

Resumen I1 - Física Cuántica I

- Función de onda: $\psi(\vec{x}, t) \in \mathbb{C}$ tal que $|\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x$ densidad de probabilidad. Es decir:

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x = 1$$

- Medir la función de onda, determinar la partícula, es decir colapso de la función de onda a δ .
- Ortonormalidad:

$$\int \varphi_n(x) \varphi_m^*(x) dx = \delta_{nm}$$

- Completitud:

$$\sum_n \varphi_n^*(x') \varphi_n(x) dx = \delta(x - x')$$

Así:

$$\begin{aligned} f(x) &= \int f(x') \delta(x - x') dx' \\ &= \int f(x') \sum_n \varphi_n^*(x') \varphi_n(x) dx' \\ &= \sum_n \underbrace{\left[\int \varphi_n^*(x') f(x') dx' \right]}_{C_n} \varphi_n(x) \\ &= \sum_n C_n \varphi_n(x) \end{aligned}$$

- Conmutador: $[\hat{A}, \hat{B}]f = \hat{A}\hat{B}f - \hat{B}\hat{A}f$. Recordar que

$$[x, p] = i\hbar I$$

Aparecen relaciones importantes de la física moderna, Einstein con su efecto fotoeléctrico logra definir como partículas la luz con:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad , \quad k_x = \frac{2\pi}{\lambda_x} \quad , \quad E = \hbar \omega$$

De Broglie hace el análogo a la materia y obtiene el comportamiento ondulatorio de la materia, así:

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar} = \frac{m\vec{v}}{\hbar} \quad , \quad E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Así De Broglie crea la onda asociada a cada partícula:

$$\psi(\vec{x}, t) = \psi_0 \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\vec{p} \cdot \vec{x} - \frac{p^2}{2m} t \right) \right] = \psi_0 e^{-iEt/\hbar} e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}/\hbar}$$

Como la función de onda es una distribución de probabilidad tenemos lo clásico: esperanza, desviación estándar, función cualquiera, operador, etc.

$$E(x) = \langle x \rangle = \int \psi x \psi^* dx \quad , \quad V(x) = \Delta x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

Podemos aplicar el operador $p = -i\hbar \frac{d}{dx}$:

$$\langle p \rangle = \int \psi \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi^*}{dx} dx$$

Ecuación de Schrodinger: La ecuación mas importante es tiempo dependiente, la satisfacen las ondas de De Broglie (con $V \equiv 0$).

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) \psi} \quad (1)$$

Definimos así el Hamiltoniano H como:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x)$$

la ecuación se transforma en:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

Por otro lado como sabemos que $\int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^2 dx = 1$, esto implica que la derivada de lo anterior es 0. Básicamente esto se cumple si la función $|\psi|^2$ decae lo suficientemente rápido ($1/r^3$). En un volumen si usamos el Teorema de la divergencia podemos hacer lo siguiente:

$$\frac{d}{dt} \int_V |\psi|^2 d^3x = \int_{\partial V} \vec{J} \cdot d\vec{S}$$

donde

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2im} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$$

es la corriente de probabilidad. Notar que es 0 si ψ es real.

Transformada de Fourier: Si tenemos nuestra solución definida en el dominio de la posición x podemos pasar al dominio del momentum obteniendo la transformada de Fourier. Así:

$$\varphi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \psi(\vec{x}) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar} d^3x$$

y análogamente:

$$\psi(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \varphi(\vec{p}) e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar} d^3p$$

Luego por el teorema de Parseval-Plancherel tenemos:

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^2 d^3x = \int_{\mathbb{R}^3} |\varphi|^2 d^3p = 1$$

lo que implica que $|\varphi(p)|^2$ es también una distribución de probabilidad relacionada con encontrar a la partícula con ese momento p .

Solución de (1) con estados estacionarios: Básicamente podemos construir soluciones con un valor bien definido de energía, es decir asumiendo que la función de onda tiene un comportamiento temporal ya definido dado por De Broglie:

$$\psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

lo anterior implica la ecuación de Schrodinger tiempo independiente para estados estacionarios:

$$H\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x) \right) \psi = E\psi \quad (2)$$

Es decir tenemos la ecuación de autovalores (autovalores de energía) para H y autofunciones (autoestados de energía). Dado que el teorema de Parseval asegura en Fourier que:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

lo anterior puede ser transformado a

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

lo que implica que si E esta determinado, su desviación estandar es 0, y por ende esta completamente indeterminado el tiempo. De hecho esto también se puede notar al ver que $|\psi(x, t)|^2$ no depende de t si su dependencia temporal es exponencial compleja.

Potenciales unidimensionales: Básicamente lo que sigue es resolver la ecuación de Schrodinger para estados estacionarios. Tenemos los casos clásicos.

1. **Caja de potencial** ($0 \leq x \leq a$): básicamente dentro de la caja su potencial es 0, y fuera su potencial es infinito, lo que impide al electrón estar fuera de la caja. Al resolver la ecuación (2) e imponer las condiciones de bordes (continuidad en 0 y a) obtenemos los autoestados de energía y autovalores de energía:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad , \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

que son funciones ortonormales y forman un espacio completo. Lo que permite conocer por completo la función de onda usando ortogonalidad si conocemos la condición inicial del sistema. Pues:

$$\psi(x, 0) = \sum_n A_n \psi_n(x) \quad \longrightarrow \quad A_n = \int \psi(x, 0) \psi_n^*(x) dx$$

y luego la función de onda completa es:

$$\psi(x, t) = \sum_n A_n \psi_n(x) e^{-iEt/\hbar}$$

con E el autovalor de energía determinado en el problema.

