

| | |
|------------------------|---|
| Título del Trabajo | Apuntes de Mecánica Cuántica |
| Nombre | Enrique Cantera del Río |
| Filiación | C/Padre Benito Menni-6-2-E 47008 Valladolid (España) |
| Correo electrónico | benarro@gmail.com |
| Resumen | Introducción a la Mecánica Cuántica para primeros cursos de carreras científico-técnicas. |
| Versión 1 ^a | No hay una versión previa de este trabajo publicada en INGLOMAYOR |

APUNTES DE MECÁNICA CUÁNTICA

Introducción.

Sistemas de Coordenadas en Mecánica Cuántica.

El operador momento angular de una partícula en coordenadas esféricas.

La ecuación de Schrödinger del átomo de hidrógeno. Armónicos Esféricos.

Teoría general del momento angular de una partícula en mecánica cuántica.

El oscilador armónico unidimensional en mecánica cuántica.

Apéndice Matemático.

Referencias.

Introducción.

Para que la ciencia sea posible debe haber luz y debe haber un observador, es decir, alguien que sea capaz de extraer información de la luz. La limpieza intelectual mas elemental exige reconocer a la luz como el mensajero del conocimiento; y como suele decirse “no debemos matar al mensajero”.

Durante decenas de miles de años la humanidad observó las estrellas y planetas. Esas luces del firmamento se ordenaron en constelaciones de modo que a lo largo del tiempo llevaron a los observadores a la idea de un movimiento cíclico y repetitivo de los cielos; llegando a pensar incluso que el tiempo mismo era cíclico. Como dijo Einstein, “Nuestras ideas dependen de nuestras experiencias como la ropa de la forma de nuestros cuerpos.” Se distinguieron las estrellas del firmamento por su *brillo* y su *color*, dos propiedades de la luz que ahora sabemos son una *medida* de la potencia de emisión de energía y la temperatura de la estrella respectivamente, o de cualquier otro emisor térmico de luz. La luz y la geometría están unidas desde el origen. Es fácil observar una parte de la luz *procedente directamente* del sol que atraviesa un pequeño orificio en una habitación oscura. Ese cilindro de luz pasa a ser un cono si la fuente de luz está relativamente ceca del pequeño agujero. Pero cuanto mas se aleja la fuente mas se parece el cono de luz a un cilindro. Evidentemente el sol está muy alejado y los *rayos componentes* de su luz nos llegan por tanto prácticamente paralelos unos respecto a otros. Estos rayos no son mas que pequeños cilindros por los que circula una determinada cantidad de luz. Los rayos de fuentes de luz cercanas no son en general paralelos entre sí y proyectan sombras menos nítidas (penumbra). Los rayos pueden ser reflejados en espejos, también pueden ser absorbidos por la materia o cambiados de dirección (refractados) sin ser absorbidos en medios transparentes como el cristal de una lente. La refracción y la reflexión de la luz son la base de los microscopios y telescopios ópticos; auténticos símbolos del observador y de la ciencia. La refracción de un rayo de luz solar al pasar por un prisma triangular transparente revela que nuestro rayo es la unión de rayos de distintos colores. Si entra un cilindro de luz al prisma sale una dispersión angular de rayos coloreados limitada por los colores violeta y rojo; esto es debido a la ley de refracción y a que la velocidad de la luz en el prisma depende del color de cada rayo. No es el prisma el que produce los colores, los colores ya estaban en el rayo incidente. Si se coloca un termómetro sobre los rayos de salida no se observa ningún efecto térmico asociado a ningún color, salvo cuando se coloca mas allá del extremo rojo (infra-rojo) en una zona donde no se aprecia luz a simple vista. Este efecto térmico también se da en el rayo de sol original y por tanto hay mas “luz” de la que vemos a simple vista. La dispersión de rayos que sale de un prisma hace que los rayos de distintos colores no sean paralelos entre sí al salir del prisma, pero los rayos de un mismo color en el haz de salida si lo son. Con un pequeño telescopio (catalejo) montado adecuadamente en la dirección de salida de uno de los colores y a cierta distancia del prisma se puede ver exclusivamente el color asociado a esa dirección de salida. En la interpretación ondulatoria de la luz el color está asociado a la longitud de onda, y al ser este un número real ...¿existen infinitos colores?. Utilizando un pequeño catalejo enfocado sobre la luz que sale del prisma y montado todo en una mesa giratoria (espectroscopio) es posible ver si la luz del sol emite rayos en una longitud de onda muy precisa o no lo hace. Se descubren así las líneas oscuras de Fraunhofer : colores (longitudes de onda) no incluidos en la luz

solar. Con el tiempo se descubre la forma de atomizar la materia aplicando calor o corriente eléctrica que descompone las moléculas. El propio sistema de atomización hace que los átomos “estén calientes” y *emitan* luz que puede ser analizada en el espectroscopio. Se observa que la luz que emiten los átomos solo incluye una serie de colores (longitudes de onda) discretos y no gamas continuas como la luz del sol. Este conjunto discreto de líneas representa una huella dactilar distintiva del átomo correspondiente. Posteriormente se desarrollan los espectros de absorción en los que una muestra atomizada absorbe luz de una fuente. Se constatan las mismas longitudes de onda para la luz absorbida y para la luz emitida en el espectro de emisión del mismo elemento químico. Se interpretan las líneas negras de Fraunhofer como luz absorbida por átomos de gases relativamente fríos situados en las capas exteriores del sol o en la atmósfera terrestre y se identifican los gases correspondientes menos uno, el Helio, que era desconocido y fue descubierto y analizado posteriormente en la tierra.

El *experimento de Rutherford* revela la estructura interna del átomo :un núcleo que acumula toda la carga positiva y un conjunto de electrones moviéndose alrededor del núcleo y que compensan su carga. La física conocida hasta el momento dice que si el electrón se mueve alrededor del núcleo es una carga acelerada y por tanto debe emitir energía en forma de radiación. La emisión teórica de energía es tal que el electrón debería precipitarse hacia el núcleo en una fracción tremendamente pequeña de 1 segundo. Pero el experimento no deja lugar a dudas y este resultado desata en la física una ola de cambios solo comparables a la introducción del modelo Copernicano en la mecánica clásica. En 1913 Bohr introduce un modelo del átomo de hidrógeno similar a un planeta (electrón) orbitando alrededor del sol (núcleo); pero incluyendo el concepto de cuanto de acción desarrollado por Planck y Einstein en su explicación de aspectos anómalos (cuánticos) de la interacción entre luz y materia. El concepto clave del modelo propuesto por Bohr es el de *estado cuántico del electrón* : el electrón es capaz de mantener un estado estable y duradero en el átomo de hidrógeno. El modelo consigue explicar con éxito los resultados espectroscópicos del átomo de hidrógeno y por tanto la hipótesis del estado cuántico del electrón se extiende al resto de los átomos como explicación natural de sus espectros. También fenómenos como el *efecto Zeeman* [5] o la *ley de Moseley* [6] se reinterpretan según la hipótesis del estado cuántico del electrón. Del efecto Zeeman se derivan conceptos importantes como el de *razón giromagnética*, *spin*, *interacción spín-órbita* etc. La ley de Moseley supone una ampliación de las predicciones del modelo de Bohr que introduce el concepto de *apantallamiento de carga* para átomos polielectrónicos; concepto que evolucionará hasta el concepto de *capas electrónicas del átomo*. Sin el estado cuántico del electrón este se precipitaría al núcleo, los átomos desaparecerían y nada de lo que consideramos físicamente real existiría. Por tanto debemos considerar el estado cuántico del electrón algo “duro” y “duradero”, ya que está **en la base de la realidad física**. La mecánica cuántica se desarrolla para obtener una descripción matemática satisfactoria del estado cuántico y sus propiedades[7]; descripción que resulta matemáticamente compleja y conceptualmente es una difícil combinación de conceptos clásicos y conceptos cuánticos. Según el premio Nobel Richard Feynman, “Nadie entiende realmente la mecánica cuántica”.

