



UNIVERSIDAD DE SONORA  
DIVISIÓN DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

---

# Densidad de probabilidad para osciladores acoplados

---

Tesis presentada para obtener el título de  
Licenciatura en Física

Autor: Carlos Eduardo Ruiz Rosales  
Director: Dr. Arnulfo Castellanos Moreno

Junio 2017

# Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



**"El saber de mis hijos  
hará mi grandeza"**



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

## **Dedicatoria**

A mis padres, Oscar y Bertha, que han trabajado arduamente para asegurar una vida de calidad a sus hijos, a mi pareja Judith y mi niño Noel que me han apoyado y animado como nadie más durante todo los obstáculos que este proyecto presentó, les dedico este trabajo como muestra del aprecio a la dedicación, responsabilidad, paciencia y amor que siempre me han demostrado.

## **Agradecimientos**

Un agradecimiento enorme a mi director de tesis el Dr. Arnulfo Castellanos, muchas gracias por su guía y ayuda, es un excelente académico pero aún mejor persona. A mis sinodales, Dr. Adalberto Corella, M. en C. Sergio Gutiérrez y Dr. Rodrigo Rosas por ayudar en la culminación del presente. Otro agradecimiento muy especial para el Dr. Carlos Calcáneo que durante mi licenciatura me apoyó en momentos difíciles y confió en mí. También a mis hermanos, Oscar y Edgar, y mis compañeros y amigos, Carlos, Tadeo, Mauro, Abraham, Heichi, Tadeo Alan, Jose y Gerardo, por todas las tardes que compartimos trabajando, estudiando y otras tantas no tan productivas, gracias.

# Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>4</b>
<b>2. Dos osciladores acoplados</b>	<b>5</b>
2.1. Ecuaciones de movimiento . . . . .	5
2.2. Desacoplamiento de las ecuaciones . . . . .	6
2.3. Modos normales de oscilación . . . . .	8
2.4. Cuantización . . . . .	9
2.5. Osciladores independientes . . . . .	11
<b>3. Cadena lineal</b>	<b>14</b>
3.1. Ecuaciones de movimiento . . . . .	14
3.2. Frecuencia de oscilación . . . . .	16
3.3. Relación de dispersión . . . . .	17
3.4. Modos normales de oscilación . . . . .	18
3.5. Cuantización . . . . .	22
3.6. Segunda cuantización . . . . .	24
3.7. Estados coherentes . . . . .	26
<b>4. Cuerda continua</b>	<b>28</b>
4.1. Campo clásico . . . . .	28
4.2. Frecuencia de oscilación . . . . .	29
4.3. Relación de dispersión . . . . .	30
4.4. Modos normales de oscilación . . . . .	31
4.5. Cuantización del campo . . . . .	33
<b>5. Densidad de probabilidad</b>	<b>35</b>
5.1. Técnica de visualización . . . . .	35

5.2. Visualización de la cadena lineal . . . . .	38
5.3. Visualización del campo . . . . .	41
<b>6. Análisis y conclusiones</b>	<b>42</b>
<b>7. Apéndice</b>	<b>44</b>
7.1. Relaciones ortogonales . . . . .	44
7.2. Código de gráficos . . . . .	45

## 1. Introducción

La densidad de probabilidad como el cuadrado de la función de onda es un concepto muy importante en la mecánica cuántica, tanto que le valió el premio nobel a su autor Max Born; además está fuertemente ligado a conceptos muy importantes que unen la teoría cuántica con la mecánica newtoniana, hablamos de los valores promedio de las variables dinámicas, por estas razones es base del estudio en clases introductorias a la mecánica cuántica. Pero a medida que los problemas se complican nos encontramos con la imposibilidad de estudiar dicho concepto por la existencia de sistemas con gran número de grados de libertad; sin embargo Scott C. Johnson y Thomas D. Gutiérrez proponen un método de visualización para densidades de probabilidad de sistemas de osciladores acoplados, estas proyecciones utilizan principalmente la característica de que estos pueden ser descritos como un conjunto de osciladores armónicos independientes bajo las coordenadas normales; estas proyecciones contienen información interesante sobre tópicos avanzados como los fonones y teoría cuántica de campos.