2. **Potencial escalón:** El problema es $V = 0$ si $x < 0$ y $V = V_0$ si $x \geq 0$. Este problema consiste en resolverlo suponiendo casos, si $E > V_0$ y si $0 < E < V_0$. Para el primer caso determina soluciones sinusoidales para ambos casos, así:

$$\psi_1 = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad x < 0$$

donde la primera exponencial es la onda transmitida y la segunda la onda reflejada. Y para el otro caso:

$$\psi_2 = Te^{iqx} \quad x \geq 0$$

Donde no hay otra componente pues se asume que la onda proviene desde $-\infty$. Aquí las condiciones para k y q están determinadas por la ecuación de Schrodinger, así:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad , \quad q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$$

La solución para este problema si imponemos $A = 1$ se encuentra usando las condiciones de borde en $x = 0$ que son continuidad de $\psi(0)$ y su derivada $\psi'(0)$.

Para el segundo caso, tendremos que q es imaginario y por lo tanto ψ_2 es una exponencial real que decae (la otra no se pone pues la función de onda no debe explotar cuando $x \rightarrow \infty$.)

3. **Efecto túnel:** Básicamente el problema consiste en suponer que el potencial es 0 en todo x excepto en una región entre $-a \leq x \leq a$ donde hay un potencial V_0 . La gracia de esto es que si suponemos que el sistema tiene energía $E < V_0$ clásicamente la partícula no puede pasar la región de potencial V_0 . Pero en cuántica, la partícula si transmite. Esencialmente habrán 3 regiones, para $x < -a$ tenemos $\psi_1 = Ne^{ikx} + Re^{-ikx}$ con la misma interpretación anterior. para $-a < x < a$ tenemos $\psi_2 = Ae^{qx} + Be^{-qx}$ y para $x > a$ tenemos $\psi_3 = Te^{ikx}$. Así si imponemos $N = 1$, podemos encontrar el factor de transmisión T si imponemos las condiciones de borde (continuidad y continuidad de la derivada de ψ en $-a$ y a) obteniéndose:

$$T = e^{-2ika} \frac{2kq}{2kq \cosh(2qa) + i(k^2 - q^2) \sinh(2qa)}$$

Es importante notar que no es posible encontrar la partícula dentro de la barrera de potencial, y por otro lado podemos hacer una relación con el tiempo medio que demoraría en cruzar. Pues $|T|^2$ esta relacionado con la probabilidad de cruzar, entonces $1/|T|^2$ esta relacionado con la vida media. Así como clásicamente $p^2/2m = E \rightarrow v = \sqrt{2E/m}$ podemos conocer su velocidad y con esto podemos determinar el tiempo de vida media como

$$\tau = 2 \frac{a}{v} \frac{1}{|T|^2}$$

donde a es el espacio donde puede rebotar la partícula antes de cruzar.

4. **Delta de Dirac:** En el potencial existe una delta ubicada en un punto a , digamos $V(x) = \lambda\delta(x - a)$ con λ una constante de normalización. Básicamente para resolver esto, se resuelve la ecuación (2) para $x < a$ y $x > a$, y luego imponemos condiciones de continuidad, y la condición de discontinuidad de la derivada. Así si integramos (2) en un intervalo $a - \varepsilon, a + \varepsilon$ nos queda:

$$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \frac{-\hbar^2}{2m} \psi'' + \lambda\delta(x - a)\psi dx = \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} E\psi dx$$

Si hacemos $\varepsilon \rightarrow 0$ la parte derecha da 0 por la continuidad de ψ . Por TFC podemos integrar la parte izquierda y por $\delta(x - a)$ nos queda evaluada $\psi(a)$. Así:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi'(a + \varepsilon) - \psi'(a - \varepsilon)) + \lambda\psi(a) = 0 \quad \longrightarrow \quad \boxed{\psi'(a^+) - \psi'(a^-) = \frac{2m}{\hbar^2} \lambda\psi(a)}$$

5. **Oscilador Armónico:** El potencial de este problema es

$$V(x) = \frac{kx^2}{2}$$

La solución a este problema no es trivial y esta dada por los autoestados de energía:

$$\psi_n(y) = e^{-y^2/2} H_n(y)$$

donde H_n son los polinomios de Hermite. En este caso

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

la adimensionalización de x . Por otro lado

$$\omega = \frac{k}{m}$$

Los autovalores de energía están dados por:

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

y nuevamente las soluciones son un conjunto completo. Luego la solución final a este problema es:

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n e^{-y^2/2} H_n(y) e^{-iEt/\hbar}$$

Con A_n constantes por determinar usando la condición inicial $\psi(x, 0)$ y la ortogonalidad de los polinomios de Hermite.

6. **Potenciales Periódicos:** Aquí tenemos que $V(x) = V(x + a)$. Si definimos el operador D_a como aquel que desplaza la función en a . Es decir $D_a f(x) = f(x + a)$ podemos probar que $[D, H] = 0$ para los H con V periódicos. Lo anterior implica que los autovectores de H son los mismos que D_a . La representación para D_a es:

$$D_a = e^{a \frac{d}{dx}} = e^{iap/\hbar}$$

Así el teorema de Bloch asegura que la solución $\psi(x)$ será de la forma:

$$\psi(x) = e^{iqx} U(x)$$

donde $U(x)$ tiene la misma periodicidad que $V(x)$. donde e^{-iqx} es un autovalor de D_a .