Sistemas de Coordenadas en Mecánica Cuántica.

En física clásica el proceso de medida se introduce teóricamente por medio de los sistemas de coordenadas. Los sistemas de coordenadas son una refinada abstracción de la "vulgar" regla de medida; y en relatividad también del "vulgar" reloj. Elegimos el sistema de coordenadas que simplifique más las medidas que requiere nuestro problema. Aunque la lógica nos dice que una cosa es definir un sistema de coordenadas y otra cosa es obtener información (medida) procedente de dicho sistema, la física clásica asume sin más que una vez definido el sistema de coordenadas la obtención de información es inmediata y no requiere ninguna consideración adicional. Imagine el lector un sistema de coordenadas formado por un gran conjunto de relojes muy pequeños (puntuales) distribuidos en una zona del espacio. Los relojes están en reposo respecto al observador y sincronizados entre sí; de modo que cada reloj "conoce" su posición (x,y,z) y la hora actual (t) . Una partícula se mueve en el sistema y queremos saber las posiciones que ocupa a medida que pasa el tiempo. Es evidente que esta información no es intrínseca a la partícula ni al sistema de coordenadas, sino que depende de un proceso en el que la partícula y el sistema de coordenadas *interaccionan*. La forma más sencilla es que la partícula emita una señal que capta un reloj próximo, tan próximo como queramos, de modo que en dicho reloj quedan memorizados los valores (x,y,z,t) asociados a la partícula. Si la señal emitida es un fotón provocará una reacción en la partícula según el principio de conservación del impulso mecánico y según el principio de Heisenberg esto llevará asociado una imprecisión en la posición de la partícula. En caso de partículas atómicas la imprecisión en la posición puede ser mayor que el tamaño de la propia partícula. ¿De qué sirve entonces nuestro sistema de coordenadas en el caso de partículas en el dominio atómico?

La Mecánica Cuántica, partiendo de datos experimentales, fundamentalmente espectroscópicos, sobre el comportamiento de la materia a escala atómica, propone un replanteamiento radical de la física introduciendo una serie de nuevos conceptos fundamentales:

1-Una partícula ya no se representa como una función trayectoria parametrizada por el tiempo : $[x(t),y(t),z(t)]$ sino como una función $\psi(x,y,z,t)$ compleja ;es decir, con parte real e imaginaria; en el dominio de todo el sistema de coordenadas y el tiempo. Los atributos más importantes de esta función son

1.1-Su módulo al cuadrado está relacionado con la probabilidad de localizar la partícula en un punto (x,y,z)

1.2-Dar cuenta de la dualidad onda/partícula; de modo que puede provocar fenómenos lineales de interferencia y difracción debido a su carácter complejo; como el caso de la experiencia de la difracción por doble rendija de Young.

Esta función corresponde al *estado cuántico* de la partícula y carece de dimensiones; las dimensiones están asociadas a los correspondientes *operadores*. Note que $\psi(x,y,z,t)$ no supone un mayor conocimiento de la estructura interna de la partícula que sigue considerándose puntual.

2-La medida de una magnitud física relevante : posición, impulso mecánico y angular, energía, etc; está asociada a la acción de un *operador matemático lineal* sobre la función de onda o estado postulado en el punto anterior. Este operador incluye derivadas parciales y tiene también parte real y parte imaginaria. Si A es uno de estos operadores, entonces el conjunto de valores posibles a_i resultantes de una medida de la magnitud correspondiente verifica la ecuación de valores propios del operador:

$$A \psi_i(x,y,z,t) = a_i \psi_i(x,y,z,t)$$

las funciones ψ_i describen los posibles estados de la partícula. Si conocemos el operador A , la expresión anterior corresponde a una ecuación diferencial que puede resolverse obteniendo el conjunto de valores y funciones propias $\{a_i, \psi_i(x,y,z,t)\}$

3-Existe un álgebra de operadores cuyo conocimiento es indispensable. Dados dos operadores A, B se define el operador de conmutación $[A, B] = AB - BA$. Si el conmutador no es nulo entonces el resultado de las medidas de A y B no es independiente del orden en que se tomen y podemos decir que el resultado conjunto de las dos medidas incluye algún tipo de interferencia o indeterminación. Si el conmutador es nulo, entonces esta interferencia no existe y los operadores A, B comparten el mismo conjunto de funciones propias $\{\psi_i(x,y,z,t)\}$, pero con distintos valores propios. Si el conmutador no es nulo, entonces no existe ningún estado cuántico $\psi(x,y,z,t)$ que tenga valores bien definidos para las magnitudes asociadas a los operadores A y B .

Es importante resaltar que sigue siendo básica la existencia de un sistema de coordenadas al estilo de la física clásica; sin embargo la mecánica cuántica introduce un nuevo objeto entre el sistema de coordenadas y la medida : el operador. Además el operador puede escribirse en el contexto del sistema de coordenadas utilizado, es decir, utilizando derivadas parciales de las coordenadas. Un operador básico es el impulso mecánico de una partícula cuya forma y ecuación de valores propios es

$$\begin{aligned} \bar{p} &\rightarrow -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = -i\hbar \nabla \\ -i\hbar \nabla \psi(x, y, z, t) &= (p_x, p_y, p_z) \psi(x, y, z, t) = \bar{p} \psi(x, y, z, t) \end{aligned}$$

La interpretación física del *principio de incertidumbre de Heisenberg* muestra que no podemos medir simultáneamente la posición y el impulso mecánico de una partícula. En términos de operadores, si asignamos un operador posición (X, Y, Z) de la forma $(X, Y, Z) \psi(x, y, z, t) = (x, y, z) \psi(x, y, z, t)$, el principio de Heisenberg nos dice que no existe ningún estado cuántico en el que una partícula tenga una posición y un impulso mecánico definidos con exactitud. El principio también indica que el estado cuántico del electrón no es aplicable exclusivamente al átomo, sino que es una propiedad intrínseca de cualquier partícula.

Otro operador básico es el momento angular que puede definirse a partir del anterior como

$$\bar{L} = \bar{r} \times \bar{p} \rightarrow -i\hbar (x, y, z) \times \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

Note el lector que los operadores presentados son mas bien *definiciones* y que la mecánica cuántica solo ofrece reglas heurísticas para la formulación de los operadores. En todo caso existe un álgebra básica de conmutadores; que puede demostrarse fácilmente. Para cualesquiera operadores A, B, C :

$$[A, C] = -[C, A]$$

$$[A + B, C] = [A, C] + [B, C]$$

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$$

El operador Momento Angular de una partícula en coordenadas esféricas.

