

## 7. LA TEORÍA DE SCHRÖDINGER

### *Introducción*

El trabajo de Broglie llamó la atención de Einstein, quien lo consideró muy importante y lo difundió entre los físicos. Inspirado en las ideas allí expuestas, Erwin Schrödinger desarrolló entre 1925 y 1926 su teoría de la *mecánica ondulatoria*, que es una de las maneras en que se presenta la Mecánica Cuántica. Corresponde mencionar que casi simultáneamente, Werner Heisenberg desarrolló un enfoque alternativo: la *mecánica matricial*. En la teoría de Heisenberg no se consideran ondas piloto; en su lugar se manejan las variables dinámicas como  $x$ ,  $p_x$ , etc., que se representan mediante matrices. Los aspectos cuánticos se introducen en dicha teoría por medio del principio de incerteza, que se expresa por medio de las propiedades de conmutación de las matrices. El principio de incerteza es en realidad *equivalente* al postulado de Broglie, y las teorías de Heisenberg y de Schrödinger son idénticas en contenido aunque de forma aparentemente muy distinta. Pero esto no fue comprendido en seguida, y en un primer momento hubo ácidas polémicas entre los sostenedores de una y otra, hasta que Schrödinger en 1928 demostró la equivalencia de ambas. Debido a que la teoría de Schrödinger se presta mejor para un tratamiento introductorio no entraremos en los detalles de la teoría de Heisenberg<sup>1</sup>.

### *La ecuación de Schrödinger*

Aunque el postulado de Broglie es correcto, no es todavía una teoría completa del comportamiento de una partícula, pues no se conoce la ecuación que rige la propagación de la onda piloto. Por eso pudimos analizar la propagación de la onda piloto únicamente en el caso de una partícula libre y no sabemos aún como tratar una partícula sometida a fuerzas. Falta, además, una relación cuantitativa entre la onda y la partícula, que nos diga de qué forma la onda determina la probabilidad de observar la partícula en un determinado lugar.

Pese a que el postulado de Broglie es consistente con la relatividad (restringida), Schrödinger se limitó a desarrollar una teoría no relativística<sup>2</sup>. Además abandonó el término “onda piloto” y llamó *función de onda* a la función  $\Psi(x,t)$  y a la onda en sí; nosotros usaremos esa terminología de ahora en más. En consecuencia Schrödinger adoptó como punto de partida las ecuaciones

$$\lambda = h / p \quad (7.1)$$

y

$$v = E / h \quad (7.2)$$

pero supuso que la energía está dada por la expresión no relativística

---

<sup>1</sup> El lector interesado los puede encontrar en el libro de Heisenberg ya citado en el Capítulo 6.

<sup>2</sup> Tenía buenas razones para ello. El desarrollo de la Mecánica Cuántica Relativística es mucho más complejo y difícil y sólo se pudo completar muchos años después. La razón fundamental es que en una teoría relativística consistente no se pueden introducir fuerzas (que implican acción a distancia) y además hay que tomar en cuenta los procesos de creación y aniquilación de materia (ver Capítulo 4). Esto implica que se tiene que cuantificar el campo electromagnético (y el que describe cualquier otro tipo de fuerzas que se quiera considerar) y los campos que describen las partículas.

$$E = p^2 / 2m + V \quad (7.3)$$

donde  $m$  es la masa en reposo. Esta diferencia en la definición de  $E$  cambia el valor de  $v$ . Pero cabe señalar que los experimentos de difracción que demuestran la validez de la (7.1), en realidad no dicen nada acerca de la (7.2). Además veremos que el valor de  $v$  no tiene importancia en la teoría de Schrödinger. Asimismo, la (7.3) da el valor correcto de la velocidad de grupo para una partícula libre ( $V = V_0 = \text{cte.}$ ), pues usando (7.2) resulta

$$\hbar\omega = \hbar^2 k^2 / 2m + V_0 \quad (7.4)$$

donde  $k = 2\pi / \lambda$  y  $\omega = 2\pi\nu$ , y por lo tanto

$$v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \hbar k / m = p / m = v \quad (7.5)$$

La ecuación que rige la propagación de las ondas de materia debe satisfacer entonces los siguientes requisitos:

- Debe ser consistente con las ecs. (7.1), (7.2) y (7.3), esto es con  $\hbar\omega = \hbar^2 k^2 / 2m + V$ .
- Debe ser lineal en  $\Psi(x, t)$ , para que podamos superponer funciones de onda y reproducir efectos de interferencia y difracción como los que observaron Davisson y Germer.
- El impulso de una partícula libre es constante; por lo tanto cuando  $V = V_0 = \text{cte.}$  la ecuación debe tener soluciones de onda viajera como vimos en el Capítulo 6.

Consideremos entonces una partícula libre. Para satisfacer el tercer requisito, la describiremos mediante una onda viajera  $\Psi_f$  que depende del argumento  $(kx - \omega t)$ . Puesto que para hacer aparecer los factores  $\omega$  y  $k^2$  de la ec. (7.4) hay que derivar la función de onda una vez respecto del tiempo y dos veces respecto de la coordenada, la ecuación buscada podría ser de la forma

$$\alpha\hbar \frac{\partial\Psi_f}{\partial t} = \frac{\beta\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\Psi_f}{\partial x^2} + V_0\Psi_f \quad (7.6)$$

donde  $\alpha$  y  $\beta$  son constantes a determinar. Como la (7.6) es lineal, satisface el segundo requisito. Es fácil ver que ondas viajeras del tipo  $\Psi_f = \cos(kx - \omega t)$  ó  $\Psi_f = \text{sen}(kx - \omega t)$  *no cumplen* con primer requisito, pues no se puede recoger en un factor común la dependencia espacial y temporal, como haría falta para obtener la (7.4). Pero con un poco de álgebra se ve que una combinación lineal del tipo  $\Psi_f = \cos(kx - \omega t) + \gamma\text{sen}(kx - \omega t)$  permite obtener la (7.4) si  $\gamma = \pm i$ ,  $\alpha = \gamma$  y  $\beta = -1$ . Lo usual es tomar  $\gamma = +i$ , luego  $\alpha = i$  y entonces obtenemos de la (7.6) la ecuación

$$i\hbar \frac{\partial\Psi_f}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\Psi_f}{\partial x^2} + V_0\Psi_f \quad (7.7)$$

que cumple los tres requisitos que estipulamos. La solución de onda viajera es pues de la forma

$$\Psi_f = \cos(kx - \omega t) + i\text{sen}(kx - \omega t) = e^{i(kx - \omega t)} \quad (7.8)$$

y como adelantamos en el Capítulo 6 es *necesariamente* compleja.

La ec. (7.8) se obtuvo para el caso especial  $V = V_0 = \text{cte.}$ . Vamos a *postular* que cuando  $V = V(x,t)$ , la ecuación diferencial que describe la función de onda tiene la misma forma. Se obtiene así la

*Ecuación de Schrödinger:*

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) \quad (7.9)$$

Como se ve, es una ecuación en derivadas parciales lineal y del segundo orden, y a diferencia de otras ecuaciones diferenciales de la física contiene el imaginario  $i$ . De resultados de eso *sus soluciones son necesariamente funciones complejas*.