7. **Potenciales Pares:** Al igual que lo anterior se puede probar que el operador paridad P tal que $Pf(x) = f(-x)$ tiene conmutador 0 con H si V es par. El Hamiltoniano nos asegura que si $\psi(x)$ es solución entonces $\psi(-x)$ lo es, lo que nos permite generar soluciones con paridad definida:

$$\psi^+(x) = \frac{1}{2}(\psi(x) + \psi(-x)) \quad , \quad \psi^-(x) = \frac{1}{2}(\psi(x) - \psi(-x))$$

donde ψ^+ es par y ψ^- es impar (notar que solo generaremos nuevas funciones con paridad definida si es que $\psi(x)$ no tiene paridad definida). Además los autovalores de P son 1 y -1 (para ψ^+ y para ψ^- respectivamente).

Resumen I2 - Física Cuántica I

Formalismo Matemático: Definimos a \mathcal{F} un subespacio de L^2 (funciones cuadrado integrables) donde \mathcal{F} es el conjunto de funciones de onda. Donde claramente es un espacio vectorial con todas sus propiedades asociadas:

- Si $\psi_1(r), \psi_2(r) \in \mathcal{F} \rightarrow \psi = \lambda_1\psi_1(r) + \lambda_2\psi_2(r) \in \mathcal{F}$ donde $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$
- El producto interno

$$(\varphi, \psi) = \int d^3x \varphi^*(r)\psi(r)$$

con las propiedades usuales de:

- $(\varphi, \psi) = (\psi, \varphi)^*$
 - $(\varphi, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\varphi, \psi_1) + \lambda_2(\varphi, \psi_2)$
 - $(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2, \varphi) = \lambda_1^*(\psi_1, \varphi) + \lambda_2^*(\psi_2, \varphi)$
 - La desigualdad de Schwarz: $|(\psi, \varphi)|^2 \leq (\psi, \psi)(\varphi, \varphi)$
- Norma:

$$(\psi, \psi) = \int d^3x |\psi|^2$$

Operadores Lineales Hermíticos (Observables) \hat{A} : Un operador lleva una función a otra. Cumplen todas las propiedades usuales:

- Linealidad: $\hat{A}(a_1f_1 + a_2f_2) = a_1\hat{A}(f_1) + a_2\hat{A}(f_2)$ con $a_1, a_2 \in \mathbb{C}$
- Producto: $AB(f) = A(\underbrace{B(f)}_g) = A(g)$
- Conmutador: $[A, B] = AB - BA$, $[A, B]f = A(Bf) - B(Af)$

Como es hermítico cumple matricialmente $A^\dagger = A$ y en forma de operador es tal que si

$$(f, Ag) = (Af, g)$$

Finalmente cabe destacar que en un observable, el autovalor del observable es el valor medido experimentalmente $Af = \lambda f$, y $\lambda \in \mathbb{R}$ pues el operador es hermítico, y cumple que sus autovalores son reales.

Bases: Como es un espacio vectorial, existen bases $u_i(r)$ (discreta) o $w_p(r)$ (continua) que asumimos ortonormales:

$$(u_i, u_j) = \int d^3x u_i^* u_j = \delta_{ij} \quad , \quad (w_p, w_{p'}) = \int d^3x w_p^* w_{p'} = \delta(p - p')$$

donde cada vector de \mathcal{F} puede ser escrito en la base. Lo anterior puede ser resumido en la siguiente tabla:

	Base discreta $u_i(r)$	Base continua $w_p(r)$
Ortonormalización	$(u_i, u_j) = \delta_{ij}$	$(w_p, w_{p'}) = \delta(p - p')$
Completitud	$\sum_i u_i(r) u_i^*(r') = \delta(r - r')$	$\int dp w_p(r) w_p^*(r') = \delta(r - r')$
Expansión de $\psi(r)$	$\psi(r) = \sum_i c_i u_i$	$\psi(r) = \int dp \tilde{\psi}(p) w_p(r)$
Expresión de los componentes de $\psi(r)$	$c_i = (u_i, \psi(r))$	$\tilde{\psi}(p) = (w_p, \psi(r))$
Producto escalar	$(\varphi, \psi) = \sum_i b_i^* c_i$	$(\varphi, \psi) = \int dp \tilde{\varphi}^*(p) \tilde{\psi}(p)$
Parseval	$(\psi, \psi) = \sum_i c_i ^2$	$(\psi, \psi) = \int dp \tilde{\psi}(p) ^2$

Tabla 1: Resumen sobre las bases. En adelante se obviara el cachirulo \sim para referirse a las componentes en una transformada como la FT.