Podemos aprovechar el álgebra del operador gradiente desarrollado en el trabajo sobre mecánica de fluidos [1](apéndice matemático). En este caso podemos introducir el operador gradiente en coordenadas esféricas por medio de la inversa de la matriz de giro local : GL^{-1} , aplicada al operador gradiente en cartesianas. Utilizando la forma matricial (tensorial) del producto vectorial tenemos

$$\vec{r} = (x, y, z) = (r \sin(\theta) \cos(\phi), r \sin(\theta) \sin(\phi), r \cos(\theta))$$

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -z & y \\ z & 0 & -x \\ -y & x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} \rightarrow -i\hbar \begin{pmatrix} 0 & -r \cos(\theta) & r \sin(\theta) \sin(\phi) \\ r \cos(\theta) & 0 & -r \sin(\theta) \cos(\phi) \\ -r \sin(\theta) \sin(\phi) & r \sin(\theta) \cos(\phi) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} = GL^{-1} \begin{pmatrix} \partial_r \\ \frac{\partial_\theta}{r} \\ \frac{\partial_\phi}{r \sin(\theta)} \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\frac{-1}{i\hbar} \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -r \cos(\theta) & r \sin(\theta) \sin(\phi) \\ r \cos(\theta) & 0 & -r \sin(\theta) \cos(\phi) \\ -r \sin(\theta) \sin(\phi) & r \sin(\theta) \cos(\phi) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin(\theta) \cos(\phi) & \cos(\theta) \cos(\phi) & -\sin(\phi) \\ \sin(\theta) \sin(\phi) & \cos(\theta) \sin(\phi) & \cos(\phi) \\ \cos(\theta) & -\sin(\theta) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_r \\ \frac{\partial_\theta}{r} \\ \frac{\partial_\phi}{r \sin(\theta)} \end{pmatrix}$$

$$\frac{-1}{i\hbar} \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -r \sin(\phi) & -r \cos(\theta) \cos(\phi) \\ 0 & r \cos(\phi) & -r \cos(\theta) \sin(\phi) \\ 0 & 0 & r \sin(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_r \\ \frac{\partial_\theta}{r} \\ \frac{\partial_\phi}{r \sin(\theta)} \end{pmatrix} \Rightarrow \left. \begin{aligned} \frac{L_x}{i\hbar} &= \sin(\phi) \partial_\theta + \cos(\phi) \frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)} \\ \frac{L_y}{i\hbar} &= \sin(\phi) \frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)} - \cos(\phi) \partial_\theta \\ \frac{L_z}{i\hbar} &= -\partial_\phi \end{aligned} \right\}$$

de modo que obtenemos las componentes cartesianas del operador momento angular expresadas en coordenadas esféricas. A partir de esto podemos definir también el operador cuadrado del momento angular $L^2 = (L_x)^2 + (L_y)^2 + (L_z)^2$ en esféricas

$$\begin{aligned} \frac{-L_x^2}{\hbar^2} &= \left[\sin(\phi)\partial_\theta + \cos(\phi)\frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)} \right] \left[\sin(\phi)\partial_\theta + \cos(\phi)\frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)} \right] = \sin^2(\phi)\partial_\theta^2 + \frac{\cos(\phi)}{\tan^2(\theta)}\partial_\phi(\cos(\phi)\partial_\phi) + \sin(\phi)\cos(\phi)\partial_\theta\left(\frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)}\right) + \frac{\cos(\phi)}{\tan(\theta)}\partial_\phi(\sin(\phi)\partial_\theta) \\ \frac{-L_y^2}{\hbar^2} &= \left[\cos(\phi)\partial_\theta - \sin(\phi)\frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)} \right] \left[\cos(\phi)\partial_\theta - \sin(\phi)\frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)} \right] = \cos^2(\phi)\partial_\theta^2 + \frac{\sin(\phi)}{\tan^2(\theta)}\partial_\phi(\sin(\phi)\partial_\phi) - \cos(\phi)\sin(\phi)\partial_\theta\left(\frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)}\right) - \frac{\sin(\phi)}{\tan(\theta)}\partial_\phi(\cos(\phi)\partial_\theta) \\ \frac{-L_z^2}{\hbar^2} &= \partial_\phi^2 \\ \Rightarrow L^2 &= L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = -\hbar^2 \left[\partial_\theta^2 + \frac{\partial_\theta}{\tan(\theta)} + \frac{\partial_\phi^2}{\sin^2(\theta)} \right] \end{aligned}$$

Para todos estos operadores introducidos podemos calcular, partiendo de su definición y del álgebra de operadores, los siguientes conmutadores (ver apéndice)

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z ; [L_y, L_z] = i\hbar L_x ; [L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

$$[L_z, L^2] = [L_y, L^2] = [L_x, L^2] = 0$$

Hasta ahora hemos seguido de alguna forma la mecánica clásica en la definición de operadores; pero el álgebra nos permite introducir otros operadores que resultarán ser importantes : los operadores de escalera $L_\pm = L_x \pm iL_y$. Podemos introducir y calcular estos operadores en coordenadas esféricas de esta forma

$$L^2 - L_z^2 = L_x^2 + L_y^2 = (L_x + iL_y)(L_x - iL_y) - i[L_x, L_y] \Rightarrow L^2 - L_z^2 - \hbar L_z = L_+ L_-$$

$$\begin{aligned} \frac{L_\pm}{i\hbar} &= \frac{L_x}{i\hbar} \pm i \frac{L_y}{i\hbar} = \sin(\phi)\partial_\theta + \cos(\phi)\frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)} \pm i \left[\sin(\phi)\frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)} - \cos(\phi)\partial_\theta \right] = [\cos(\phi) \pm i \sin(\phi)] \frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)} + [\sin(\phi) \mp i \cos(\theta)] \partial_\theta = \\ &= [\cos(\phi) \pm i \sin(\phi)] \frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)} \mp i [\pm i \sin(\phi) + \cos(\theta)] \partial_\theta = e^{\pm i\phi} \left[\frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)} \mp i \partial_\theta \right] \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\boxed{L_\pm = L_x \pm iL_y = \hbar e^{\pm i\phi} \left[i \frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)} \pm \partial_\theta \right] \Rightarrow [L_z, L_\pm] = \pm \hbar L_\pm ; [L^2, L_\pm] = 0}$$

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el átomo de Hidrógeno y el operador momento angular. Armónicos esféricos del Laplaciano.

Se puede presentar la ecuación de Schrödinger como la respuesta al problema de hallar los estado cuánticos en los que una partícula cargada cancela la emisión de radiación por carga acelerada. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el electrón en el átomo de hidrógeno tiene esta forma

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

donde $V(r)$ es el potencial Coulombiano y E la energía correspondiente al estado $\psi(r, \theta, \phi)$. Una condición para llegar a la ecuación anterior es que el potencial no sea función del tiempo. Podemos encontrar los *estados estacionarios* de esta ecuación mediante

la técnica de la *separación de variables*; de forma similar a como hicimos en el trabajo *sobre la ecuación de onda [2]* para el cálculo de las ondas estacionarias. De esto modo dividimos el estado en dos factores que separan las variables r y (θ, ϕ) : $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$. Por otra parte veremos que la expresión del *Laplaciano* de la ecuación de Schrödinger en esféricas incorpora de forma natural al operador L^2 que hemos visto antes.