En el presente trabajo se hará un estudio teórico de dichos sistemas para desglosar las características que hacen posible la técnica de visualización, partiendo de un arreglo sencillo de dos osciladores acoplados del cual se establecerán los conceptos básicos como la frecuencia de oscilación y los modos normales, para después aplicar estos conocimientos en sistemas más complejos como es una cadena lineal, un sistema de  $N$  partículas acopladas que es un adecuado modelo de cristal unidimensional, estudiando propiedades como la relación de dispersión y la interpretación de las vibraciones del cristal como partículas; por último hacemos el salto del sistema discreto al continuo y finalmente presentamos las técnicas de visualización de Johnson y Gutierrez.

## 2. Dos osciladores acoplados

En este capítulo estudiamos el sistema de dos osciladores acoplados para establecer con claridad qué se entiende por modo normal de vibración y aprovechar su simplicidad para visualizarlos.

### 2.1. Ecuaciones de movimiento

El sistema se conforma por dos cuerpos de masa  $m$  unidos mediante un resorte de constante  $\kappa$ , ambos anclados a paredes por medio de otros resortes con la misma constante de elasticidad, con libertad de movimiento sobre la dirección transversal al arreglo, donde  $q_1$  y  $q_2$  son las posiciones de desplazamiento de las masas con respecto a la posición de equilibrio, como se puede apreciar en la figura 2.1. Considerando oscilaciones pequeñas la función lagrangiana del sistema es

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2) - \frac{1}{2}\kappa[q_1^2 + (q_1 - q_2)^2 + q_2^2]. \quad (2.1.1)$$

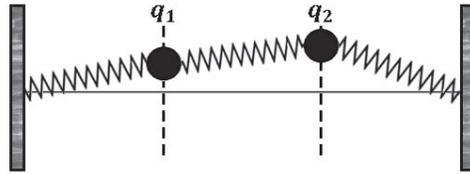


Figura 2.1: Sistema con dos grados de libertad, indicados por las líneas punteadas que oscilan alrededor de la posición marcada por la línea sólida.

Aplicando las ecuaciones de Euler-Lagrange para obtener las ecuaciones de movimiento resulta

$$\begin{aligned} m\ddot{q}_1 &= -\kappa q_1 + \kappa(q_2 - q_1) \\ m\ddot{q}_2 &= -\kappa(q_2 - q_1) - \kappa q_2, \end{aligned} \quad (2.1.2)$$

en apariencia difícil de resolver por la dependencia de las variables sobre la evolución temporal de la compañera pero las ecuaciones de movimiento se presentan de forma familiar cuando las colocamos en forma matricial

$$m\ddot{\mathbf{q}} + \mathbf{A}\mathbf{q} = 0 \quad (2.1.3)$$

donde  $\mathbf{q}$  y  $\mathbf{A}$  son:

$$\mathbf{q} \equiv \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix} \text{ y } \mathbf{A} \equiv \begin{pmatrix} 2\kappa & -\kappa \\ -\kappa & 2\kappa \end{pmatrix}. \quad (2.1.4)$$

La ecuación (2.1.3) tiene la forma de la ecuación de movimiento para un oscilador armónico con diferencias en la coordenada de elongación que ahora es un conjunto de grados de libertad y la constante de elasticidad es una matriz constante y simétrica; por lo tanto aprovecharemos esta última característica de la matriz para buscar un cambio de coordenadas adecuado que ‘separe’ las ecuaciones.

## 2.2. Desacoplamiento de las ecuaciones

Probemos usar la transformación

$$\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{Q} = \mathbf{S}\mathbf{q} \quad (2.2.1)$$

donde  $\mathbf{S}$  es una matriz constante e invertible de tamaño 2x2 y  $\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} Q_1 \\ Q_2 \end{pmatrix}$ ; si aplicamos  $\mathbf{S}$  en la ecuación (2.1.3) obtenemos

$$m\mathbf{S}\ddot{\mathbf{q}} = -\mathbf{S}\mathbf{A}\mathbf{q} = -\mathbf{S}\mathbf{A}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{S}\mathbf{q} \quad (2.2.2)$$

sustituyendo (2.2.1) en los extremos de (2.2.2)

$$m\ddot{\mathbf{Q}} = -\mathbf{S}\mathbf{A}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{Q}. \quad (2.2.3)$$

