gamma_- - \Gamma_+}, \quad \mu = -\frac{\Gamma_+}{\Gamma_- - \Gamma_+}. \quad (9.65)$$

Teniendo en cuenta que $\Gamma_- - \Gamma_+ = -\Omega$, podemos escribir estas dos ultimas ecuaciones como:

$$\boxed{\lambda = -\frac{\Gamma_-}{\Omega}} \quad \boxed{\mu = \frac{\Gamma_+}{\Omega}} \quad (9.66)$$

La solucion $\gamma_+(t)$ resultante para estas condiciones iniciales es por lo tanto:

$$\begin{aligned} \gamma_+(t) &= -\frac{\Gamma_-}{\Omega} e^{i\Gamma_+ t} + \frac{\Gamma_+}{\Omega} e^{i\Gamma_- t} = \frac{e^{i\frac{\delta}{2} t}}{\Omega} \left[-\Gamma_- e^{i\frac{\Omega}{2} t} + \Gamma_+ e^{-i\frac{\Omega}{2} t} \right] = \\ &= \frac{e^{i\frac{\delta}{2} t}}{\Omega} \left[-\Gamma_- \left(\cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) + i \operatorname{sen}\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \right) + \Gamma_+ \left(\cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) - i \operatorname{sen}\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \right) \right]. \end{aligned} \quad (9.67)$$

Teniendo en cuenta de nuevo que $\Gamma_+ - \Gamma_- = \Omega$ y que $\Gamma_- + \Gamma_+ = \delta$, podemos escribir esta ultima relacion como:

$$\boxed{\gamma_+(t) = \frac{e^{i\frac{\delta}{2} t}}{\Omega} \left[\Omega \cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) - i\delta \operatorname{sen}\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \right]} \quad (9.68)$$

Para calcular $\gamma_-(t)$, obtengamos $\frac{d\gamma_+}{dt}$:

$$\begin{aligned} \frac{d\gamma_+}{dt} &= \frac{1}{\Omega} \frac{i\delta}{2} e^{i\frac{\delta}{2} t} \left[\Omega \cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) - i\delta \operatorname{sen}\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \right] + \\ &+ \frac{1}{\Omega} \frac{\Omega}{2} e^{i\frac{\delta}{2} t} \left[-\Omega \operatorname{sen}\left(\frac{\Omega t}{2}\right) - i\delta \cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \right] = \frac{e^{i\frac{\delta}{2} t}}{2\Omega} (\delta^2 - \Omega^2) \operatorname{sen}\left(\frac{\Omega t}{2}\right), \end{aligned} \quad (9.69)$$

que puede escribirse como:

$$\frac{d\gamma_+}{dt} = -\frac{\omega_1^2}{2\Omega} e^{i\frac{\delta}{2} t} \operatorname{sen}\left(\frac{\Omega t}{2}\right). \quad (9.70)$$

Utilizando ahora (9.60), llegamos a:

$$\boxed{\gamma_-(t) = -\frac{i\omega_1}{\Omega} e^{-i\frac{\delta}{2} t} \operatorname{sen}\left(\frac{\Omega t}{2}\right)} \quad (9.71)$$

La probabilidad de encontrar la molecula en el estado $|-\rangle$ en el instante t es:

$$P_-(t) = \left| \gamma_-(t) \right|^2 = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \operatorname{sen}^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right). \quad (9.72)$$

Teniendo en cuenta que $\Omega = \sqrt{\delta^2 + \omega_1^2} = \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2}$, podemos escribir $P_-(t)$ como:

$$P_-(t) = \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \text{sen}^2 \left(\frac{t}{2} \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \right) \quad (9.73)$$

donde

$$\begin{aligned} \omega_0 &= \frac{2A}{\hbar} \rightarrow \text{frecuencia de la transicion } |+\rangle \leftrightarrow |-\rangle , \\ \omega &\rightarrow \text{frecuencia del campo electrico ,} \\ \omega_1 &= \frac{d\mathcal{E}_0}{\hbar} \rightarrow \text{frecuencia de Rabi} \end{aligned} \quad (9.74)$$

9.3 Resonancia Magnetica Nuclear

Consideremos un nucleo de espin 1/2, cuyo momento magnetico $\vec{\mu}$ esta relacionado con el espin \vec{S} en la forma:

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{S} = \frac{1}{2} \gamma \hbar \vec{\sigma} , \quad (9.75)$$

siendo γ el factor giromagnetico. Supongamos que el nucleo esta bajo la accion de un campo magnetico constante \vec{B}_0 dirigido a lo largo del eje z . Pongamos $\vec{B}_0 = (0, 0, B_0)$. El hamiltoniano H_0 del espin nuclear es:

$$H_0 = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}_0 = -\frac{1}{2} \gamma \hbar B_0 \sigma_3 . \quad (9.76)$$