La (7.9) vale para una dimensión espacial. En tres dimensiones la ecuación de Schrödinger es:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t) \quad (7.10)$$

donde  $\nabla^2$  es el operador Laplaciano.

### ***Interpretación de la función de onda***

La función de onda  $\Psi(x,t)$  es inherentemente compleja y por lo tanto *no se puede medir* con un instrumento real. Pero ésta es una característica deseable pues nos impide atribuir a la función de onda una existencia física como (por ejemplo) la de las olas de la superficie del agua. En realidad  $\Psi(x,t)$  no es más que un instrumento de cálculo que sólo tiene significado en el contexto de la teoría de Schrödinger de la que forma parte. Esto queda de manifiesto claramente si se considera que la función de onda *no aparece* en la teoría de Heisenberg, y sin embargo los resultados físicos de ambas teorías son *equivalentes*. Veremos más adelante otras consecuencias de estos hechos. Pero lo dicho no implica que la función de onda carece de interés físico. Veremos, en efecto, que *la función de onda contiene toda la información sobre la partícula asociada, compatible con el principio de incerteza*.

Para obtener esa información hay que relacionar  $\Psi(x,t)$  con las variables dinámicas de la partícula asociada. Como dijimos en el Capítulo 6, hay una relación entre la intensidad de  $\Psi(x,t)$  en un punto  $(x, t)$  y la densidad de probabilidad  $P(x,t)$  de encontrar a la partícula en el entorno de ese punto. Sin embargo, es obvio que no podemos igualar una cantidad compleja como  $\Psi(x,t)$  con  $P(x,t)$  que es una magnitud real. La relación correcta entre  $\Psi(x,t)$  y  $P(x,t)$  fue propuesta en 1926 por Max Born:

*Postulado de Born:*

si en el instante  $t$  se lleva a cabo una medida para ubicar la partícula descrita por la función de onda  $\Psi(x,t)$ , entonces la probabilidad  $P(x,t)dx$  de que el valor de  $x$  se encuentre entre  $x$  y  $x + dx$  es

$$P(x,t)dx = \frac{\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx}{\int_{\text{todo } x} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx} = \frac{|\Psi(x,t)|^2 dx}{\int_{\text{todo } x} |\Psi(x,t)|^2 dx} \quad (7.11)$$

donde  $\Psi^*(x,t)$  indica el complejo conjugado de  $\Psi(x,t)$ .

Para que el postulado de Born tenga sentido, la integral

$$N_{\Psi} \equiv \int_{\text{todo } x} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx \quad (7.12)$$

(que se denomina la *norma* de  $\Psi$ ) debe existir. En otras palabras, toda función de onda aceptable debe ser de cuadrado integrable, lo que implica que  $\Psi(x,t)$  debe tender a cero con suficiente rapidez para  $x \rightarrow \pm\infty$ . Se debe notar que las soluciones de onda viajera del tipo (7.8) *no* son de cuadrado integrable y por lo tanto *no* son funciones de onda aceptables. Sin embargo no las vamos a descartar pues a partir de ellas, mediante la integral de Fourier, se pueden formar paquetes que sí son de cuadrado integrable y por lo tanto funciones de onda aceptables. Volveremos más adelante sobre este tema.

En adelante vamos a suponer que la función de onda está *normalizada* de modo que la integral del cuadrado de su módulo (extendida a todo el dominio de la coordenada) es igual a la unidad:

$$N_{\Psi} = \int_{\text{todo } x} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx = \int_{\text{todo } x} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1 \quad (7.13)$$

cosa que podemos lograr siempre, pues la ecuación de Schrödinger es lineal y si  $\Psi'$  es una solución no normalizada, entonces

$$\Psi = \frac{\Psi'}{\sqrt{\int_{\text{todo } x} \Psi'^* \Psi' dx}} \quad (7.14)$$

es también solución y está normalizada. Además mostraremos en breve que si la función de onda está normalizada en un dado instante  $t$ , permanece normalizada en todo otro instante  $t'$ . En consecuencia podemos escribir la (7.11) como

$$P(x,t)dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx = |\Psi(x,t)|^2 dx \quad (7.15)$$

La cantidad  $\Psi^*\Psi = |\Psi|^2$  es siempre *real* y por lo tanto el postulado de Born no es inconsistente. Pero esto no prueba todavía la validez de dicho postulado, pues  $\Psi^*\Psi$  no es la única función real que se puede obtener a partir de  $\Psi$ . Sin embargo se puede dar un argumento de *plausibilidad* del modo siguiente. La  $\Psi$  satisface la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \quad (7.16)$$

Tomando el complejo conjugado de la (7.16) obtenemos

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + V\Psi^* \quad (7.17)$$

Ahora multiplicamos la (7.16) por  $\Psi^*$  y la (7.17) por  $\Psi$  y restamos para obtener

$$i\hbar \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \right) \quad (7.18)$$

que se puede poner en la forma

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) = -\frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \right] \quad (7.19)$$

Si ahora definimos la *corriente de probabilidad* como

$$J(x,t) \equiv \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \quad (7.20)$$

la (7.19) se escribe como

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial x} \quad (7.21)$$

Esta ecuación expresa la *conservación de la probabilidad*. En efecto, integrando la (7.21) entre  $x_1$  y  $x_2$  obtenemos

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} P(x,t) dx = J(x_1,t) - J(x_2,t) \quad (7.22)$$

que nos dice que la variación de la probabilidad de encontrar la partícula en el intervalo  $(x_1, x_2)$  está dada por el flujo neto de la corriente de probabilidad que entra en dicho intervalo.

Si extendemos el intervalo de integración a todo  $x$ , resulta

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} P(x,t) dx = \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) dx = \frac{dN_{\Psi}}{dt} = 0 \quad (7.23)$$

puesto que  $\Psi$  y  $\partial\Psi/\partial x$ , y entonces  $J$ , se anulan en  $x = \pm\infty$ . Por lo tanto la (7.23) nos dice que si la función de onda está normalizada en un dado instante  $t$ , permanece normalizada en todo otro instante  $t'$ .

### ***La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo***

Cuando  $V = V(\mathbf{r})$  no depende del tiempo, la ecuación de Schrödinger (7.10) admite soluciones separables de la forma

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r})\phi(t) \quad (7.24)$$

La soluciones de la forma (7.24) son una familia de soluciones particulares de la (7.10) que reviste particular interés, como veremos ahora.