Si elegimos  $\mathbf{S}$  de tal manera que  $\mathbf{A}_d \equiv \mathbf{S}\mathbf{A}\mathbf{S}^{-1}$  sea una matriz diagonal lograremos desacoplar las ecuaciones; así, con  $\mathbf{A}_d = \text{diag}[\lambda_1, \lambda_2]$  la ecuación (2.2.3) queda

$$m \begin{pmatrix} \ddot{Q}_1 \\ \ddot{Q}_2 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_1 \\ Q_2 \end{pmatrix} \quad (2.2.4)$$

finalmente obtenemos

$$\begin{aligned} m\ddot{Q}_1 + \lambda_1 Q_1 &= 0 \\ m\ddot{Q}_2 + \lambda_2 Q_2 &= 0 \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

dos ecuaciones diferenciales de oscilador armónico sin relación aparente entre sí; aún tenemos que determinar la transformación  $\mathbf{S}$  y la diagonalización de  $\mathbf{A}$ . Como mencioné al final de la sección anterior, la característica esencial que nos permitirá encontrar estos valores y separar exitosamente las ecuaciones es el hecho de que  $\mathbf{A}$  es una matriz simétrica, además los elementos involucrados en la diagonalización tienen un significado físico importante, los elementos de  $\mathbf{A}_d$  son los valores propios de  $\mathbf{A}$  y la transformación  $\mathbf{S}$ , además de lo establecido anteriormente, es una matriz unitaria formada por los vectores propios de  $\mathbf{A}$  y que cumple con  $\mathbf{S}^{-1} = \mathbf{S}^T$ ; estas propiedades son básicas en la diagonalización de matrices hermíticas (la matriz simétrica es un caso particular de matriz hermítica). Por tanto hay que resolver el problema de valores propios para  $\mathbf{A}$

$$\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{1}) = 0, \quad (2.2.6)$$

en donde  $\mathbf{1}$  es la matriz unidad. La sustitución de la matriz  $\mathbf{A}$ , ecuación (2.1.4), nos lleva a resolver el polinomio característico

$$\lambda^2 - 4\kappa\lambda + 3\kappa^2 = 0. \quad (2.2.7)$$

Las soluciones a las ecuaciones (2.1.3) y (2.2.5) son de naturaleza oscilatoria, ya sea una función Seno, Coseno o una combinación de ambas, que dependerán de una

frecuencia de oscilación  $\omega$ , por tanto me tomaré la libertad de reescribir los valores propios como frecuencias angulares propias

$$\lambda_1 \equiv m\omega_1^2 = \kappa \quad y \quad \lambda_2 \equiv m\omega_2^2 = 3\kappa. \quad (2.2.8)$$

Los vectores propios se obtienen al resolver el sistema lineal

$$(\mathbf{A} - \lambda_j \mathbf{1})\mathbf{v}_j = \mathbf{0} \quad (2.2.9)$$

donde  $\mathbf{v}_j = \begin{pmatrix} v_{j1} \\ v_{j2} \end{pmatrix}$  es el vector propio de  $\lambda_j$  y  $j = 1, 2$ . Al resolver las ecuaciones nos encontramos con que las componentes de ambos vectores propios tienen infinitas soluciones múltiplos de uno,  $v_{11} = v_{12}$  y  $v_{21} = -v_{22}$ , normalizando los vectores queda

$$\mathbf{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad y \quad \mathbf{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad (2.2.10)$$

con esto podemos construir la matriz de transformación  $\mathbf{S}$  con cada vector propio como una columna de la transformación en el orden del valor propio correspondiente, tal que

$$\mathbf{S} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.2.11)$$

Con la matriz de transformación podemos verificar  $\mathbf{A}_d$ , pero más importante aún podemos comprender cómo el nuevo grupo de coordenadas  $\mathbf{Q}$  depende de la posición de desplazamiento  $\mathbf{q}$  vía la ecuación (2.2.1)

$$Q_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_2 + q_1) \quad y \quad Q_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_2 - q_1), \quad (2.2.12)$$

a estas coordenadas se les denomina coordenadas normales de oscilación.