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right] \right) + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) = \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right] \right) - \frac{1}{\hbar^2} \frac{L^2}{r^2} \Rightarrow$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right] \right) + \frac{1}{2m} \frac{L^2}{r^2} + V(r) \right] R(r)Y(\theta, \phi) = E R(r)Y(\theta, \phi) \Rightarrow$$

$$\frac{1}{Y(\theta, \phi)} \frac{L^2 Y(\theta, \phi)}{\hbar^2} = \lambda = \frac{1}{R(r)} \left[\left(\frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right] \right) + \frac{2m}{\hbar^2} r^2 (E - V(r)) \right] R(r)$$

Siguiendo el método de separación de variables tenemos dos expresiones : a la derecha una que depende exclusivamente de r y a la izquierda otra que depende exclusivamente de (θ, ϕ) . Siendo todas las variables independientes, esto solo puede significar que λ es una constante en el proceso de integración de la ecuación de Schrödinger. Podemos seguir con el procedimiento de separación de variables para $Y(\theta, \phi)$, pero también aplicar el álgebra de operadores derivado de la Mecánica Cuántica. Dado que L^2 y L_z son operadores que conmutan, estos dos operadores comparten sus funciones propias. La función $Y(\theta, \phi)$ encontrada en la separación de variables es una función propia del operador L^2 y por tanto también de L_z . Aplicar los operadores L_{\pm} a $Y(\theta, \phi)$ generará nuevas funciones propias de L^2 y L_z ; pero con la notable diferencia de que para estas nuevas funciones generadas a partir de $Y(\theta, \phi)$ el valor propio λ de L^2 se mantiene (degeneración) y el valor propio m de L_z aumenta o disminuye en una unidad (no degeneración). Las siguientes fórmulas, fácilmente demostrables con el álgebra de conmutadores, dan cuenta de estas ideas

$$L_{\pm} \left\{ \frac{L^2}{\hbar^2} Y(\theta, \phi) = \lambda Y(\theta, \phi) \right\} \Rightarrow \frac{L^2}{\hbar^2} (L_{\pm} Y(\theta, \phi)) = \lambda (L_{\pm} Y(\theta, \phi))$$

$$L_{\pm} \left\{ \frac{L_z}{\hbar} Y(\theta, \phi) = m Y(\theta, \phi) \right\} \Rightarrow \frac{L_z}{\hbar} (L_{\pm} Y(\theta, \phi)) = (m \pm 1) (L_{\pm} Y(\theta, \phi))$$

$$\frac{L_z}{\hbar} Y(\theta, \phi) = -i \partial_{\phi} Y(\theta, \phi) = m Y(\theta, \phi) \Rightarrow Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta) e^{im\phi}$$

La última ecuación nos dice la forma de $Y(\theta, \phi)$ como producto de funciones de cada ángulo, lo cual está de acuerdo con la separación de variables. Además, si exigimos que $Y(\theta, \phi)$ sea una función *univaluada* de modo que, para (r, θ) fijos $Y(\theta, \phi)$ se repita cíclicamente cada 2π radianes en la variable ϕ ; entonces los valores propios (m) solo pueden ser *números enteros* : $0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Aplicando conclusiones anteriores sobre la forma de $Y(\theta, \phi)$, la ecuación en valores propios para L^2 nos lleva a

$$\frac{L^2}{\hbar^2} Y(\theta, \phi) \rightarrow \left[\partial_\theta^2 + \frac{\partial_\theta}{\tan(\theta)} + \frac{\partial_\phi^2}{\sin^2(\theta)} \right] \Theta(\theta) e^{im\phi} = \lambda \Theta(\theta) e^{im\phi} \Rightarrow \left[\partial_\theta^2 + \frac{\partial_\theta}{\tan(\theta)} \right] \Theta(\theta) = \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2(\theta)} \right) \Theta(\theta) \Rightarrow$$

$$\frac{1}{\sin(\theta)} \partial_\theta [\sin(\theta) \partial_\theta] \Theta(\theta) = - \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2(\theta)} \right) \Theta(\theta)$$

Esta es una ecuación diferencial compleja, pero afortunadamente podemos aplicar resultados vistos en el trabajo *sobre la ecuación de ondas*[2]. En este trabajo se introdujeron los *Polinomios de Legendre* $P_l(\theta)$ en el contexto del desarrollo en serie del potencial Coulombiano de una carga en reposo localizada fuera del centro de coordenadas. El lector puede comprobar que tomando $m=0$ la ecuación anterior se reduce a la ecuación diferencial de los polinomios de Legendre con la elección $\lambda=l(l+1)$, y $l=0,1,2,3\dots$. Tenemos por tanto que los polinomios de Legendre son un conjunto de soluciones válido de $Y(\theta, \phi)$ parametrizados por el par de números $(l, m=0)$. Para $l=1$ el polinomio de Legendre es $\cos(\theta)$ y es una función propia de los operadores (L^2, L_z) . Si aplicamos los operadores de escalera a esta función tenemos

$$\frac{L_\pm}{\hbar} \cos(\theta) = e^{\pm i\phi} \left[i \frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)} \pm \partial_\theta \right] \cos(\theta) = \mp \sin(\theta) e^{\pm i\phi}$$

que son las funciones propias correspondientes a $(l, m)=(1, \pm 1)$. Si volvemos a aplicar el operador escalera para generar las funciones de $m=\pm 2$ tenemos

$$\frac{L_+}{\hbar} \sin(\theta) e^{i\phi} = e^{i\phi} \left[i \frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)} + \partial_\theta \right] \sin(\theta) e^{i\phi} = 0$$

$$-\frac{L_-}{\hbar} \sin(\theta) e^{-i\phi} = -e^{-i\phi} \left[i \frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)} - \partial_\theta \right] \sin(\theta) e^{-i\phi} = 0$$

y, por supuesto, se anularán las correspondientes sucesivas aplicaciones de los operadores de escalera. Esta es una propiedad general y puede demostrarse que, para un valor dado de l los valores posibles de m son $-l \leq m \leq l$ que hace un total de $2l+1$ valores posibles para m , incluido $m=0$. El lector puede comprobar esto para el siguiente polinomio de Legendre correspondiente a $l=2, m=0$: $P_2(\theta) = (3\cos^2(\theta)-1)/2$.