Sustituyendo (7.24) en (7.10) y dividiendo por  $\psi(\mathbf{r})\phi(t)$  obtenemos

$$i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{d\phi(t)}{dt} = \frac{1}{\psi(\mathbf{r})} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \right) \quad (7.25)$$

El miembro izquierdo de la (7.25) depende solo de  $t$  y el miembro derecho depende solo de las variables espaciales  $\mathbf{r}$ . Por lo tanto ambos miembros deben ser iguales a una constante  $C$ , que se

denomina *constante de separación*, y entonces la ecuación de Schrödinger se separa en dos ecuaciones, una para  $\phi(t)$  y la otra para  $\psi(\mathbf{r})$ :

$$i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{d\phi(t)}{dt} = C \quad , \quad \frac{1}{\psi(\mathbf{r})} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \right) = C \quad (7.26)$$

La ecuación para  $\phi(t)$  se integra de inmediato. A menos de un factor constante, la solución es:

$$\phi(t) = e^{-iCt/\hbar} \quad (7.27)$$

que es una función compleja puramente oscilatoria con frecuencia  $\nu = C/h$ . Recordando que la (7.2) nos dice que  $\nu = E/h$ , donde  $E$  es la energía de la partícula, debemos identificar la constante de separación  $C$  con la energía total  $E$ . Luego la segunda de las (7.26) se escribe como la

*Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:*

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (7.28)$$

Esta ecuación determina la *dependencia espacial*  $\psi(\mathbf{r})$  de las funciones de onda separables del tipo (7.24). Como se ve es una ecuación del segundo orden, que no contiene factores imaginarios y por lo tanto sus soluciones *no* son necesariamente complejas. Sus soluciones  $\psi_E(\mathbf{r})$ , que dependen del valor de la constante de separación  $E$ , se denominan *autofunciones* (o *funciones propias*) de la energía, y los correspondientes valores de  $E$  se denominan *autovalores* (o *valores propios*) de la energía.

Finalmente, la función de onda se escribe como

$$\Psi_E(\mathbf{r}, t) = \psi_E(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar} \quad (7.29)$$

Veremos en seguida que al resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (7.28) sólo se obtienen soluciones aceptables para ciertos valores particulares de  $E$ . De esta forma aparece la cuantificación de la energía.

### ***Cuantificación de la energía en la teoría de Schrödinger***

Para ver de manera sencilla como aparece la cuantificación de la energía, consideremos las soluciones  $\psi_E(x)$  de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en el caso de una sola coordenada  $x$ . La (7.28) se escribe entonces

$$\frac{\hbar^2}{2m} \psi_{xx} = [V(x) - E]\psi \quad (7.30)$$

Para que una solución sea aceptable  $\psi$  y  $\psi_x$  deben ser uniformes, finitas y continuas para todo  $x$ , pues en caso contrario la función de onda  $\Psi$  violaría alguno de estos requisitos, y entonces la densidad de probabilidad o la corriente de probabilidad no estarían bien definidas en algún lugar. Si además  $E$  y  $V$  son finitos, entonces la (7.30) nos dice que  $\psi_{xx}$  es también finita.

Supongamos ahora que resolvemos la (7.30) para un potencial  $V(x)$  como se muestra en la Fig. 7.1, por ejemplo por integración numérica. Para eso comenzamos por asignar arbitrariamente un

valor de  $E$  (como el que se indica en la Fig. 7.1 con la recta horizontal). Vemos así que los puntos de retorno clásicos  $x'$  y  $x''$  (determinados por la condición  $E = V(x)$ ) dividen el eje  $x$  en tres regiones:  $x < x'$  (región I) y  $x > x''$  (región III), donde  $V(x) - E > 0$  y por lo tanto  $\psi_{xx} > 0$ , y  $x' < x < x''$  (región II), donde  $V(x) - E < 0$  y entonces  $\psi_{xx} < 0$ .

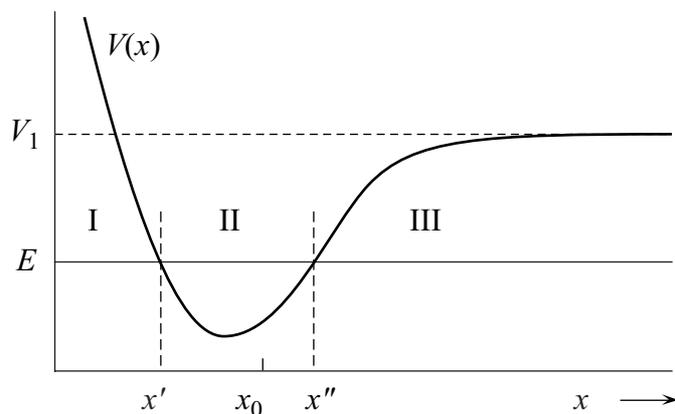


Fig. 7.1. Diagrama de la energía que muestra la relación entre la energía potencial y la energía total en un caso típico.

abajo donde  $\psi < 0$ . Entonces  $\psi$  se dispara hacia  $+\infty$  (si es positiva) como en la curva (a) de la Fig. 7.2, o hacia  $-\infty$  (si es negativa) como en la curva (b), y en ambos casos, tanto más rápidamente cuanto mayor es  $|\psi|$ . Por supuesto ninguno de estos comportamientos es aceptable. Solamente para un *único* valor  $\psi_x(x_0)_{III}$  de  $\psi_x(x_0)$  se encontrará una  $\psi$  que tenga un comporta-

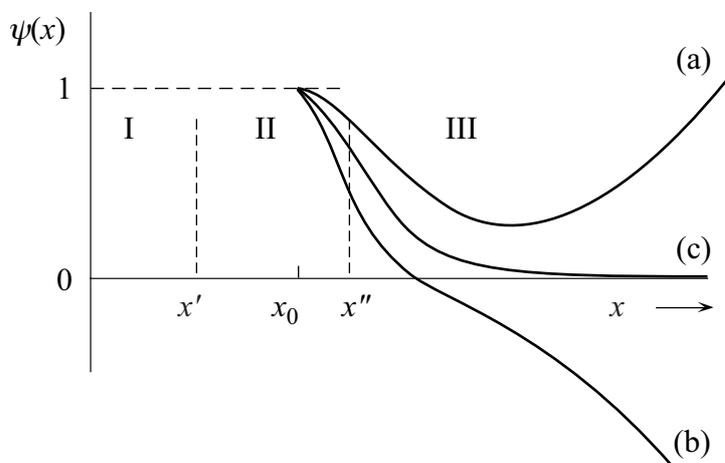


Fig. 7.2. Intentos de integración numérica de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

Comencemos por integrar la (7.30) en la dirección *positiva* de  $x$  a partir del punto  $x_0$ , asignando los valores iniciales de  $\psi(x_0)$  y  $\psi_x(x_0)$ . Dada la linealidad de la ecuación (7.30) podemos siempre fijar  $\psi(x_0) = 1$ , de modo que el único parámetro que podemos variar para obtener una solución aceptable es  $\psi_x(x_0)$ .

De acuerdo a lo dicho, en la región II  $\psi$  es cóncava hacia abajo donde  $\psi > 0$  y cóncava hacia arriba donde  $\psi < 0$ . Luego  $\psi$  oscila y se mantiene acotada.