### 2.3. Modos normales de oscilación

Las ecuaciones desacopladas dejan comprender que los modos normales dependen exclusivamente de su frecuencia propia,  $\omega_1$  para  $Q_1$  y  $\omega_2$  para  $Q_2$ , más aún analizan-

do las ecuaciones (2.2.12) podemos pensar en los modos normales como un estado colectivo del sistema donde las partículas oscilan con la misma frecuencia. Pensemos en las condiciones iniciales  $q_1 = q_2$ ; de las ecuaciones (2.2.12) tenemos  $Q_1 \neq 0$  y  $Q_2 = 0$  obtenemos el modo simétrico, donde  $q_1$  y  $q_2$  oscilan en fase, en cambio si tomamos las condiciones  $q_1 = -q_2$  llevan a  $Q_1 = 0$  y  $Q_2 \neq 0$  obteniendo así el modo antisimétrico, donde  $q_1$  y  $q_2$  oscilan en desfase.

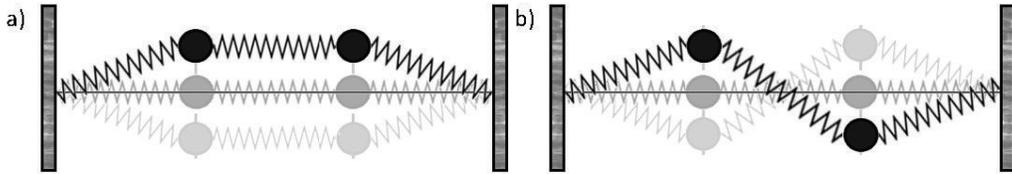


Figura 2.2: Representación de la evolución temporal de ambos modos normales.

Cualquier otro estado puede ser representado como una combinación de estos dos, fácilmente comprobable cuando hacemos la transformación inversa de (2.2.1).

## 2.4. Cuantización

Para crear un modelo cuántico de nuestro sistema hay que asociar un operador auto-adjunto a los variables dinámicas; así, la función hamiltoniana es ahora el operador hamiltoniano, que al ser aplicado en una función de onda  $\Psi$  definida en el espacio de Hilbert proporcione la energía del sistema,  $\hat{H}\Psi = E\Psi$  es la ecuación de Schrödinger. La función hamiltoniana y sus momentos conjugados son elementos que podemos obtener de la descripción lagrangiana mediante (2.1.1) mediante

$$H = \sum_{r=1}^N p_r \dot{q}_r - L \quad (2.4.1)$$

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r}, \quad (2.4.2)$$

resolviendo para el hamiltoniano y realizando la cuantización obtenemos

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2) + \frac{1}{2}\kappa[q_1^2 + q_2^2 + (q_1 - q_2)^2] \quad (2.4.3)$$

donde  $\hat{p}_r = -i\hbar\partial/\partial q_r$  es el operador de momento ya familiar. Una estrategia para resolver la ecuación sería recurrir al método de separación de variables y proponer que la función se pueda expresar como  $\psi(q_1, q_2) = \psi_1(q_1)\psi_2(q_2)$ , pero indudablemente el término  $(q_1 - q_2)^2$  de potencial impide esta separación y como en el caso clásico hay que desacoplar los términos; podemos probar utilizando los modos normales y sus momentos conjugados que podemos obtener al cuantizar la transformación

$$\begin{pmatrix} P_1 \\ P_2 \end{pmatrix} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned} \hat{Q}_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(q_2 + q_1) & \hat{Q}_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(q_2 - q_1) \\ \hat{P}_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{p}_2 + \hat{p}_1) & \hat{P}_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{p}_2 - \hat{p}_1) \end{aligned} \quad (2.4.4)$$