De esta forma podemos construir un *conjunto completo* de soluciones dependientes de dos números cuánticos y de variables angulares $Y_l^m(\theta, \phi)$. Se puede demostrar que el conjunto de funciones $Y_l^m(\theta, \phi)$ es, respecto a funciones arbitrarias de dos variables angulares $f(\theta, \phi)$, análogo al conjunto de funciones $\{\sin(nx), \cos(nx)\}$ para funciones $f(x)$ de una sola variable. Si según el teorema de Fourier podemos aproximar una función $f(x)$ como una suma infinita de funciones $\{\sin(nx), \cos(nx)\}$; resulta que se puede demostrar que podemos hacer lo mismo con los $Y_l^m(\theta, \phi)$ para cualquier función de dos variables angulares $f(\theta, \phi)$. En este sentido las $Y_l^m(\theta, \phi)$ son un conjunto completo de soluciones, ya que cualquier otra posible solución es una combinación lineal de ellas; sin importar si se trata de una serie infinita. Aunque las funciones $Y_l^m(\theta, \phi)$ encontradas son complejas se pueden obtener valores reales tomando las partes real e imaginaria de las combinaciones de soluciones $Y_l^m(\theta, \phi) \pm Y_l^m(\theta, \phi)$. Desde un punto de vista matemático este conjunto de funciones reales son los *armónicos esféricos* asociados al *operador de Laplace* y su dominio de aplicación excede con mucho la mecánica

cuántica : Geodesia, Astronomía, Telecomunicaciones... En mecánica cuántica los $Y_l^m(\theta, \phi)$ están asociados a los *orbitales atómicos* y sus capas electrónicas: $l=0$ es un orbital tipo *S*, $l=1$ es un orbital tipo *P*, $l=2$ es un orbital tipo *D*...

Para encontrar la forma completa de los estados $\psi(r, \theta, \phi)$ en el átomo de Hidrógeno necesitamos resolver la parte radial de la ecuación de Schrödinger.

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

dividiendo el resultado por r tenemos

$$\left(2 \frac{\partial}{\partial r} + r \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) R(r) + \left(\frac{2m}{\hbar^2} r^2 (E - V(r)) - l(l+1) \right) \frac{R(r)}{r} = 0 \Rightarrow$$

$$\{ \text{haciendo } u(r) = rR(r) \} \Rightarrow \frac{d^2 u}{dr^2} + \left(\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u = 0$$

Para la solución de esta ecuación diferencial se suele hacer notar al lector que se pueden conseguir soluciones asintóticas para $r \rightarrow \infty$ que verifiquen la ecuación

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E u = 0 \Rightarrow u = rR(r) \rightarrow e^{\pm kr} \Rightarrow R(r) \rightarrow \frac{e^{-kr}}{r}; \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} |E|}$$

La interpretación probabilista exige que $\psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y(\theta, \phi)$ se anule para $r \rightarrow \infty$ y debemos elegir el exponente negativo. Note el lector también que para que la solución asintótica funcione la energía debe ser negativa $E < 0$; lo cual corresponde a un objeto orbitando alrededor de otro bajo el efecto de una fuerza de tipo newtoniano. En el caso general suponemos una solución que factoriza el caso asintótico con un polinomio de índice n

$$u(r) = \left(\sum_{i=0}^{i=n} a_i r^i \right) e^{-kr}$$

Es sencillo demostrar sustituyendo esta forma en la ecuación diferencial que las soluciones en forma de polinomio con un número finito de términos solo son posibles si se verifica

$$\sqrt{\frac{m}{2|E|}} \frac{Ze^2}{4\pi\hbar} = n \Rightarrow E = -\frac{m}{2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\hbar} \right)^2 \frac{1}{n^2}; \quad n > l; \quad V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon r}$$

donde n es un entero correspondiente al índice máximo del polinomio, Z es el número de cargas elementales del núcleo y l es el número cuántico asociado al momento angular que hemos visto. Una solución en forma de polinomio con infinitos términos debe descartarse para asegurar el comportamiento asintótico. El número n corresponde al *número cuántico principal*.

Podemos hacer cierto contraste de estos resultados con los de la física clásica. En el trabajo [3] *Análisis elemental del movimiento bajo fuerza central de tipo Newtoniano* se

vio que, *independientemente de la trayectoria*, se verificaba siempre la siguiente desigualdad en el movimiento

$$E \geq -\left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon L}\right)^2 \frac{m}{2}$$

Aplicando los resultados anteriores sobre los valores de E y L^2 a esta relación tenemos

$$-\left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon\hbar}\right)^2 \frac{m}{2} \frac{1}{n^2} \geq -\left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon\hbar}\right)^2 \frac{m}{2} \frac{1}{l(l+1)} \Rightarrow n^2 \geq l(l+1) \Rightarrow n > l$$

debido a que (n, l) son números enteros no cabe la igualdad entre ellos.

Teoría general del momento angular de una partícula en mecánica cuántica.

Los resultados que hemos obtenido para el momento angular de una partícula están en el contexto de un campo central Coulombiano. Sin embargo es posible llegar a conclusiones sobre los valores y funciones propios de momento angular de una partícula en cualquier contexto utilizando solamente los principios de la mecánica cuántica que hemos introducido.

La siguiente lista de formulas se derivan directamente de la definición del momento angular que hemos utilizado

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \Rightarrow [L_z, L^2] = [L_y, L^2] = [L_x, L^2] = 0$$

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z ; [L_y, L_z] = i\hbar L_x ; [L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y \Rightarrow [L_z, L_{\pm}] = \pm\hbar L_{\pm} ; [L^2, L_{\pm}] = 0$$

$$L_{\pm}L_{\mp} = L^2 - L_z^2 \pm \hbar L_z$$

dado que los operadores L^2 y L_z conmutan es posible encontrar estados cuánticos ψ que sean funciones propias de ambos operadores, de modo que

$$L^2\psi = a\psi ; L_z\psi = b\psi ; a \geq b^2$$

donde la desigualdad de valores propios es la relación que se espera entre el cuadrado de una componente y el cuadrado del modulo de un vector en cartesianas. Es este punto nos vamos afijar en un valor arbitrario a para L^2 y el máximo valor posible b_{max} para L_z . Dado que suponemos b_{max} positivo, si aplicamos el operador escalera L_+ a la ecuación en valores propios de L_z para el caso b_{max} tenemos, utilizando la lista de fórmulas al principio de esta sección

$$L_+L_z\psi = b_{max}L_+\psi \Rightarrow ([L_z, L_+] = \hbar L_+) \Rightarrow L_zL_+\psi = (b_{max} + \hbar)L_+\psi$$

lo cual significaría que hemos encontrado en $L_+\psi$ una función propia de L_z con un valor propio que supera a b_{max} . Dado que no puede existir una función propia con estas características debe ser $L_+\psi=0$, es decir, la función propia que hemos encontrado debe anularse en todas partes. Si aplicamos a este resultado el operador L_- , los resultados de la lista de fórmulas y las ecuaciones de valores propios de L^2 y L_z tenemos

$$L_- L_+ \psi = (L^2 - L_z^2 - \hbar L_z) \psi = 0 \Rightarrow L^2 \psi = (L_z^2 + \hbar L_z) \psi = 0 \Rightarrow$$

$$L^2 \psi = a \psi = b_{\max} (b_{\max} + \hbar) \psi \Rightarrow a = b_{\max} (b_{\max} + \hbar)$$