En la región III, en cambio,  $\psi$  es cóncava hacia arriba donde  $\psi > 0$  y cóncava hacia

abajo donde  $\psi < 0$ . Entonces  $\psi$  se dispara hacia  $+\infty$  (si es positiva) como en la curva (a) de la Fig. 7.2, o hacia  $-\infty$  (si es negativa) como en la curva (b), y en ambos casos, tanto más rápidamente cuanto mayor es  $|\psi|$ . Por supuesto ninguno de estos comportamientos es aceptable. Solamente para un *único* valor  $\psi_x(x_0)_{III}$  de  $\psi_x(x_0)$  se encontrará una  $\psi$  que tenga un comporta-

miento aceptable como el de la curva (c). En este caso  $\psi$  tiende asintóticamente al eje  $x$ , y cuanto más se aproxima a él, tanto menor es su concavidad, de modo que no se vuelve hacia arriba. Cuando se resuelve numéricamente el problema,  $\psi_x(x_0)_{III}$  se determina por prueba y error. Al integrar la (7.30) desde  $x_0$  en la dirección *negativa* de  $x$ , en la región I sucede lo mismo que en la región III: en general  $\psi$  se dispara hacia  $+\infty$  o hacia  $-\infty$ , salvo para un *único* valor  $\psi_x(x_0)_I$  de  $\psi_x(x_0)$ , que da un comportamiento aceptable para  $x \rightarrow -\infty$ .

Usualmente tendremos  $\psi_x(x_0)_I \neq \psi_x(x_0)_{III}$ . Por lo tanto la (7.30) *no tiene soluciones aceptables* para el valor de  $E$  que hemos fijado, pues cualquiera sea el valor de  $\psi_x(x_0)$  que se elija,  $\psi$  diverge para  $x \rightarrow +\infty$ , o para  $x \rightarrow -\infty$ , o en ambos casos.

Sin embargo, al repetir el procedimiento con diferentes valores de  $E$ , se encuentra en general que existen algunos valores *especiales*  $E_1, E_2, E_3, \dots$  (ordenados de menor a mayor) para los cuales se cumple que  $\psi_x(x_0)_I = \psi_x(x_0)_{III}$ , y entonces la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo *tiene soluciones aceptables*  $\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \dots$ . La Fig. 7.3 muestra (cualitativamente) el aspecto de las tres primeras soluciones aceptables; se ve que en las regiones I y III el

comportamiento de todas ellas es semejante, mientras que en la región II se observa que  $\psi_1(x)$  no se anula nunca,  $\psi_2(x)$  tiene un nodo,  $\psi_3(x)$  tiene dos nodos, y así sucesivamente.

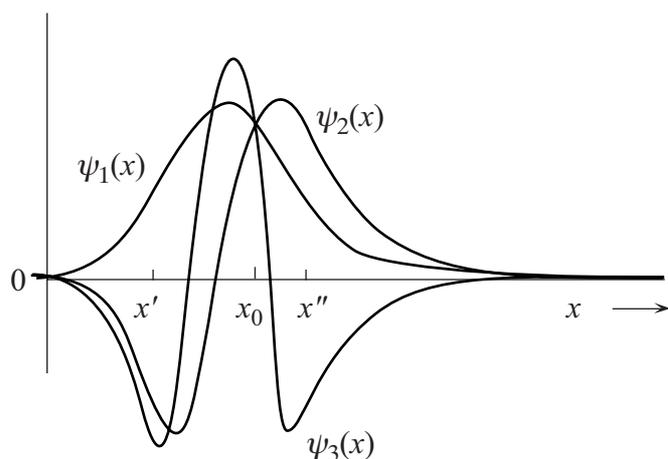


Fig. 7.3. Las tres primeras soluciones aceptables de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en un caso típico.

no son infinitesimales, porque las diferencias entre las derivadas segundas de  $\psi$  en  $x_0$  son *finitas*. Por lo tanto los valores permitidos de la energía están bien separados y forman un *conjunto discreto*.

Resulta entonces que *la energía de una partícula cuya energía potencial es independiente del tiempo está cuantificada*, pues sólo para un conjunto discreto de valores  $E_1, E_2, E_3, \dots$  de la energía (que se denominan *niveles de energía*) hay soluciones aceptables de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

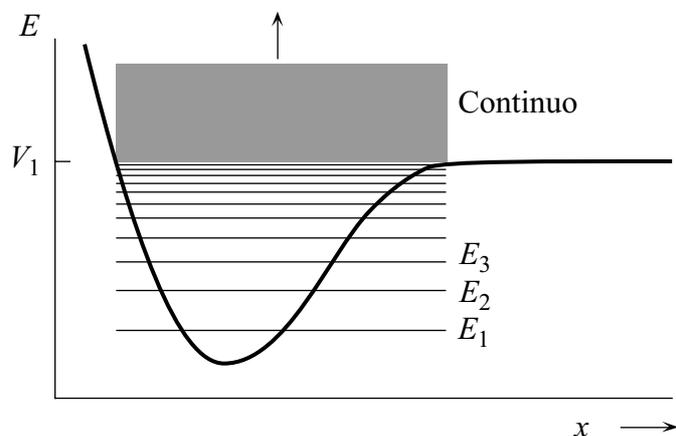


Fig. 7.4. Niveles permitidos de energía en un caso típico.

$V(x) - E < 0$ , la  $\psi$  oscila y se mantiene finita para  $x \rightarrow +\infty$ . Pero nuestra discusión anterior muestra entonces que para *cualquier* valor de  $E$  ( $E > V_1$ ) se puede *siempre* elegir un valor

De la Fig. 7.3 y de la ec. (7.30) se puede ver que  $E_2 > E_1$ . Consideremos el punto  $x_0$  donde  $\psi_1(x) = \psi_2(x)$ . De la Fig. se reconoce que

$$|(\psi_2)_{xx}|_{x_0} > |(\psi_1)_{xx}|_{x_0} \quad (7.31)$$

de modo que

$$|V(x_0) - E_2| > |V(x_0) - E_1| \quad (7.32)$$

y por lo tanto  $E_2 > E_1$ . De manera semejante se puede ver que  $E_3 > E_2$ , etc.

Debe quedar claro que las diferencias de energía  $(E_2 - E_1)$ ,  $(E_3 - E_2)$ , ... etc.

Lo dicho vale siempre y cuando el valor de la energía total sea tal que haya *dos* puntos de retorno. Si  $V(x)$  es tal como se muestra en la Fig. 7.1, esto es cierto si  $E < V_1$ , donde  $V_1$  es el valor límite que alcanza  $V$  cuando  $x \rightarrow +\infty$ ; en este caso hay en general un número *finito*<sup>3</sup> de niveles discretos de la energía para los cuales  $E < V_1$  (Fig. 7.4).