hacemos entonces el cambio de variable

$$\begin{aligned} \hat{P}_1^2 + \hat{P}_2^2 &= \frac{1}{2}(\hat{p}_2 + \hat{p}_1)(\hat{p}_2 + \hat{p}_1) + \frac{1}{2}(\hat{p}_2 - \hat{p}_1)(\hat{p}_2 - \hat{p}_1) = \hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 \\ \hat{Q}_1^2 + 3\hat{Q}_2^2 &= \frac{1}{2}(q_2 + q_1)^2 + \frac{1}{2}(q_2 - q_1)^2 + (q_2 - q_1)^2 = q_1^2 + q_2^2 + (q_2 - q_1)^2, \end{aligned}$$

el operador hamiltoniano queda

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_1^2}{2m} + \frac{\hat{P}_2^2}{2m} + \frac{m\omega_1^2}{2}\hat{Q}_1^2 + \frac{m\omega_2^2}{2}\hat{Q}_2^2 \quad (2.4.5)$$

donde  $\omega_1$  y  $\omega_2$  son precisamente las frecuencias propias; sin términos cruzados podemos hacer la propuesta

$$\Psi(Q_1, Q_2) = \Psi_1(Q_1)\Psi_2(Q_2) \quad (2.4.6)$$

y poder separar las ecuaciones en

$$\begin{aligned} \frac{\hat{P}_1^2}{2m}\Psi_1 + \frac{m\omega_1^2}{2}Q_1^2\Psi_1 &= E_1\Psi_1 \\ \frac{\hat{P}_2^2}{2m}\Psi_2 + \frac{m\omega_2^2}{2}Q_2^2\Psi_2 &= E_2\Psi_2. \end{aligned} \quad (2.4.7)$$

Los modos normales de oscilación que surgieron como consecuencia de separar las ecuaciones de movimiento clásicas en dos osciladores armónicos independientes funcionan de la misma forma para el sistema cuántico, dos osciladores armónicos cuánticos cuya solución es familiar.

## 2.5. Osciladores independientes

Utilizaremos el método algebraico de los operadores de escalera para resolver el oscilador armónico unidimensional, primero reescribimos las ecuaciones (2.4.7) como

$$\frac{1}{2m}[\hat{P}_k^2 + (m\omega_k Q_k)^2]\Psi_k = E_k\Psi_k \quad (2.5.1)$$

donde  $k = 1, 2$ , esta forma sugiere una diferencia de cuadrados  $u^2 + v^2 = (iu + v)(-iu + v)$ , aunque de entrada se puede sospechar que el resultado no será el mismo debido a que los operadores no son necesariamente conmutativos, aun así siguiendo esta idea se definen los operadores

$$\hat{A}_k^\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega_k}}(\mp i\hat{P}_k + m\omega_k Q_k). \quad (2.5.2)$$

Tenemos dos operadores para cada oscilador<sup>1</sup>, con las siguientes reglas de conmutación.

$$[\hat{A}_k^+, \hat{A}_{k'}^-] = \delta_{kk'} \quad (2.5.3)$$

$$[\hat{A}_k^+, \hat{A}_{k'}^+] = [\hat{A}_k^-, \hat{A}_{k'}^-] = 0 \quad (2.5.4)$$

para  $k' = 1, 2$ . El hamiltoniano en términos del producto de estos operadores queda

$$\hat{H}_k = \hbar\omega_k(\hat{A}_k^\mp \hat{A}_k^\pm \mp \frac{1}{2}). \quad (2.5.5)$$

---

<sup>1</sup>Para cualquier expresión que contenga  $\pm$  o  $\mp$  se debe de leer como dos expresiones, al primero se le asocian los signos de la parte superior y al segundo los inferiores.

Utilizando las dos representaciones del hamiltoniano para resolver la ecuación de Schrödinger para las funciones  $\hat{A}_k^\pm \Psi_k$  se obtiene

$$\hat{H}_k \hat{A}_k^\pm \Psi_k = (E_k \pm \hbar\omega_k) \hat{A}_k^\pm \Psi_k, \quad (2.5.6)$$

esto quiere decir que la energía del sistema crece o decrece en valores de  $\hbar\omega_k$ ; debido a este comportamiento se les denomina operador de ascenso  $\hat{A}_k^+$  y operador de descenso  $\hat{A}_k^-$ . Esto permite proponer un ecuación tal que al aplicar el operador de descenso al estado de más baja energía se obtenga el estado vacío

$$\hat{A}_k^- \Psi_{k0} = 0. \quad (2.5.7)$$

Se resuelve esta ecuación diferencial y se normaliza la función para obtener el estado base del oscilador

$$\Psi_{k0}(Q_k) = \left(\frac{m\omega_k}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-m\omega_k Q_k^2/2\hbar}. \quad (2.5.8)$$