Algunos ejemplos clásicos de bases son la de las ondas planas (Transformada de Fourier) dadas por:

$$v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

y la base de posición $\delta_{x'}(x) = \delta(x - x')$. Por ultimo agregamos la operación cambio de base, supongamos tenemos dos bases distintas e_i, e'_i y conozco las componentes de \vec{V} en la base no primada (V_i). Luego las componentes de V en la base primada se obtienen como:

$$V'_j = \sum_{i=1}^N V_i e_j^\dagger e_i$$

Producto Tensorial: Lo definimos entre vectores como una matriz que lleva un vector a otro $A\vec{V}_1 = \vec{V}_2$. Por definición $A \equiv \vec{V}_1 \otimes \vec{V}_2^\dagger$ tal que hace lo siguiente sobre otro vector:

$$A\vec{u} = (\vec{V}_1 \otimes \vec{V}_2^\dagger)\vec{u} = \vec{V}_1 \underbrace{(\vec{V}_2^\dagger \vec{u})}_{\in \mathbb{C}}$$

Si V_1 y V_2 son vectores finitos, entonces la matriz A simplemente se calcula como: $A = V_1 V_2^\dagger$. Por ultimo en \mathcal{F} hace lo siguiente, transforma funciones en operadores tales que:

$$[f \otimes g^*]\psi = f \int dr^3 g^* \psi$$

Postulados de la Mecánica Cuántica y Reglas de Cuantización:

1. El estado de un sistema está completamente determinado por $\psi(\vec{x}, t)$.
2. Todo lo que es posible medir u observar tiene asociado un operador Hermítico $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ (autoadjunto) que es llamado observable. *Estos operadores se construyen a partir de sus análogos clásicos.*
3. Los únicos valores medibles de un observable A son sus autovalores. $Av_n = \lambda_n v_n$
4. La probabilidad de observar el valor de λ_n es:

$$P(\lambda_n) = |(v_n, \psi(\vec{x}, t))|^2$$

Y como v_n es una base podemos expandir $\psi(\vec{x}, t) = \sum_k c_k(t) v_k(\vec{x})$. Lo que implica $(v_n, \psi(\vec{x}, t)) = C_n(t)$ y por ende:

$$P(\lambda_n) = |c_n(t)|^2$$

Si existe un conjunto degenerado con el mismo autovalor λ_n entonces:

$$P(\lambda_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |(v_{ni}, \psi(\vec{x}, t))|^2$$

5. Como consecuencia del proceso de medición de la función de onda sufre un colapso hacia el autovector v_n asociado a ese autovalor λ_n medido. Si existe degeneración tiende a algún autovector según las probabilidades dadas por el respectivo producto interno.
6. Un sistema aislado en mecánica cuántica no relativista evoluciona de acuerdo a la ecuación de Schrodinger:

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

Para cuantizar el sistema trabajar en forma de Hamilton y reemplazar x y p por sus respectivos operadores, y los corchetes de Poisson por conmutadores.

Notación de Dirac: Es necesario olvidarse del la posición y momentum en una función de onda. Esos son solo proyecciones de algo mas abstracto en una respectiva base. Así definimos un subespacio de un espacio de Hilbert \mathcal{E} llamado el *espacio de estado* de una partícula que es donde trabajaremos.

Elementos de \mathcal{E} son llamados los **kets**, donde un ket anotado como $|\psi\rangle$ corresponde a un estado abstracto no referido a ninguna base. En general escribimos como un ket puede ponerse en distintas bases:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \int d^3x \psi(\vec{x}, t) |x\rangle \\ &= \int d^3p \psi(\vec{p}, t) |p\rangle \end{aligned}$$

donde sus bases la propiedades de que su operador $\hat{x}|\vec{x}\rangle = \vec{x}|\vec{x}\rangle$ y así mismo $\hat{p}|\vec{p}\rangle = \vec{p}|\vec{p}\rangle$. Los kets son lineales y cumplen $|\lambda\psi\rangle = \lambda\psi$ si $\lambda \in \mathbb{C}$

Elementos de \mathcal{E}^* (el espacio dual) son los llamados **bras**, donde:

$$|\psi\rangle^\dagger = \langle\psi|$$

y tal que:

$$\begin{aligned}\langle\psi(t)| &= \int d^3x \langle\vec{x}|\psi^*(\vec{x}, t) \\ &= \int d^3p \langle\vec{p}|\psi^*(\vec{p}, t)\end{aligned}$$

Los bras son antilineales pues cumplen que $\langle\lambda\psi| = \lambda^*\langle\psi|$ si $\lambda \in \mathbb{C}$.

De aquí notando que como $|x\rangle$ y $|p\rangle$ son bases (ortonormales) es claro que como $\langle x|x'\rangle$ representa el producto interno entonces:

$$\boxed{\langle x|x'\rangle = \delta(x - x') \quad \wedge \quad \langle p|p'\rangle = \delta(p - p')}$$

y con esto es directo mostrar $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ es el producto interno en la base que elijamos. Y podemos llevar cualquier ket a su base respectiva de la forma:

$$\psi(x, t) = \langle x|\psi(t)\rangle \quad , \quad \psi(p, t) = \langle p|\psi(t)\rangle$$

Por otra parte sabemos que

$$\boxed{\langle x|p\rangle = \frac{e^{ip\cdot x/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \quad , \quad \langle p|x\rangle = \frac{e^{-ip\cdot x/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}}$$

Las propiedades usuales del producto interno se mantienen como siempre:

- $\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^*$
- $\langle\varphi|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1\langle\varphi|\psi_1\rangle + \lambda_2\langle\varphi|\psi_2\rangle$
- $\langle\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2|\varphi\rangle = \lambda_1^*\langle\psi_1|\varphi\rangle + \lambda_2^*\langle\psi_2|\varphi\rangle$
- La desigualdad de Schwarz: $|\langle\psi|\varphi\rangle|^2 \leq \langle\psi|\psi\rangle\langle\varphi|\varphi\rangle$
- Norma: $\langle\psi|\psi\rangle$ real, positiva y cero si y solo si $|\psi\rangle = 0$

Bases: Se asumen ortonormales, y permiten expandir cualquier ket en la base.