Cuando  $E > V_1$  la situación es diferente, pues hay *un único punto de retorno* (el punto  $x'$ ), que divide el eje  $x$  en las regiones I ( $x < x'$ ) y II ( $x > x'$ ). Puesto que en la región II se cumple que

<sup>3</sup> Puede haber excepciones cuando la energía potencial se aproxima muy lentamente al valor límite, porque en ese caso la separación entre los niveles de energía se hace muy pequeña a medida que nos aproximamos a  $V_1$ , y si eso ocurre puede haber *infinitos* niveles discretos de energía por debajo de  $V_1$ . Un ejemplo importante es el de la energía potencial Coulombiana, que tiende muy lentamente al valor límite  $V_1 = 0$ .

$\psi_x(x_0)_I$  de  $\psi_x(x_0)$ , tal que  $\psi$  tenga un comportamiento aceptable para  $x \rightarrow -\infty$ . Por lo tanto todos los valores  $E > V_1$  de la energía están permitidos. Se dice entonces que los niveles de energía forman un *continuo*. Debe quedar claro que si  $V(x)$  alcanza valores límite tanto a la izquierda como a la derecha, los valores permitidos de la energía forman un continuo para todas las energías mayores que el menor de esos valores límite.

Resumiendo, hemos llegado al siguiente resultado:

*Cuantificación de la energía en la teoría de Schrödinger:*

- si la relación entre  $V(x)$  y la energía total  $E$  es tal que una partícula clásica está confinada (ligada), los niveles de energía permitidos son discretos.
- si esa relación es tal que una partícula clásica no está ligada, la energía total puede tomar cualquier valor, de modo que los niveles de energía forman un continuo.

El conjunto de todos los niveles permitidos de la energía se denomina *espectro* de energía. En general, entonces, el espectro de energía de una partícula cuya energía potencial es  $V(x)$  tiene una parte discreta y una parte continua. Sólo cuando  $V(x)$  crece sin límite para  $x \rightarrow \pm\infty$  el espectro es completamente discreto. Veremos que las conclusiones a que hemos llegado a partir de nuestra discusión cualitativa se verifican en todos los casos específicos que estudiaremos.

### **Valores esperados y operadores diferenciales**

Consideremos una partícula y su función de onda  $\Psi(x,t)$ . Conforme al postulado de Born, la probabilidad de encontrar la partícula en el intervalo entre  $x$  y  $x + dx$  es:

$$P(x,t)dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx \quad (7.33)$$

Por consiguiente el valor medio de una serie de mediciones de  $x$  (realizadas al mismo tiempo  $t$ ), que designaremos con  $\bar{x}$  y llamaremos el *valor esperado* de  $x$ , está dado por

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} xP(x,t)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx \quad (7.34)$$

En la (7.34) hemos escrito los factores del integrando en un orden particular, por razones que resultarán claras en breve. Es fácil ver que el valor esperado de cualquier función  $f(x,t)$  de  $x$  y  $t$  (por ejemplo  $V(x,t)$ ) está dado por

$$\overline{f(x,t)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)f(x,t)\Psi(x,t)dx \quad (7.35)$$

puesto que las mediciones que se realizan para obtener el valor medio se hacen en el mismo tiempo  $t$ .

La coordenada  $x$  y funciones como  $V(x,t)$  son ejemplos de *variables dinámicas* que caracterizan el estado de la partícula. Otras variables dinámicas de interés son el impulso  $p$  y la energía total  $E$  (y en el caso de movimiento en tres dimensiones, las tres componentes del impulso  $\mathbf{p}$  y del momento angular  $\mathbf{L}$ ). Consideremos el impulso. Por analogía con (7.34) y (7.35) podríamos pensar que el valor esperado de  $p$  se calcule como

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) p \Psi(x,t) dx \quad (7.36)$$

El problema de la (7.36) es que para calcular la integral se precisaría expresar  $p$  en términos de  $x$  y  $t$ . En un problema clásico, una vez resueltas las ecuaciones del movimiento se puede siempre expresar  $p$  como función de  $x$  y  $t$ , pero *no* podemos hacer lo mismo en el caso cuántico, pues el principio de incerteza establece que  $p$  y  $x$  no se pueden conocer simultáneamente con exactitud. Luego hay que encontrar otra forma de expresar el integrando en términos de  $x$  y  $t$ . La forma que buscamos se puede inferir considerando el caso de una partícula libre, cuya función de onda (ec. 7.8) es<sup>4</sup>

$$\Psi_f = e^{i(kx - \omega t)} \quad (7.37)$$

Si derivamos respecto de  $x$  obtenemos  $\partial \Psi_f / \partial x = ik \Psi_f$ , que recordando la relación  $k = p / \hbar$  se puede escribir como

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi_f = p \Psi_f \quad (7.38)$$

La (7.38) indica que existe una relación entre la variable dinámica  $p$  y el *operador diferencial*  $-i\hbar \partial / \partial x$ :

$$p \leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (7.39)$$

Una relación semejante existe entre la energía  $E$  y el operador  $i\hbar \partial / \partial t$

$$E \leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (7.40)$$

pues la (7.37) nos dice que

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_f = E \Psi_f \quad (7.41)$$

Estas asociaciones no están limitadas al caso de la partícula libre. Consideremos por ejemplo la relación (7.3) que define la energía  $E$ :

$$E = p^2 / 2m + V \quad (7.42)$$

Si en esta relación reemplazamos las variables dinámicas por los operadores asociados resulta

---

<sup>4</sup> El lector podría objetar que usamos la función (7.37), que no es de cuadrado integrable. La objeción es correcta: el procedimiento riguroso es considerar un paquete de ondas de cuadrado integrable, pero casi monocromático. El cálculo es más laborioso, pero se llega al mismo resultado. Veremos en breve una forma más cómoda de proceder, basada en normalizar funciones como la (7.37) con la delta de Dirac.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \quad (7.43)$$

Esta ecuación entre operadores implica que para toda función de onda  $\Psi(x,t)$  se cumple que

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) \quad (7.44)$$

que es la ecuación de Schrödinger (7.9). Esto implica que *postular las relaciones (7.39) y (7.40) entre las variables dinámicas y los correspondientes operadores es equivalente a postular la ecuación de Schrödinger*. Esta fue en realidad la vía que siguió Schrödinger para obtener su ecuación, y es un método poderoso para obtener la ecuación de Schrödinger en casos más complicados que los que discutimos hasta ahora.

Aplicando la (7.39) en la (7.36) obtenemos la expresión del valor esperado del impulso:

$$\bar{p} = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} dx \quad (7.45)$$

y análogamente usando la (7.40) se obtiene el valor esperado de la energía

$$\bar{E} = i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} dx \quad (7.46)$$

Usando la (7.43) obtenemos también

$$\bar{E} = i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \right) \Psi(x,t) dx \quad (7.47)$$

En general, podemos calcular el valor esperado de cualquier variable dinámica  $f(x,p,t)$  como

$$\overline{f(x,p,t)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \hat{f}(x, -i\hbar \partial / \partial x, t) \Psi(x,t) dx \quad (7.48)$$

donde el operador  $\hat{f}(x,p,t)$  se obtiene reemplazando<sup>5</sup>  $p$  por el operador  $-i\hbar \partial / \partial x$  en la función  $f(x,p,t)$  que especifica la variable dinámica  $f$ .