Por otro lado, si aplicamos reiteradamente n veces el operador L_- a la ecuación en valores propios de L_z tenemos

$$\begin{aligned} L_z \psi = b_{\max} \psi &\Rightarrow L_- L_z \psi = b_{\max} L_- \psi \Rightarrow ([L_z, L_-] = -\hbar L_-) \Rightarrow L_z L_- \psi = (b_{\max} - \hbar) L_- \psi \\ L_- L_z L_- \psi &= (b_{\max} - \hbar) L_-^2 \psi \Rightarrow ([L_z, L_-] = -\hbar L_-) \Rightarrow L_z L_-^2 \psi = (b_{\max} - 2\hbar) L_-^2 \psi \\ &\dots\dots\dots \\ L_z L_-^n \psi &= (b_{\max} - n\hbar) L_-^n \psi \end{aligned}$$

el resultado es nuevamente una ecuación en valores propios para L_z con las correspondientes funciones propias $L_-^n \psi$. En todo caso los valores propios correspondientes deben verificar

$$(b_{\max} - n\hbar)^2 \leq a$$

y por tanto tiene que haber un valor máximo de n_{\max} que no debe ser superado y que verifica

$$L_z \psi' = (b_{\max} - n_{\max} \hbar) \psi' ; \psi' = L_-^{n_{\max}} \psi$$

Si aplicamos el operador escalera L_- a la relación anterior obtendríamos una función propia $L_- \psi'$ con un valor propio menor que el menor posible, lo cual no es posible y por tanto debe ser $L_- \psi' = 0$ en todo punto. Aplicando a este resultado el operador escalera L_+ tenemos

$$L_+ L_- \psi' = (L^2 - L_z^2 + \hbar L_z) \psi' = 0 \Rightarrow L^2 \psi' = (L_z^2 - \hbar L_z) \psi' = 0 \Rightarrow$$

$$L^2 \psi' = a \psi' = (b_{\max} - n_{\max} \hbar)(b_{\max} - (n_{\max} + 1)\hbar) \psi' \Rightarrow a = (b_{\max} - n_{\max} \hbar)(b_{\max} - (n_{\max} + 1)\hbar)$$

y recuperando el resultado que encontramos para el valor propio a de L^2 tenemos

$$b_{\max} (b_{\max} + \hbar) = (b_{\max} - n_{\max} \hbar)(b_{\max} - (n_{\max} + 1)\hbar) \Rightarrow b_{\max} = \frac{n_{\max} \hbar}{2}$$

dado que n_{\max} es un número positivo que puede ser arbitrario en principio, tenemos que los valores propios b de L_z pueden adoptar valores $0, \pm 1/2, \pm 1, \dots$ mientras que el valor propio a de L^2 verifican

$$L^2 \psi = l(l+1)\hbar^2 \psi ; l = 0, 1/2, 1, \dots$$

los valores fraccionarios están relacionados con el *Spin* de partículas como el electrón (fermiones) y los valores enteros con el *momento angular orbital* y con el *Spin* de partículas como el fotón (bosones). Vemos por tanto que la forma de los valores propios de L^2 que hemos encontrado en el problema del electrón en el átomo de hidrógeno *no es una forma exclusiva de este problema, sino que es un resultado general para el momento angular de una partícula*. En concreto, un electrón de un átomo con varios electrones debe tener valores propios de L^2 y L_z según la forma

$$\boxed{L^2\psi = l(l+1)\hbar^2\psi; \quad l = 0,1,2,3,\dots \quad L_z\psi = m_l\hbar\psi; \quad m_l = 0,\pm 1,\dots,\pm l}$$

Un ejemplo del nivel de generalidad del resultado anterior es el análisis de los espectros moleculares de rotación. Una molécula diatómica ($N_2, C/Na..$) puede estar girando respecto de su centro de masas y tendrá una energía cinética de rotación E_{r-CM} respecto al centro de masas de valor $E_{r-CM} = L^2/2I$ según la mecánica clásica; donde L es el momento angular respecto al centro de masas e I es el momento de inercia. Según nuestro resultado tenemos

$$E_{r-CM}(l) = l(l+1)\frac{\hbar^2}{2I} \Rightarrow \Delta E_{r-CM} = E_{r-CM}(l) - E_{r-CM}(l-1) = l\frac{\hbar^2}{I}; \quad l = 0,1,2,3,\dots$$

en la práctica se puede constatar en moléculas la existencia de líneas espectrales separadas según la ley anterior, sobre todo en el dominio del infrarrojo lejano y para valores de l relativamente bajos. Para valores mayores el propio giro provoca efectos centrífugos que modifican el momento de inercia de la molécula. Algunos núcleos atómicos, los que no presentan simetría esférica, también tienen asociados niveles de energía de rotación según la fórmula anterior[4].

Note el lector que los valores de m semi-enteros suponen una excepción al carácter univaluado para las correspondientes componentes de la función de onda de forma $Y(\theta, \phi) = Y(\theta, \phi + 2m\pi)$; en concreto para el caso del Spin del electrón $m = \pm 1/2$.

Spin y momento angular total

Siguiendo la mecánica clásica, el momento angular total (J) de un sistema de partículas se puede descomponer en el momento angular del centro de masas (L) y el momento angular de las partículas respecto al centro de masas (S)

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad \equiv \quad J_x = L_x + S_x; \quad J_y = L_y + S_y; \quad J_z = L_z + S_z;$$

Si identificamos L como el momento angular orbital y S el momento angular de Spín, y mantenemos que J sigue siendo un momento angular en el contexto de la mecánica cuántica, entonces debemos analizar la expresión anterior en términos de operadores. El operador L actúa sobre las coordenadas de una partícula, que podemos asociar con las coordenadas del centro de masas de la mecánica clásica. Siguiendo la analogía clásica, el operador S actúa sobre coordenadas internas de la partícula e independientes de las coordenadas sobre las que actúa L . Debido a esta independencia de coordenadas los operadores L^2, L_x, L_y, L_z y S^2, S_x, S_y, S_z conmutan dos a dos. Por otro lado, elevando al cuadrado la relación vectorial de momentos angulares tenemos

$$J^2 = L^2 + S^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S}$$

Interpretemos la expresión anterior en términos de operadores para calcular los conmutadores $[J^2, L^2], [J^2, S^2]$. Según las consideraciones precedentes sobre la dependencia funcional de los operadores L y S podemos poner

$$\begin{aligned} [L^2, \vec{L} \cdot \vec{S}] &= [L^2, L_x S_x] + [L^2, L_y S_y] + [L^2, L_z S_z] = 0 \\ [S^2, \vec{L} \cdot \vec{S}] &= [S^2, L_x S_x] + [S^2, L_y S_y] + [S^2, L_z S_z] = 0 \end{aligned}$$

ya que L^2 y S^2 conmutan con cualquier componente de S y con cualquier componente de L ; y por tanto tenemos

$$\begin{aligned} [J^2, L^2] &= [L^2, L^2] + [S^2, L^2] + 2[\bar{J} \cdot \bar{S}, L^2] = 0 \\ [J^2, S^2] &= [L^2, S^2] + [S^2, S^2] + 2[\bar{J} \cdot \bar{S}, S^2] = 0 \end{aligned}$$

y por tanto J^2 , L^2 y S^2 conmutan; es decir, admiten un conjunto común de estados cuánticos y pueden ser determinados sin incertidumbre y simultáneamente.