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |u_n\rangle \quad , \quad C_n = \langle u_n|\psi\rangle$$

Operadores lineales: Llevan un ket, a otro ket siendo lineal. En general no conmutan y pueden ser expresados en forma matricial en una base donde su elemento (componente) de la matriz en la base u_i esta dado por $A_{ij} = \langle u_i|A|u_j\rangle$

Conmutadores: Definimos un conmutador entre operadores como $[A, B] = AB - BA$, con las siguientes propiedades:

- $[A, B] = -[B, A]$

- $[A + B, C] = [A, C] + [B, C]$ y $[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$
- $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$
- $[A, B^n] = nB^{n-1}[A, B]$ y $[A^n, B] = nA^{n-1}[A, B]$ solo validos si A y B conmutan con su conmutador, es decir $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$
- $[A, [B, C]] + [C, [A, B]] + [B, [C, A]] = 0$

Destacamos los conmutadores en una dimensión:

$$[x, p] = i\hbar I \quad , \quad [H, x] = -i\hbar \frac{\hat{p}}{m} \quad , \quad [H, p] = i\hbar \frac{dV}{dx} I$$

Producto Tensorial en Dirac: La notación queda expresada por:

$$T = |\psi\rangle\langle\varphi|$$

que define un nuevo operador.

- Las bases u_i completas cumplen que $\sum_n |u_n\rangle\langle u_n| = I$ o en forma continua:

$$\int d^3x |x\rangle\langle x| = I \quad , \quad \int d^3p |p\rangle\langle p| = I \quad , \quad \int d^3\alpha |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|$$

- Definimos el **operador proyección** de un ket $|\psi\rangle$ como:

$$P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$$

es claro que es proyección pues notemos que:

$$P_\psi|\varphi\rangle = |\psi\rangle \underbrace{\langle\psi|\varphi\rangle}_{\in\mathbb{C}}$$

un número en dirección del ket $|\psi\rangle$. Por otra parte es necesario que ψ este normalizado, pues debe cumplirse que:

$$P_\psi^2 = |\psi\rangle \underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_1 \langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = P_\psi$$

Operadores autoadjuntos: Son aquellos que son hermíticos (su operador adjunto es si mismo), vale decir que $A^\dagger = A$. Para demostrar esto es necesario usar lo anterior

$$\langle A\psi|\varphi\rangle = \langle\psi|A\varphi\rangle$$

Vale decir en la notación $\langle\psi|A|\varphi\rangle$, A puede actuar donde quiera. Otra forma es usar lo siguiente:

$$\langle\psi|A|\varphi\rangle^* = \langle\varphi|A^\dagger|\psi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle$$

Finalmente la forma para obtener el adjunto (transconjugar si es operador, conjugar si es un número) es usar lo siguiente:

1. Reemplazar las constantes por sus conjugados.
2. Reemplazar los kets por sus bras asociados. Reemplazar los bras por sus kets asociados. Reemplazar los operadores por su operador autoadjunto.
3. Invertir el orden de los factores (las constantes no son importantes). Por ejemplo:

$$\lambda \langle \psi | AB | \varphi \rangle \longrightarrow \lambda^* \langle \varphi | B^\dagger A^\dagger | \psi \rangle$$

Los operadores \hat{R} (o \hat{X}) y \hat{P} : Estos operadores autoadjuntos son aquellos que si se trabaja en la base de posición \hat{R} es simplemente multiplicar por r (o x). Así (esto es valido en 3d):

$$\langle r | \hat{R} | \psi \rangle = r \langle r | \psi \rangle \quad (\langle x | \hat{X} | \psi \rangle = x \langle x | \psi \rangle)$$

y análogamente para \hat{P} :

$$\langle p | \hat{P} | \psi \rangle = p \langle p | \psi \rangle$$

dado que son autoadjuntos se permite elegir aplicar donde quiera el operador, y elijo el lado conveniente, en este caso en los bras $\langle x |$, $\langle p |$. El operador P aplicado al dominio de la posición x se ve como:

$$\langle x | \hat{P} | \psi \rangle = -i\hbar \nabla \langle x | \psi \rangle = -i\hbar \nabla \psi(x, t)$$

tal como lo esperábamos de antes $p = -i\hbar \nabla$. Así mismo: $x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$. La forma de demostrar esto en los problemas de $\langle p | \hat{X} | p' \rangle$ y $\langle x | \hat{P} | \psi \rangle$ es insertar identidades convenientes de p y x , transformando los operadores en producto de números y utilizar las relaciones para $\langle x | p \rangle$ y $\langle p | x \rangle$. Puede resultar conveniente manejar las siguientes integrales:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad , \quad \int_{-\infty}^{\infty} -x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2} a^{-3/2} \sqrt{\pi} \quad , \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} e^{ixk} = \delta(k)$$

Oscilador Armónico: Si ponemos $k = \omega^2 m$ el hamiltoniano queda:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{\omega^2 m}{2} \hat{x}^2$$

con $[x, p] = i\hbar$. Definimos el operador de bajada \hat{a} (destrucción) y subida \hat{a}^\dagger (creación) como:

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \quad \wedge \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}}$$

o bien:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger) \quad \wedge \quad p = i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} (a^\dagger - a)$$

Lo que inmediatamente nos permite obtener que:

$$H = \hbar\omega (a^\dagger a + 1/2)$$

Lo anterior permite definir:

- $[a, a^\dagger] = 1$.
- $[a, (a^\dagger)^n] = n(a^\dagger)^{n-1}$

- $[H, a] = -\hbar\omega a$ (bajada).
- $[H, a^\dagger] = \hbar\omega a$ (subida).