Estos resultados muestran que la función de onda, además de determinar la densidad de probabilidad y la corriente de probabilidad como ya vimos, contiene mucha más información, pues por medio de la (7.48) nos permite calcular el valor esperado de *cualquier* variable dinámica. En realidad, la función de onda contiene *toda* la información que podemos llegar a obtener acerca de la partícula, habida cuenta del principio de incerteza.

---

<sup>5</sup> Hay que tomar ciertas precauciones, que se verán oportunamente, cuando en la expresión de  $f$  aparecen productos de dos o más variables dinámicas, ya que en general el producto de operadores no es conmutativo.

### ***Propiedades matemáticas de operadores lineales en espacios funcionales***

Como acabamos de ver, en la Mecánica Cuántica las variables dinámicas se representan por medio de operadores. Por lo tanto conviene repasar algunas propiedades de los operadores, que vamos a presentar sin pretensión de rigor matemático.

Al calcular la norma de la función de onda y los valores esperados de variables dinámicas nos encontramos con expresiones del tipo

$$\int_D \xi^* \eta d\tau \equiv (\xi, \eta) \quad (7.49)$$

que se suelen llamar *producto interno* o *producto escalar* de las funciones  $\xi$  y  $\eta$ , por analogía con el producto escalar ordinario de dos vectores. La integral se efectúa sobre el dominio  $D$  de las variables de que dependen las funciones. Por ejemplo, en las (7.45), (7.48) la variable de integración es  $x$  y la integral va de  $-\infty$  a  $+\infty$ ; en tres dimensiones podríamos tener  $d\tau = dx dy dz$  o bien  $d\tau = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$  (en este caso la integral sobre  $r$  va de 0 a  $\infty$ , la integral sobre  $\theta$  va de 0 a  $\pi$  y la integral sobre  $\phi$  va de 0 a  $2\pi$ ), u otras expresiones según el sistema de coordenadas usado. Para tener expresiones compactas usaremos la notación  $(\xi, \eta)$  para indicar el producto escalar. Daremos por sobreentendido que las funciones  $\xi, \eta, \zeta, \varphi, \dots$  etc. son de cuadrado integrable y satisfacen oportunas condiciones en el contorno de  $D$ , y por ahora supondremos que el dominio  $D$  de integración en (7.52) es finito. Más adelante veremos como proceder cuando  $D$  es infinito.

#### **Producto escalar, norma y ortogonalidad**

El *producto escalar* o *producto interno*  $(\xi, \eta)$  de dos funciones  $\xi$  y  $\eta$  (en este orden) es un número complejo y se cumple que

$$(\eta, \xi) = (\xi, \eta)^* \quad , \quad (\eta, a\xi + b\varphi) = a(\eta, \xi) + b(\eta, \varphi) \quad (7.50)$$

donde  $a, b$  son dos números complejos cualesquiera. La *norma*  $N$  de una función se define como

$$N \equiv (\xi, \xi) \quad (7.51)$$

La norma es siempre real y positiva, salvo para la función nula  $\xi = 0$  para la cual  $N = 0$ . Una función se dice *normalizada* cuando su norma es 1:

$$(\xi, \xi) = 1 \quad (7.52)$$

Dos funciones  $\xi$  y  $\eta$  se dicen *ortogonales* cuando su producto escalar es nulo:

$$(\xi, \eta) = 0 \quad (7.53)$$

#### **Sistema ortonormal**

Una serie de Fourier es un caso especial de *expansión de una función arbitraria en serie de funciones ortogonales*. Pasaremos revista a las propiedades generales de esas expansiones.

Sea un conjunto finito (o infinito numerable) de funciones

$$\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots \quad (7.54)$$

definidas en  $D$ . El conjunto se dice *ortonormal* (ortogonal y normalizado) si se cumple

$$(\varphi_i, \varphi_j) = \delta_{ij} \quad \text{para todo } i, j \quad (7.55)$$

Queremos representar una función  $f$  arbitraria de cuadrado integrable definida en  $D$  mediante una serie de las  $\varphi_j$ . Primero supongamos que la serie tiene un número finito  $n$  de términos de la forma

$$f'_n = \sum_{j=1}^n a_j \varphi_j \quad (7.56)$$

donde los  $a_j$  son coeficientes numéricos. Usaremos como criterio de la “bondad” de la aproximación el de minimizar la norma de la diferencia entre  $f$  y  $f'_n$ , (el error standard); pediremos entonces que

$$M_n = (f - f'_n, f - f'_n) \quad (7.57)$$

sea mínimo. Con algunos cálculos que omitimos por brevedad se encuentra que el mínimo se tiene cuando

$$a_j = (\varphi_j, f) \quad (7.58)$$

y en ese caso el error standard es

$$M_n = (f, f) - \sum_{j=1}^n |a_j|^2 \quad (7.59)$$

Puesto que por definición  $M_n$  es no negativo, se obtiene la *desigualdad de Bessel*

$$(f, f) \geq \sum_{j=1}^n |a_j|^2 \quad (7.60)$$

Si el conjunto (7.54) es infinito, podríamos esperar que al tomar  $n$  más y más grande se obtenga una serie que represente cada vez mejor a  $f$ . Esta expectativa intuitiva es correcta, siempre y cuando el conjunto ortonormal (7.54) sea *completo*. El sistema (7.54) se dice *completo* cuando para cada número positivo  $\varepsilon$  arbitrariamente pequeño existe un entero finito  $n_0 = n_0(\varepsilon)$ , tal que para todo  $n > n_0$  se cumple que  $M_n < \varepsilon$ . En ese caso, se dice que la serie

$$f' = \sum_{j=1}^{\infty} a_j \varphi_j \quad , \quad (7.61)$$

con los coeficientes dados por la (7.58), *converge en la media* a  $f$ , y se escribe

$$f = \sum_{j=1}^{\infty} a_j \varphi_j \quad (7.62)$$

La igualdad (7.62) se debe interpretar que significa que la serie del miembro derecho es igual a *f casi en todas partes*<sup>6</sup> del dominio  $D$ . En general no es trivial demostrar que un dado conjunto ortonormal es completo. Nosotros vamos a *suponer*, cuando sea necesario, que los sistemas ortonormales que nos interesan son efectivamente completos.

### El método de ortogonalización de Schmidt

Hasta ahora hemos supuesto que el sistema ortonormal  $\varphi_j$  está asignado. En realidad para hacer expansiones alcanza con que las funciones del sistema sean linealmente independientes. Pero es más cómodo trabajar con un sistema ortonormal. Por lo tanto es útil tener un procedimiento sistemático para ortogonalizar un conjunto de funciones  $f_j$  linealmente independientes. A continuación describimos el método de Schmidt.