Si definimos la frecuencia de Larmor como:

$$\omega_0 = \gamma B_0 \quad (9.77)$$

entonces, el hamiltoniano H_0 es:

$$H_0 = -\frac{\hbar}{2} \omega_0 \sigma_3 \quad (9.78)$$

En forma de matriz, este hamiltoniano puede escribirse como:

$$H_0 = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & 0 \\ 0 & -\omega_0 \end{pmatrix} \quad (9.79)$$

Asi pues, tenemos un sistema de dos niveles $|+\rangle$ y $|-\rangle$:

$$\begin{aligned} |+\rangle &\rightarrow S_3 = +\frac{\hbar}{2}, & \text{Energia} &= -\frac{\hbar\omega_0}{2}, \\ |-\rangle &\rightarrow S_3 = -\frac{\hbar}{2}, & \text{Energia} &= \frac{\hbar\omega_0}{2}. \end{aligned} \quad (9.80)$$

Sabemos que el espín \vec{S} rota alrededor del eje z (precesion de Larmor) con frecuencia ω_0 . Para una carga positiva (como la de un nucleo) esta precesion se produce en el sentido de las agujas del reloj.

Supongamos ahora que añadimos al campo magnetico constante \vec{B}_0 un campo magnetico variable con el tiempo $\vec{B}_1(t)$ paralelo al plano xy y rotando con velocidad ω en la forma:

$$\vec{B}_1(t) = B_1 (\cos \omega t, -\text{sen} \omega t, 0). \quad (9.81)$$

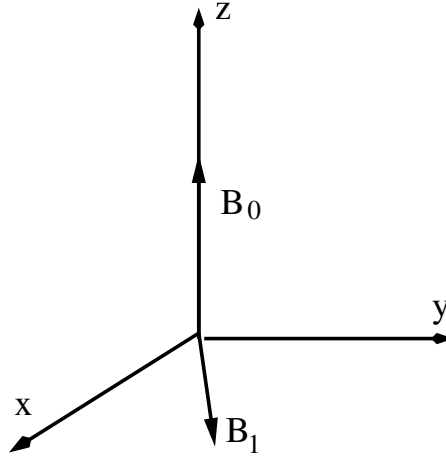


Figure 20: Campo magnetico con una componente \vec{B}_1 rotando en plano xy .

El campo $\vec{B}_1(t)$ rota en el mismo sentido que la precesion de Larmor pero con diferente frecuencia. La contribucion de \vec{B}_1 al hamiltoniano es:

$$H_1(t) = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}_1(t) = -\frac{\hbar\omega_1}{2} (\cos \omega t \sigma_1 - \text{sen} \omega t \sigma_2), \quad (9.82)$$

siendo ω_1 la frecuencia de Rabi, definida como:

$$\boxed{\omega_1 = \gamma B_1} \quad (9.83)$$

En forma de matriz el hamiltoniano H_1 se puede escribir como:

$$H_1 = -\frac{\hbar\omega_1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \cos \omega t + i \text{sen} \omega t \\ \cos \omega t - i \text{sen} \omega t & 0 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar\omega_1}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix}. \quad (9.84)$$

El hamiltoniano total $H(t) = H_0 + H_1(t)$ sera pues:

$$H(t) = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{i\omega t} \\ \omega_1 e^{-i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix} \quad (9.85)$$

Estudiemos ahora la ecuacion de Schrödinger. Pongamos:

$$|\psi(t)\rangle = c_+(t) |+\rangle + c_-(t) |-\rangle = \begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix}. \quad (9.86)$$

Entonces, la ecuacion de Schrödinger toma la forma:

$$\begin{aligned} H |\psi\rangle &= -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{i\omega t} \\ \omega_1 e^{-i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = \\ &= -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 c_+ + \omega_1 e^{i\omega t} c_- \\ \omega_1 e^{-i\omega t} c_+ - \omega_0 c_- \end{pmatrix} = i\hbar \begin{pmatrix} \frac{dc_+}{dt} \\ \frac{dc_-}{dt} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (9.87)$$

Tenemos pues el sistema:

$$i \frac{dc_{\pm}}{dt} = \mp \frac{1}{2} \omega_0 c_{\pm} - \frac{1}{2} \omega_1 e^{\pm i\omega t} c_{\mp} \quad (9.88)$$