De aquí es claro que si $|\psi_E\rangle$ es un autoestado de H con energía E entonces $a|\psi_E\rangle$ es un autoestado con energía $E - \hbar\omega$ y $a^\dagger|\psi_E\rangle$ es un autoestado con energía $E + \hbar\omega$. Esto es valido siempre y cuando la energía no sea negativa, pues necesariamente deben ser positivos por el **lema**.

Usando la notación $|n\rangle$ para referirse al autoestado número n del oscilador armónico. Es claro que debe haber un mínimo pues no puede haber energías negativas. Luego definimos $|0\rangle$ con energía $\frac{\hbar\omega}{2}$ el estado base. Queremos renormalizar los autoestados para hacerlos ortonormales asumiendo que $\langle 0|0\rangle = 1$. Para esto requerimos imponer que los otros vectores formados por multiplicaciones de a^\dagger con $|0\rangle$ sean de la forma:

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

que cumplen $\langle n|n\rangle = 1$. Esto nos permite inmediatamente usar que como diagonalizan H son una base y luego:

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm} \quad \wedge \quad \sum_n |n\rangle\langle n|$$

Para resolver el estado fundamental en términos de funciones, solo basta usar que $0 = a|0\rangle$ y multiplicar por $\langle x|$. Luego cambiar a por su valor con respecto a x y p y resolver, con esto obtenemos:

$$\psi_0(x) = Ce^{-m\omega x^2/(2\hbar)}$$

y usando que $|1\rangle = a^\dagger|0\rangle$ expandimos nuevamente a^\dagger para resolver la EDO llegando a

$$\psi_n(x) = Ce^{-y^2/2} H_n(y)$$

con $y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$.

Componentes de a y a^\dagger en la base $|n\rangle$: Para ello solo basta hacer:

$$a = IaI = \sum_n |n\rangle\langle n|a \sum_m |m\rangle\langle m| = \sum_{nm} \langle n|a|m\rangle |n\rangle\langle m|$$

Con lo que formamos $a_{nm} = \langle n|a|m\rangle$ los componentes del operador a en la base del oscilador armónico. Usando que:

$$a|n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad \wedge \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

podemos demostrar que:

$$a_{nm} = \langle n|a|m\rangle = \sqrt{m} \delta_{n,m-1} \quad \wedge \quad a_{nm}^\dagger = \langle n|a^\dagger|m\rangle = \sqrt{m+1} \delta_{n,m+1}$$

Estados Coherentes: Son aquellos estados que permiten generar una evolución temporal (en este caso en el oscilador armónico) tal de esperar un resultado sin dispersión. Es decir que la evolución sea prácticamente una onda viajera que oscila sin deformarse.

En términos matemáticos se define como aquel estado (ket) que diagonaliza el operador de destrucción a . Para este caso el estado viene dado por el $|\alpha\rangle$ con $\alpha \in \mathbb{C}$ tal que:

$$|\alpha\rangle = C_0 e^{\alpha a^\dagger} |0\rangle = C_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} (a^\dagger)^n |0\rangle$$

Como diagonaliza el operador a es claro que $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ que es fácil de demostrar usando la definición de $|\alpha\rangle$ y el conmutador de $[a, (a^\dagger)^n]$.

Resumen I3 - Física Cuántica I

Definimos la esperanza, promedio o valor esperado de un operador A con respecto a un estado $|\psi\rangle$ como:

$$\langle A \rangle_\psi \equiv \langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

y definimos la desviación estándar (raíz de la varianza) como:

$$\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

Teorema de Ehrenfest: Para un operador \hat{A} y cualquier estado $|\psi\rangle$ se tiene:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t) | [\hat{A}, H] | \psi(t) \rangle \quad (i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle [A, H] \rangle)$$

y por ende se cumple:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle(t) = \langle [A, H] \rangle(t)$$

Demostración: Como A no depende del tiempo se tiene:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi | A | \psi \rangle = i\hbar \frac{d}{dt} (\langle \psi |) A | \psi \rangle + \underbrace{\langle \psi | \frac{d}{dt} A | \psi \rangle}_0 + \langle \psi | A i\hbar \frac{d}{dt} | \psi \rangle$$

y luego como ψ es una función de onda cumple la ecuación de Schrodinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} | \psi \rangle = H | \psi \rangle \quad \wedge \quad -i\hbar \langle \psi | = \langle \psi | H$$

se tiene:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi | A | \psi \rangle = -\langle \psi | H A | \psi \rangle + \langle \psi | A H | \psi \rangle = \langle \psi | [A, H] | \psi \rangle = \langle [A, H] \rangle \quad \square$$

Teorema: Sean P, Q dos observables que no conmutan, i.e $[Q, P] \neq 0$, entonces necesariamente:

$$\Delta P \Delta Q > 0$$

y en particular para la posición y momentum se tiene:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

así, este teorema se conoce como el **Principio de Incertidumbre**.