El n-ésimo estado se obtiene al ascender la función n veces y normalizándola apropiadamente,

$$\Psi_{kn}(Q_k) = (n!)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{m\omega_k}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} (\hat{A}_k^+)^n e^{-m\omega_k Q_k^2/2\hbar}. \quad (2.5.9)$$

Resolviendo la ecuación de Schrödinger para el estado base obtenemos la energía basal  $E_{k0} = \frac{1}{2}\hbar\omega_k$ ; como mencionamos anteriormente al ascender la función la energía aumenta en múltiplo de  $\hbar\omega_k$ , por lo tanto la energía para el n-ésimo estado es

$$E_{kn} = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_k. \quad (2.5.10)$$

Por último tenemos una propiedad que asocia un estado excitado con su predecesor o sucesor:

$$\hat{A}_k^+ \Psi_{kn} = \sqrt{n+1} \Psi_{k(n+1)} \quad (2.5.11)$$

$$\hat{A}_k^- \Psi_{kn} = \sqrt{n} \Psi_{k(n-1)}, \quad (2.5.12)$$

estas interacciones para el sistema completo  $\Psi_{n_1 n_2} = \Psi_{1n_1} \Psi_{2n_2}$  son independientes

$$\begin{aligned}\hat{A}_1^+ \Psi_{n_1 n_2} &= \sqrt{n_1 + 1} \Psi_{(n_1+1)n_2} \\ \hat{A}_2^- \Psi_{n_1 n_2} &= \sqrt{n_2} \Psi_{n_1(n_2-1)}.\end{aligned}$$

Hemos encontrado que la solución general del problema clásico de dos osciladores armónicos acoplados se resuelve mediante la combinación lineal de dos soluciones, tal que en cada una de ellas las dos masas vibran con la misma frecuencia. Se llaman modos normales de vibración y tienen la ventaja de que pueden ser vistos como dos osciladores armónicos independientes.

En el siguiente capítulo aprovecharemos esta idea para estudiar la cadena lineal de osciladores acoplados.

### 3. Cadena lineal

En este capítulo estudiamos la cadena lineal. Obtendremos la frecuencia del  $k$ -ésimo modo normal de vibración, calcularemos la velocidad de fase y la de grupo, obtendremos la expresión para el momento lineal de todo el sistema y veremos con la ecuación (3.4.16) que desde el tratamiento clásico se tiene disponible la posibilidad de interpretar un cristal como un conjunto de partículas interactuantes. Enseguida procederemos al proceso de cuantización siguiendo el mismo procedimiento que para el sistema de dos osciladores acoplados.

#### 3.1. Ecuaciones de movimiento

Como un modelo de sólido unidimensional utilizaremos una cadena lineal de  $N$  átomos, con misma masa a distancias iguales, interactuando por fuerzas restitutivas, como se muestra en la figura 3.1, tal que el movimiento de un elemento de la cadena afecte la cadena entera; bajo la suposición de oscilaciones pequeñas en comparación con la separación de los átomos podemos pensar en un potencial tal que la interacción entre partículas sólo sea debido a los vecinos inmediatos. la lagrangiana del sistema es

$$L = \sum_{r=1}^N \frac{1}{2} m \dot{q}_r^2 - \sum_{r=1}^N \frac{1}{2} \kappa (q_{r+1} - q_r)^2, \quad (3.1.1)$$

con  $q_r$  como el desplazamiento de la  $r$ -ésima partícula,  $m$  la masa de los átomos y  $\kappa$  es la constante de elasticidad de la interacción. Imponemos una condición de frontera periódica, como se puede apreciar en la figura 3.1 donde se conecta la  $N$ -ésima masa hacia la primera