De la misma forma podemos calcular el conmutador $[J^2, J_z]$

$$[J^2, J_z] = [L^2, L_z + S_z] + [S^2, L_z + S_z] + 2[\bar{L} \cdot \bar{S}, L_z + S_z]$$

dado que L^2 y S^2 conmutan con cualquier componente de S y con cualquier componente de L , los dos primeros conmutadores del lado derecho de la expresión anterior se anulan. Veamos el comportamiento del conmutador restante, para lo que utilizaremos las propiedades de conmutación de las componentes propias del momento angular orbital L y el de Spin S

$$[\bar{L} \cdot \bar{S}, L_z + S_z] = [S_x L_x, L_z] + [S_y L_y, L_z] + [S_z L_z, L_z] + [L_x S_x, S_z] + [L_y S_y, S_z] + [L_z S_z, S_z]$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x ; [L_z, L_x] = i\hbar L_y ; [S_y, S_z] = i\hbar S_x ; [S_z, S_x] = i\hbar S_y \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} [\bar{L} \cdot \bar{S}, L_z + S_z] &= S_x [L_x, L_z] + S_y [L_y, L_z] + L_x [S_x, S_z] + L_y [S_y, S_z] = \\ &= -i\hbar S_x L_y + i\hbar S_y L_x - i\hbar L_x S_y + i\hbar L_y S_x = i\hbar \{ [S_y, L_x] + [S_x, L_y] \} = 0 \end{aligned}$$

donde el valor nulo final es consecuencia de que Las componentes de L y S son operadores sobre variables independientes diferentes. En resumen hemos visto que $[J^2, J_z]=0$, tal como se espera para un momento angular en mecánica cuántica. En consecuencia el conjunto de operadores $J^2, L^2, S^2, J_z, L_z, S_z$ conmutan dos a dos y por tanto los estados cuánticos de cualquiera de estos operadores son también estados cuánticos del resto de operadores. Podemos poner las conclusiones de esta forma

| | |
|---|---|
| $L^2 \psi = l(l+1)\hbar^2 \psi; \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots$ | $L_z \psi = m_l \hbar \psi; \quad m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l$ |
| $S^2 \psi = s(s+1)\hbar^2 \psi; \quad s = \left\{ \begin{matrix} 0, 1, 2, \dots \\ \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots \end{matrix} \right\} \dots$ | $S_z \psi = m_s \hbar \psi; \quad m_s = \left\{ \begin{matrix} 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm s \\ \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots, \pm s \end{matrix} \right\}$ |
| $J^2 \psi = j(j+1)\hbar^2 \psi; \quad j = \left\{ \begin{matrix} 0, 1, 2, \dots \\ \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots \end{matrix} \right\} \dots$ | $J_z \psi = m_j \hbar \psi; \quad m_j = \left\{ \begin{matrix} 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm j \\ \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots, \pm j \end{matrix} \right\}$ |

Donde los valores semi-enteros de s y j hacen referencia a partículas como el electrón (fermiones) y los valores enteros a partículas como el fotón (bosones). Los autovalores m_l y m_s , al ser componentes de momentos angulares, tienen la propiedad de *no-degeneración*. Esto significa que la relación entre ψ (estado cuántico) y valor propio m_l es biunívoca: dos estados cuánticos diferentes tienen valores propios m_l diferentes y dos valores propios m_l diferentes tienen estados cuánticos diferentes. Lo mismo vale para m_s ; y para m_j esto también debería ser cierto. Para ver esto suponemos

inicialmente unos valores l y s fijos para los momentos angulares L, S . El valor máximo de m_j correspondiente será $m_{j-max} = l+s$; pero $m_{j-max} = j_0$ y por tanto $j_0 = l+s$. La acción del operador escalera J_- sobre J_z nos lleva a un nuevo estado cuántico que disminuye m_j en una unidad y por tanto será $m_j = l+s-1$. Pero según la relación $J_z = L_z + S_z$ hay dos formas en que se puede conseguir este resultado:

- A-Que m_l disminuya en 1 y m_s se mantenga
- B-Que m_s disminuya en 1 y m_l se mantenga

evidentemente el estado cuántico resultante de A y el de B son distintos; pero no puede haber dos estados cuánticos distintos para un mismo valor de m_j si exigimos no-degeneración para el operador J_z . Para solucionar este problema en el dominio cuántico debemos pensar que una sola de las opciones A, B supone disminuir m_j en una unidad pero manteniendo j_0 (ya que $2j_0+1$ valores son posibles para m_j) y que la otra opción supone disminuir m_j pero modificando también j_0 ; y es evidente que el nuevo valor j'_0 será $j'_0 = l+s-1 = j_0-1$ el nuevo valor máximo. De este modo podemos repetir el razonamiento y obtener una serie j_0, j'_0, j''_0, \dots de valores posibles para j (y por tanto para m_j) entre los límites $l-s \leq j \leq l+s$ (supuesto $s > 0$).

Dado que L y S son operadores independientes, para unos valores fijos l, s , el número total de posibilidades para el par (m_l, m_s) es el producto cartesiano, es decir $(2l+1)(2s+1)$ pares posibles. Según el resultado anterior $l-s \leq j \leq l+s$, tenemos que para un l dado hay $2l+1$ valores de m_l posibles y para un s dado hay según la desigualdad anterior $2s+1$ valores de m_j posibles, es decir $(2l+1)(2s+1)$ estados cuánticos distintos en total; de modo que hemos contado el mismo número de estados para los pares (m_l, m_s) y para los pares (m_l, m_j) ; como era esperable.

El oscilador armónico unidimensional en mecánica cuántica.

Análogamente al caso del electrón en el átomo de hidrógeno podemos preguntarnos por la existencia de estados cuánticos con cancelación de radiación por carga acelerada cuando dicha carga está afectada por un movimiento oscilatorio armónico. La imagen clásica de un oscilador es una masa puntual conectada a un muelle y oscilando en una línea que podemos considerar el eje x de nuestro sistema de coordenadas. Podemos plantear el operador H asociado a la energía en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo de esta forma

$$H\psi = E\psi; \quad H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2; \quad P_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

donde podemos reconocer el operador de energía cinética y el operador de energía potencial elástica. El valor x es la distancia al punto en el que el extremo del muelle no está ni estirado ni comprimido. Veremos que es posible encontrar operadores de escalera para los valores propios del operador H de forma análoga al caso del operador momento angular L . Aprovechando la forma de suma de componentes cuadráticas podemos escribir el operador H así

$$H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{2m}}P_x + i\sqrt{\frac{k}{2}}x \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2m}}P_x - i\sqrt{\frac{k}{2}}x \right) - i\frac{\omega}{2}[x, P_x] \Rightarrow$$

$$H - \frac{1}{2}\hbar\omega = \left(\frac{1}{\sqrt{2m}}P_x + i\sqrt{\frac{k}{2}}x \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2m}}P_x - i\sqrt{\frac{k}{2}}x \right)$$

$$R_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2m}}P_x \pm i\sqrt{\frac{k}{2}}x \Rightarrow [H, R_{\pm}] = \pm\hbar\omega R_{\pm} ; \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

donde ω es la frecuencia propia de oscilación del muelle según la mecánica clásica. Hemos encontrado la expresión explícita de los operadores escalera, de modo que si $\psi(x)$ es un estado cuántico del oscilador con energía E , la acción de los operadores de escalera sobre $\psi(x)$ generan otro estado cuántico posible $R_{\pm}\psi(x)$ del oscilador con energía $E \pm \hbar\omega$. Según la mecánica clásica la energía total del oscilador es un número siempre mayor o igual que cero; por tanto si utilizamos sobre $\psi(x)$ reiteradamente el operador R_{-} , llegaremos necesariamente a un estado $\psi_0(x)$ de mínima energía posible. Si aplicamos nuevamente el operador de descenso al estado de mínima energía será $R_{-}\psi_0(x) = 0$, ya que no pueden existir estados cuánticos de energía menor. Si a este resultado le aplicamos el operador de ascenso R_{+} tenemos

$$R_{+}R_{-}\psi_0 = 0 \Rightarrow \left\{ \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 + i\frac{\omega}{2}[x, P_x] \right\} \psi_0 = 0$$

$$[x, P_x] = i\hbar \Rightarrow \left\{ \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \right\} \psi_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \psi_0$$