Sea  $N_1$  la norma de  $f_1$ . La primera función ortonormal es entonces

$$\varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{N_1}} f_1 \quad (7.63)$$

La segunda función ortonormal es

$$\varphi_2 = \frac{1}{\sqrt{N_2}} [f_2 - \varphi_1(\varphi_1, f_2)] \quad (7.64)$$

donde  $N_2$  es la norma de la función encerrada por el corchete de la (7.64).

La tercera función ortonormal es

$$\varphi_3 = \frac{1}{\sqrt{N_3}} [f_3 - \varphi_1(\varphi_1, f_3) - \varphi_2(\varphi_2, f_3)] \quad (7.65)$$

donde  $N_3$  es la norma de la función encerrada por el corchete de la (7.65).

Continuando de esta manera se pueden ortogonalizar y normalizar sucesivamente todas las  $f_j$ .

### Función delta de Dirac y relaciones de clausura

La función *delta de Dirac*  $\delta(x - a) = \delta(a - x)$  es una función par definida por:

$$\bullet \quad \delta(x - a) = 0 \quad \text{para } x \neq a \quad (7.66)$$

$$\bullet \quad \int_b^c \delta(x - a) dx = \begin{cases} 1 & \text{si } a \text{ está dentro del intervalo } (b, c) \\ 0 & \text{si } a \text{ está fuera del intervalo } (b, c) \end{cases} \quad (7.67)$$

La función delta de Dirac se puede definir como la forma límite de una curva con un pico agudo que se hace más y más alto y más y más angosto, de forma tal que el área debajo de la curva se mantiene constante. Por ejemplo se puede usar una Gaussiana, y entonces

$$\delta(x - a) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon \sqrt{\pi}} e^{-\frac{(x-a)^2}{\varepsilon^2}} \quad (7.68)$$

---

<sup>6</sup> Se dice que dos funciones  $f_1$  y  $f_2$  son iguales *casi en todas partes* cuando difieren en un conjunto de puntos de medida nula.

Sea  $f(x)$  es una función arbitraria de  $x$  definida en el entorno de  $x = a$  (el intervalo de integración incluye  $x = a$ ); es fácil entonces demostrar las siguientes propiedades de integrales que contienen funciones delta:

- (I):

$$\int f(x)\delta(x-a)dx = f(a) \quad (7.69)$$

- (II) si  $\delta^{(n)}(x-a)$  indica la derivada  $n$ -ésima de  $\delta(x-a)$  respecto de su argumento, entonces

$$\int f(x)\delta^{(n)}(x-a)dx = (-1)^n f^{(n)}(a) \quad (7.70)$$

- (III) si  $y = y(x)$ , entonces

$$\int f(x)\delta(y(x))dx = \sum_i \frac{f(x_i)}{|y'(x_i)|} \quad (7.71)$$

donde los puntos  $x_i$  son las raíces reales de  $y(x) = 0$  en el intervalo de integración. La ec. (7.71) es equivalente a decir que

$$\delta(y(x)) = \sum_i \frac{\delta(x-x_i)}{|y'(x_i)|} \quad (7.72)$$

La función delta se puede definir en más de una dimensión. Por ejemplo

$$\delta(\mathbf{r}-\mathbf{a}) = \delta(x-a_x)\delta(y-a_y)\delta(z-a_z) \quad (7.73)$$

Retornamos ahora a nuestra discusión de las expansiones ortonormales. Escribimos la (7.62) para una función arbitraria  $f$ :

$$f(x) = \sum_{j=1}^{\infty} a_j \varphi_j(x) = \sum_{j=1}^{\infty} (\varphi_j^*, f) \varphi_j(x) = \int_D \left\{ \sum_{j=1}^{\infty} \varphi_j(x) \varphi_j^*(x') f(x') dx' \right\} \quad (7.74)$$

donde hemos intercambiado el orden de suma e integral. Comparando la (7.74) con la (7.69) obtenemos que

$$\sum_j \varphi_j(x) \varphi_j^*(x') = \delta(x' - x) \quad (7.75)$$

La (7.75) se denomina *relación de clausura* o de *completitud*, y se cumple para todo sistema ortonormal completo. La (7.75) se denomina a veces “teorema de expansión” debido al siguiente teorema: si  $f$  y  $g$  son funciones arbitrarias y las  $\varphi_j$  forman un sistema completo, se cumple

$$(f, g) = \sum_j (f, \varphi_j)(\varphi_j, g) \quad (7.76)$$

La demostración se basa en la definición del producto escalar y en la relación de completitud (7.75).

## Integrales de Fourier

Hasta ahora hemos considerado expansiones en términos de un sistema ortonormal  $\varphi_j$  que consiste de una infinidad numerable de funciones. Cuando el dominio  $D$  es infinito el índice discreto  $j$  se convierte en un parámetro continuo  $k$ . También puede suceder que aparezca una combinación de valores discretos e intervalos continuos del índice. En general, la transición matemática rigurosa desde un dominio finito con un índice discreto a un dominio infinito con un parámetro continuo no es trivial. Nosotros indicaremos los pasos formales para el caso de la integral de Fourier, sin pretensión de rigor<sup>7</sup>.

Consideremos la integral de Fourier

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{ikx} dk \quad (7.77)$$

y la transformación inversa

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (7.78)$$

En estas fórmulas las variables continuas  $k$  y  $x$  están en pie de igualdad, pero para establecer una conexión con nuestra anterior discusión podemos observar que la (7.77) es análoga a la expansión en serie (7.62) mientras que la (7.78) es análoga a la expresión del coeficiente (7.58) de la serie, donde la función ortonormal  $\varphi_j(x)$  se ha reemplazado por

$$\varphi(k, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \quad (7.79)$$

Es fácil verificar que la *ortonormalidad* de las funciones (7.79) se expresa como

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(k-k')x} dx = \delta(k - k') \quad (7.80)$$

Análogamente, combinando la (7.77) con la (7.78) obtenemos la *relación de clausura* o de *completitud*:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-x')} dk = \delta(x - x') \quad (7.81)$$

Un resultado importante de las integrales de Fourier es el teorema de Parseval, que establece que si  $f$  y  $g$  son dos funciones cuyas transformadas de Fourier son  $F$  y  $G$ , se cumple que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x) g(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} F^*(k) G(k) dk \quad (7.82)$$

---

<sup>7</sup> El lector interesado en el detalle matemático puede consultar, por ejemplo, el libro de E. C. Titchmarsh *Introduction to the Theory of Fourier Integrals* Oxford Univ. Press, 1948.

Una demostración no rigurosa de la (7.82) se obtiene sustituyendo las integrales (7.77) en el primer miembro de la (7.82), intercambiando el orden de integración, y usando la relación de ortonormalidad (7.80).