Para resolver estas ecuaciones hagamos el siguiente cambio de variable:

$$c_{\pm}(t) = \gamma_{\pm}(t) e^{\pm i \frac{\omega_0}{2} t}. \quad (9.89)$$

Para motivar este cambio de variables observemos que si $B_1 = 0$ (y por lo tanto $\omega_1 = 0$) la formula anterior resuelve las ecuaciones si las $\gamma_{\pm}(t)$ son constantes. Asi pues la dependencia en t de $\gamma_{\pm}(t)$ es debida al campo magnetico variable. De hecho este cambio de variables sirve para eliminar la dependencia temporal trivial de c_{\pm} debida a H_0 . En efecto, puesto que:

$$i \frac{dc_{\pm}}{dt} = \left(\mp \frac{\omega_0}{2} \gamma_{\pm} + i \frac{d\gamma_{\pm}}{dt} \right) e^{\pm i \frac{\omega_0}{2} t}, \quad (9.90)$$

tenemos que las ecuaciones diferenciales (9.88) se convierten en:

$$\left(\mp \frac{\omega_0}{2} \gamma_{\pm} + i \frac{d\gamma_{\pm}}{dt} \right) e^{\pm i \frac{\omega_0}{2} t} = \mp \frac{\omega_0}{2} \gamma_{\pm}(t) e^{\pm i \frac{\omega_0}{2} t} - \frac{\omega_1}{2} e^{\pm i\omega t} \gamma_{\mp}(t) e^{\mp i \frac{\omega_0}{2} t}. \quad (9.91)$$

Simplificando esta ecuacion y despues multiplicando por $e^{\mp i \frac{\omega_0}{2} t}$, llegamos al siguiente sistema de ecuaciones acopladas:

$$i \frac{d\gamma_{\pm}}{dt} = -\frac{\omega_1}{2} e^{\pm i(\omega - \omega_0)t} \gamma_{\mp}. \quad (9.92)$$

Definiendo la frecuencia de detuning δ como:

$$\boxed{\delta \equiv \omega - \omega_0} \quad (9.93)$$

las ecuaciones resultantes son:

$$\boxed{i \frac{d\gamma_{\pm}}{dt} = -\frac{\omega_1}{2} e^{\pm i\delta t} \gamma_{\mp}} \quad (9.94)$$

Estas ecuaciones son las mismas que las escritas en (9.50) para la molécula de NH_3 si cambiamos $\omega_1 \rightarrow -\omega_1$. Teniendo en cuenta esto podemos escribir de forma inmediata la solución correspondiente a tener un estado $|+\rangle$ en el instante $t = 0$. Cambiando ω_1 por $-\omega_1$ en (9.68) y (9.71) obtenemos:

$$\boxed{\begin{aligned} \gamma_+(t) &= \frac{e^{i\frac{\delta}{2}t}}{\Omega} \left[\Omega \cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) - i\delta \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \right], \\ \gamma_-(t) &= \frac{i\omega_1}{\Omega} e^{-i\frac{\delta}{2}t} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \end{aligned}} \quad (9.95)$$

siendo

$$\boxed{\Omega = \sqrt{\delta^2 + \omega_1^2} = \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2}} \quad (9.96)$$

La probabilidad de encontrar el espín $|-\rangle$ transcurrido un tiempo t es:

$$P_-(t) = |\gamma_-(t)|^2 = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right). \quad (9.97)$$

Es decir:

$$\boxed{P_-(t) = \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \sin^2\left(\frac{t}{2} \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2}\right)} \quad (9.98)$$

El máximo de esta probabilidad se alcanza cuando:

$$\frac{\Omega t}{2} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (9.99)$$

es decir para los valores de t :

$$t = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{2\pi}{\Omega} = \frac{\pi}{\Omega}, \frac{3\pi}{\Omega}, \dots, \quad (9.100)$$

que corresponden a un π -pulso. La probabilidad después de uno de estos π -pulsos es:

$$P_-^{max} = \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2}, \quad (9.101)$$

que es el valor correspondiente a una curva resonante de anchura $\delta = \omega - \omega_0$. Si $\delta = 0$ entonces $\omega = \omega_0$ y $P_-^{max} = 1$, mientras que P_-^{max} decrece rapidamente si $\delta \neq 0$. Observemos que P_- se anula cuando.

$$\frac{\Omega t}{2} = n\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (9.102)$$

es decir para

$$t = \frac{2n\pi}{\Omega} = 0, \frac{2\pi}{\Omega}, \frac{4\pi}{\Omega}, \dots. \quad (9.103)$$

La funcion $P_-(t)$ se representa en la figura 21.

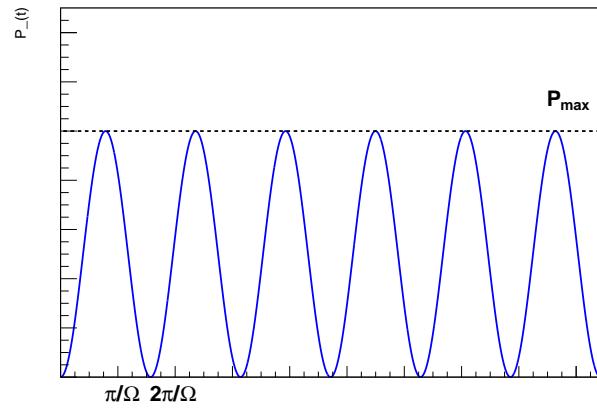


Figure 21: La probabilidad P_- como funcion del tiempo.