El resultado es la ecuación de Schrödinger para el estado cuántico de mínima energía del oscilador; y resulta que esta energía mínima no es nula sino un valor positivo

$$E_{\min}^{\text{oscilador-lineal}} = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

La aplicación reiterada del operador R_{+} genera los correspondientes estados cuánticos que aumentan en energía según el número natural $n=0, 1, 2, 3, \dots$

$$H(R_{+}^n\psi_0) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega R_{+}^n\psi_0$$

Se puede encontrar la función correspondiente al estado cuántico de mínima energía fácilmente resolviendo la relación $R_{-}\psi_0(x) = 0$ en forma de ecuación diferencial

$$R_{-}\psi_0 = 0 \Rightarrow \left\{ -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - i\sqrt{mk}x \right\} \psi_0 = 0 \Rightarrow \left\{ \frac{d}{dx} + \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}x \right\} \psi_0 = 0 \Rightarrow$$

$$\psi_0 = A \exp\left(-\frac{\sqrt{mk}}{2\hbar}x^2\right)$$

donde A es una constante que puede determinarse en base a la condición de normalización.

Note el lector que, desde el punto de vista clásico, estamos despreciando la masa del muelle o elemento flexible del oscilador. Lo cierto es que la mecánica cuántica hace

total abstracción de este punto. En concreto, la teoría de la radiación del cuerpo negro considera a dicho cuerpo formado por osciladores cuánticos con los niveles de energía que hemos encontrado; y esto en cualquier rango de frecuencias, sin que se aprecie experimentalmente alguna desviación atribuible a la masa del muelle.

Por otra parte note el lector que hemos atribuido estados cuánticos estables a sistemas caracterizados por una fuerza interna atractiva que hace converger a la partícula hacia un centro de fuerzas, como es el caso del átomo de hidrógeno y el del muelle. Si el signo de estas fuerzas es opuesto y divergente respecto del centro de fuerzas los estados cuánticos tal como los hemos presentado dejan de tener sentido.

Apéndice MatemáticoCálculo del conmutador $[L_x, L_y]$ en esféricas

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar}[L_x, L_y] &= \frac{1}{i\hbar}(L_x L_y - L_y L_x) = \left(\sin(\phi)\partial_\theta + \cos(\phi)\frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)} \right) \left(\sin(\phi)\frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)} - \cos(\phi)\partial_\theta \right) - \left(\sin(\phi)\frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)} - \cos(\phi)\partial_\theta \right) \left(\sin(\phi)\partial_\theta + \cos(\phi)\frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)} \right) = \\ &= \sin^2(\phi)\partial_\theta \left(\frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)} \right) - \sin(\phi)\cos(\phi)\partial_\theta^2 + \cos(\phi)\frac{\partial_\phi}{\tan^2(\theta)}(\sin(\phi)\partial_\phi) - \cos(\phi)\frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)}(\cos(\phi)\partial_\theta) - \\ &= \sin(\phi)\frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)}(\sin(\phi)\partial_\theta) - \sin(\phi)\frac{\partial_\phi}{\tan^2(\theta)}(\cos(\phi)\partial_\phi) + \cos(\phi)\sin(\phi)\partial_\theta^2 + \cos^2(\phi)\partial_\theta \left(\frac{\partial_\theta}{\tan(\theta)} \right) = \\ &= \left\{ \partial_\theta \left(\frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)} \right) - \cos(\phi)\frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)}(\cos(\phi)\partial_\theta) - \sin(\phi)\frac{\partial_\phi}{\tan(\theta)}(\sin(\phi)\partial_\theta) \right\} + \left\{ \cos(\phi)\frac{\partial_\phi}{\tan^2(\theta)}(\sin(\phi)\partial_\phi) - \sin(\phi)\frac{\partial_\phi}{\tan^2(\theta)}(\cos(\phi)\partial_\phi) \right\} = \\ &= \left\{ -\frac{\partial_\phi}{\sin^2(\phi)} \right\} + \left\{ \frac{\partial_\phi}{\tan^2(\theta)} \right\} = -\partial_\phi \Rightarrow [L_x, L_y] = i\hbar L_z \end{aligned}$$

Cálculo del conmutador $[L_x, L_y]$ en cartesianas

$$\begin{aligned} \frac{\vec{L}}{-i\hbar} &= \begin{pmatrix} 0 & -z & y \\ z & 0 & -x \\ -y & x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} = (y\partial_z - z\partial_y, z\partial_x - x\partial_z, x\partial_y - y\partial_x); \\ -\frac{1}{\hbar^2}[L_x, L_y] &= (y\partial_z - z\partial_y)(z\partial_x - x\partial_z) - (z\partial_x - x\partial_z)(y\partial_z - z\partial_y) = y\partial_z(z\partial_x) - yx\partial_z^2 - z^2\partial_{yx} + zx\partial_{yz} - zy\partial_{xz} + z^2\partial_{xy} + xy\partial_z^2 - x\partial_z(z\partial_y) = \\ &= y\partial_z(z\partial_x) + zx\partial_{yz} - zy\partial_{xz} - x\partial_z(z\partial_y) = y\partial_x - x\partial_y = \frac{L_z}{i\hbar} \Rightarrow \\ &[L_x, L_y] = i\hbar L_z \end{aligned}$$

Cálculo conmutadores de L^2

$$\begin{aligned} [L_z, L^2] &= [L_z, L_x^2 + L_y^2 + L_z^2] = [L_z, L_x^2] + [L_z, L_y^2] + [L_z, L_z^2] = [L_z, L_x]L_x + L_x[L_z, L_x] + [L_z, L_y]L_y + L_y[L_z, L_y] + 0 = \\ &= i\hbar(L_y L_x + L_x L_y - L_x L_y - L_y L_x) = 0 \\ [L_x, L^2] &= [L_x, L^2] = [L_x, L^2] = 0 \end{aligned}$$

Referencias, en esta misma web por este mismo autor**[1]** Introducción a la mecánica de fluidos**[2]** Sobre la ecuación de ondas**[3]** Análisis elemental del movimiento bajo fuerza central Newtoniana.**[4]** R.H.Dicke/J.P.Wittke. Introducción a la mecánica cuántica. Ed.Librería General-1975**[4']** L.L.Goldin, G.I Nóvikova imntroducción a al Física Cuántica Ed.MIR-1988**[5]** https://en.wikipedia.org/wiki/Moseley's_law**[6]** https://en.wikipedia.org/wiki/Zeeman_effect**[7]** https://es.wikipedia.org/wiki/Estado_cuánticohttps://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_state