Conjunto completo de observables compatibles (CCOC): Cuando queremos tener una base de autoestados para un operador A , tenemos en general 2 casos, el caso bueno en que dicha base si diagonaliza al autoestado, donde a cada autoestado se le asocia un único autovalor. Pero también existe otro caso, en que existen distintos autoestados que tienen el mismo autovalor:

$$A | \psi_n^i \rangle = a_n | \psi_n^i \rangle \quad i = 1, 2, \dots, n_i$$

Nosotros deseamos llamar a los autoestados por sus autovalores sin ambigüedad, así lo que se hace es introducir otro operador B que conmute con A , i.e $[A, B] = 0$, y que por ende diagonalizan en la misma base. Luego lo que queremos es que este nuevo operador con sus propios autovalores elimine

la ambigüedad. Finalmente si no arregla todo, introducimos un tercer operador que conmute con los 2 anteriores, y repetimos este proceso hasta que no haya ambigüedad. Este proceso lo que nos permite finalmente es que a cada autoestado le asociamos un único conjunto de autovalores. Así en el caso de que se requieren tres operadores A , B , C tenemos:

$$|\psi_{n,\ell,m}\rangle = |n, \ell, m\rangle \leftrightarrow (n, \ell, m)$$

y simplemente usamos la terna de autovalores para A , B , C (n, ℓ, m) respectivamente para referirnos al autoestado.

Constantes de Movimiento: Son aquellos observables que cumplen $[A, H] = 0$ y por ende por el teorema de Ehrenfest:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle = 0$$

y luego por conmutar estos operadores pueden diagonalizarse en la misma base de autoestados del Hamiltoniano. Luego como sabemos cuando un sistema parte de un autoestado del Hamiltoniano, su autovalor no varía en el tiempo. Así mismo el autovalor de ese mismo autoestado asociado a A tampoco varía en el tiempo.

Cuadro de Heisenberg: A diferencia del cuadro de Schrodinger, en el cuadro de Heisenberg los estados no varían en el tiempo, y son los operadores los que lo hacen. Para ello se define un operador de evolución temporal:

$$U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}$$

que nos permite relacionar el cuadro de Schrodinger con el de Heisenberg de la forma:

$$|\psi_S(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi_S(t_0)\rangle$$

y en términos de operadores como:

$$A_H(t) = U^\dagger(t, t_0)A_S U(t, t_0)$$

Note que si A_S es una constante de movimiento, A conmuta con H y por ende conmuta $U(t, t_0)$ (solo use Taylor y propiedades de operadores). Como $U^\dagger U = I$ es claro que $A_H = A_S$, resultado obvio al pensar en el nombre de constante de movimiento. Por otra parte note que:

$$U^\dagger(t, t_0) = U(-t, t_0)$$

y por ende de:

$$U^\dagger(t, t_0)|\psi(t)\rangle = U(-t, t_0)|\psi(t)\rangle = U^\dagger U|\psi(t_0)\rangle = |\psi(t_0)\rangle$$

En esencia el operador U suma $t - t_0$ al tiempo, y el operador U^\dagger resta $t - t_0$ al tiempo. Finalmente es fácil mostrar que dado del teorema de Ehrenfest, se cumple una especie de Teorema de Ehrenfest en el cuadro de Heisenberg de la forma:

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_H(t) = [A_H(t), H]$$

Potenciales Centrales: Se quiere resolver:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) \right] \psi(r) = E\psi(\vec{r})$$

donde $V(r)$ es un potencial de la forma $V(r) = -Ze^2/r$. Para ello será conveniente trabajar en coordenadas esféricas con todas las relaciones que se enuncian a continuación:

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \varphi \\ y &= r \sin \theta \sin \varphi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned}$$

con las relaciones de base:

$$\begin{aligned} \hat{r} &= \sin \theta \cos \varphi \hat{x} + \sin \theta \sin \varphi \hat{y} + \cos \theta \hat{z} \\ \hat{\theta} &= \cos \theta \cos \varphi \hat{x} + \cos \theta \sin \varphi \hat{y} - \sin \theta \hat{z} \\ \hat{\varphi} &= -\sin \varphi \hat{x} + \cos \varphi \hat{y} \end{aligned}$$

e inversamente:

$$\begin{aligned} \hat{x} &= \sin \theta \cos \varphi \hat{r} + \cos \theta \cos \varphi \hat{\theta} - \sin \varphi \hat{\varphi} \\ \hat{y} &= \sin \theta \sin \varphi \hat{r} + \cos \theta \sin \varphi \hat{\theta} + \cos \varphi \hat{\varphi} \\ \hat{z} &= \cos \theta \hat{r} - \sin \theta \hat{\theta} \end{aligned}$$

con las siguientes propiedades:

$$dV = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi, \quad \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \theta} = -\hat{r}, \quad \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial \theta} = 0, \quad \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \varphi} = \cos \theta \hat{\varphi}, \quad \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial \varphi} = -(\sin \theta \hat{r} + \cos \theta \hat{\theta})$$

con las relaciones de los gradientes y laplacianos:

$$\nabla = \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{\theta}}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\hat{\varphi}}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

y

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

y las relaciones entre derivadas:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{r} \frac{\sin \varphi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \frac{\cos \varphi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \end{aligned}$$

Operador Momentum Angular: Tal como en mecánica clásica definimos el momentum angular como:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{r} \times \nabla$$

que en coordenadas esféricas haciendo el producto cruz correspondiente (note que $\vec{r} = r\hat{r}$) nos deja:

$$\vec{L} = \frac{\hbar}{i} \left(-\frac{\hat{\theta}}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} + \hat{\varphi} \frac{\partial}{\partial\theta} \right)$$

y si cambiamos $\hat{\theta}$ y $\hat{\varphi}$ por sus valores en cartesianas, y hacemos los respectivos productos puntos es posible obtener:

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\varphi} \quad , \quad L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right)$$

Además con este método es posible demostrar que:

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

Lo que significa que $[\vec{L}, \vec{L}] \neq 0$. Y además es posible escribir el Hamiltoniano en esféricas como:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \right] - \frac{e^2}{r} \right\} \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

Y finalmente como

$$[\vec{L}, H] = [L^2, H] = [L_z, H] = 0$$

es posible diagonalizar el Hamiltoniano con L^2 , L_z y con el mismo H .