Si en (7.82) ponemos  $g = f$  resulta

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)f(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} F^*(k)F(k)dk \quad (7.83)$$

que muestra que la norma de  $f(x)$  en el dominio infinito de  $x$  es igual a la norma de  $F(k)$  en el dominio infinito de  $k$ . Esta forma especial del teorema de Parseval es el equivalente para la integral de Fourier de la (des)igualdad de Bessel (pues la ec. (7.59) se convierte en una igualdad para un sistema completo).

Este resultado justifica emplear funciones que no se pueden normalizar a la unidad (como las ondas planas) para construir paquetes. En efecto, si las funciones del sistema ortonormal se normalizan a la delta de Dirac, la (7.83) garantiza que el paquete de ondas está normalizado si  $F(k)$  es de cuadrado integrable.

### Operadores lineales

Un operador  $A$  se define como un ente que actúa sobre una función  $\xi$  para producir otra función  $\eta$ :

$$\eta = A\xi \quad (7.84)$$

Nosotros estamos interesados únicamente en operadores lineales, que cumplen las condiciones

$$A(c\xi) = cA(\xi) \quad , \quad A(\xi + \eta) = A\xi + A\eta \quad (7.85)$$

El producto de dos operadores  $A$  y  $B$  se define como

$$AB\xi = A(B\xi) \quad (7.86)$$

Debe notarse que en general

$$AB\xi \neq BA\xi \quad (7.87)$$

a menos que  $A$  y  $B$  conmuten. El *conmutador* de dos operadores se indica con  $[A, B]$  y se define como

$$[A, B] = AB - BA \quad (7.88)$$

### Núcleo de un operador lineal

Un operador lineal  $K$  definido por

$$g = Kf \quad (7.88)$$

se puede escribir en forma explícita como

$$g(x) = \int_D k(x, x') f(x') dx' \quad (7.89)$$

La función  $k(x, x')$  se denomina *núcleo* del operador  $K$ . Pese a que la (7.89) tiene el aspecto de una ecuación integral lineal que no incluye operadores diferenciales, es fácil ver que con la ayuda de la función delta de Dirac se obtienen operadores diferenciales. Por ejemplo si

$$K = \frac{d^2}{dx^2} + \alpha^2 \quad (7.90)$$

entonces

$$k(x, x') = \left( \frac{d^2}{dx^2} + \alpha^2 \right) \delta(x - x') \quad (7.91)$$

### Operador adjunto

El operador  $K^\dagger$  adjunto de  $K$  se define como el operador que cumple

$$(\xi, K\eta) = (K^\dagger \xi, \eta) \quad (7.92)$$

para todo par de funciones  $\xi$  y  $\eta$  arbitrarias. Usando la (7.89) encontramos que el *núcleo adjunto*  $k^\dagger(x, x')$  está dado por

$$k^\dagger(x, x') = [k(x', x)]^* \quad (7.93)$$

### Operadores Hermitianos

Un operador  $K$  para el cual  $K^\dagger = K$  se dice *Hermitiano* o *autoadjunto*. Para un operador autoadjunto el producto escalar  $(f, Kf)$  es real para cualquier  $f$ , pues:

$$(f, Kf) = (K^\dagger f, f) = (Kf, f) = (f, Kf)^* \quad (K \text{ Hermitiano}) \quad (7.94)$$

Esta propiedad de los operadores Hermitianos es de fundamental importancia, pues una hipótesis básica de la Mecánica Cuántica es que los valores esperados de las magnitudes observables se expresan en la forma  $(f, Kf)$  y son siempre reales. Por lo tanto *todos los observables deben estar representados por operadores Hermitianos*.

Un operador que cumple  $K^\dagger = -K$  se dice *anti-Hermitiano*.

### Autovalores y autofunciones de un operador Hermitiano

El problema de autovalores para un operador lineal  $K$  se expresa como

$$K\varphi = \lambda\varphi \quad (7.95)$$

Las soluciones de (7.95) existen sólo para ciertos valores particulares de  $\lambda$ , indicados con  $\lambda_j$ , que se denominan *autovalores* o *valores propios* del operador  $K$ . Las correspondientes soluciones  $\varphi_j(x)$  se denominan *autofunciones* o *funciones propias* de  $K$ . Un ejemplo lo constituyen las

soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, que son las autofunciones del operador que representa la energía total de un sistema cuántico. El conjunto de autovalores de  $K$  se denomina el *espectro* de  $K$ .

Por lo dicho, los autovalores y autofunciones de  $K$  cumplen que

$$K\varphi_j = \lambda_j\varphi_j \quad (7.96)$$

Una propiedad muy importante de los operadores Hermitianos es que *todos sus autovalores son reales*. Para demostrarlo basta tomar el producto escalar de la (7.96) por  $\varphi_j$ :

$$(\varphi_j, K\varphi_j) = \lambda_j(\varphi_j, \varphi_j) \quad (7.97)$$

Puesto que  $(\varphi_j, K\varphi_j)$  y  $(\varphi_j, \varphi_j)$  son ambos reales,  $\lambda_j$  es real. Vale también la propiedad recíproca, esto es, un operador todos cuyos autovalores son reales es Hermitiano.

Vamos a mostrar ahora que las autofunciones que corresponden a diferentes autovalores son ortogonales. Para ver esto, consideremos dos autofunciones  $\varphi_i$  y  $\varphi_j$  que satisfacen

$$K\varphi_i = \lambda_i\varphi_i \quad , \quad K\varphi_j = \lambda_j\varphi_j \quad (7.98)$$

Ahora tomamos el producto escalar de  $\varphi_j$  (a la izquierda) por la primera de estas ecuaciones y el producto escalar de la segunda ecuación por  $\varphi_i$  (a la derecha) y restamos:

$$(\varphi_j, K\varphi_i) - (K\varphi_j, \varphi_i) = (\lambda_i - \lambda_j^*)(\varphi_j, \varphi_i) \quad (7.99)$$

Puesto que  $K$  es Hermitiano el primer miembro de la (7.99) se anula y como  $\lambda_j$  es real obtenemos

$$0 = (\lambda_i - \lambda_j)(\varphi_j, \varphi_i) \quad (7.100)$$

Las condiciones de ortogonalidad (7.100) muestran que las autofunciones correspondientes a diferentes autovalores son ortogonales. En el caso que se presente degeneración, esto es que a un autovalor le correspondan dos o más autofunciones, siempre se las puede ortogonalizar por el método que indicamos antes.

En consecuencia de lo anterior, *a partir de las autofunciones de un operador Hermitiano es siempre posible construir un sistema ortonormal* (de ser necesario ortogonalizando las autofunciones correspondientes a los autovalores degenerados). Surge entonces el problema de la completitud de ese sistema. La completitud puede ser difícil de probar rigurosamente para los operadores de la Mecánica Cuántica, aunque por razones físicas parece plausible que se cumpla y no se conocen hasta ahora excepciones. Por lo tanto nosotros vamos a suponer que *toda variable dinámica u observable está representado por un operador Hermitiano cuyas autofunciones forman un sistema ortonormal completo*.