Momentum Angular como generador de rotación: Tal como el operador momentum permite trasladar en a de la forma: $e^{iap/\hbar}$ el operador momentum angular permite rotar usando:

$$e^{i\vec{\varphi} \cdot \vec{L}/\hbar}$$

donde $\vec{\varphi}$ es un vector perpendicular al plano de rotación, y su modulo es el ángulo de rotación. Es decir $\vec{r}' = \vec{r} + \delta\vec{r}$ con

$$\delta\vec{r} = \vec{\varphi} \cdot \vec{r}$$

consiste en rotar el vector \vec{r} en un ángulo φ en un plano de rotación donde su normal es la dirección de $\vec{\varphi}$. Para operadores es similar como antes:

$$A(\vec{r}') = e^{i\vec{\varphi} \cdot \vec{L}/\hbar} A(\vec{r}) e^{-i\vec{\varphi} \cdot \vec{L}/\hbar}$$

Así por ejemplo si la rotación es en el eje z se tiene:

$$R = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

y luego $\vec{r}' = R\vec{r}$.

Resolución del Átomo de Hidrógeno: Si elegimos el CCOC compuesto por H , L^2 y L_z . Tenemos que para resolverlo debemos imponer 3 números cuánticos. Tomando solo la parte angular nos proponemos a resolver $L^2|\lambda, m\rangle = \hbar^2\lambda|\lambda, m\rangle$, y $L_z|\lambda, m\rangle = \hbar m|\lambda, m\rangle$. El problema para L_z es muy trivial, pues en esféricas:

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \longrightarrow L_z f(\theta, \varphi) = \hbar m f(\theta, \varphi) \rightarrow f(\theta, \varphi) = g(\theta) e^{im\varphi}$$

con la condición de que $f(\theta, \varphi + 2\pi) = f(\theta, \varphi)$, que cuantiza $m \in \mathbb{Z}$.

Operadores de subida y bajada: Definimos:

$$L_{\pm} = L_x \pm L_y$$

respectivamente los operadores de subida y bajada. Es fácil demostrar (usando los conmutadores de L_k) que

$$[L_+, L_m] = 2\hbar L_z \quad , \quad [L_z, L_{\pm}] = \pm\hbar L_{\pm}$$

entonces el autoestado definido como $L_{\pm}|\lambda, m\rangle$ tiene autovalor $m \pm 1$. Y como $\lambda \geq m^2$ implicará que existirán valores mínimos y máximos de m que permitirán que el máximo viene dado por ℓ y el mínimo por $-\ell$ y con esto es conveniente redefinir el autovalor de L^2 como $\lambda \equiv \ell(\ell + 1)$. Con esto cuando nos referimos al autoestado: $|\ell(\ell + 1), m\rangle$ simplemente lo hacemos como $|\ell, m\rangle$.

Parte Angular: Utilizando $L_+|\ell, \ell\rangle = 0$ es posible obtener la EDO. Pues

$$L_+ = \hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

y con esto generamos el último autoestado y usando $L_-|\ell, \ell\rangle = C|\ell, \ell - 1\rangle$ es posible generar todos los estados. Normalizando todo, es posible obtener la solución angular del átomo de hidrógeno que viene dado por los armónicos esféricos:

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = (-1)^m \left[\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!} \right]^{1/2} P_{\ell}^m(\theta) e^{im\varphi}$$

con $\ell = 1, 2, \dots$ y $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell$, P_{ℓ}^m los polinomios asociados de Legendre. Estos son una base completa de funciones sobre la esfera.

Parte Radial: Dado que nuestra solución es separable:

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = f_n(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$$

podemos simplemente reemplazar en la ecuación de Schrodinger y cambiar L^2 por su autovalor. Con esto nos queda una EDO que nos interesa resolver para energías negativas (estados ligados), y que si hacemos los siguientes cambios:

$$\boxed{r = \frac{\hbar}{\sqrt{8m|E|}} \rho, \quad \lambda = \frac{e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2|E|}}, \quad U(r) = r \cdot f(r), \quad U(\rho) = e^{-\rho^2/2} \omega(\rho)}$$

nos entrega usando Frobenius $\omega(\rho) = \rho^{\ell+1} \sum_j C_j \rho^j$ la recurrencia:

$$C_{j+1} = \frac{\ell + j + 1 - \lambda}{(j + 1)(j + 2\ell + 2)} C_j$$

que crece muy rápido y nos obliga a imponer que se haga 0 para algún término, o sea imponer que $\lambda \in \mathbb{Z}$ (es decir $\exists j$ tal que: $\lambda = \ell + j + 1$). O sea que si $\lambda = n \in \mathbb{Z}$ esto implica:

$$E = -\frac{1}{2}m_e \left(\frac{e^2}{\hbar}\right)^2 \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{R_y}{n^2}$$

Con esto finalmente llegamos a la resolución que los números cuánticos vienen dados por:

$$n = 1, 2, \dots, \infty \quad , \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1 \quad , \quad m = -\ell, \dots, \ell$$