$$q_{r+N} = q_r. \quad (3.1.2)$$

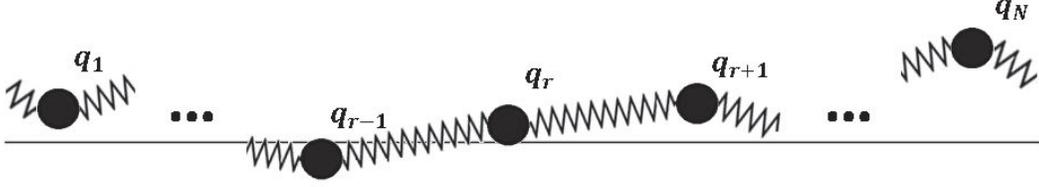


Figura 3.1: Cadena lineal de  $N$  partículas acopladas

Utilizando la ecuación de Euler-Lagrange para la  $r$ -ésima partícula

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} - \frac{\partial L}{\partial q_r} = 0 \quad (3.1.3)$$

hay que desarrollar la sumatoria de la lagrangiana para los elementos que contengan  $q_r$  y  $\dot{q}_r$ ,

$$L = \dots - \frac{1}{2}\kappa(q_r - q_{r-1})^2 + \frac{1}{2}m\dot{q}_r^2 - \frac{1}{2}\kappa(q_{r+1} - q_r)^2 + \dots \quad (3.1.4)$$

así la familia de ecuaciones de movimiento queda.

$$m\ddot{q}_r + \kappa(2q_r - q_{r+1} - q_{r-1}) = 0. \quad (3.1.5)$$

Podemos escribir el conjunto de ecuaciones (3.1.5) en forma matricial, como se hizo en sección de los dos osciladores acoplados

$$m\ddot{\mathbf{q}} + \mathbf{A}\mathbf{q} = 0,$$

con  $\mathbf{q}$  un vector columna y  $\mathbf{A}$  una matriz cuadrada, ambos de dimensión  $N$ . intentar resolver el problema de valores propios para diagonalizar la matriz  $\mathbf{A}$  implicaría determinar el valor de  $N$  para usar el teorema de Laplace e ir reduciendo el problema hasta alcanzar una matriz 3x3 para terminar aplicando la regla de Sarrus, considerando que este proceso puede resultar en un cálculo muy extenso utilizaremos otra vía para encontrar las frecuencias y modos normales.

### 3.2. Frecuencia de oscilación

Del análisis de los modos normales de oscilación de la sección 2.2 comprendimos que estos se presentan cuando todos los elementos del sistema oscilan en una frecuencia particular  $\omega$ ; así proponemos una solución ondulatoria forzando a sus partículas a moverse en una frecuencia única, tal que al sustituirla en la ecuación de movimiento (3.1.5) nos proporcione el comportamiento de las frecuencias para cada modo normal. Proponemos una familia de ondas viajeras de la forma

$$q_r = \phi_0 e^{ikar - i\omega t} \quad (3.2.1)$$

Donde  $\phi_0$  es una amplitud arbitraria,  $\omega$  es la frecuencia de oscilación,  $a$  es la distancia de separación entre partículas,  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  es el número de onda y  $\lambda$  es la longitud de onda. Calculamos la segunda derivada con respecto al tiempo

$$\ddot{q}_r = -\phi_0 \omega^2 e^{ikar - i\omega t}, \quad (3.2.2)$$

sustituimos (3.2.1) y (3.2.2) en la ecuación de movimiento (3.1.5).

$$\begin{aligned} -m\omega^2 \phi_0 e^{ikar - i\omega t} + \kappa(2\phi_0 e^{ikar - i\omega t} - \phi_0 e^{ika(r+1) - i\omega t} - \phi_0 e^{ika(r-1) - i\omega t}) &= 0 \\ -m\omega^2 q_r + \kappa(2q_r - q_r e^{ika} - q_r e^{-ika}) &= 0 \end{aligned}$$

y reducimos la ecuación eliminando el factor común  $q_r$ , para obtener una ecuación de la frecuencia y el número de onda

$$-m\omega^2 + \kappa(2 - e^{ika} - e^{-ika}) = 0, \quad (3.2.3)$$

utilizando propiedades trigonométricas reescribimos las exponenciales tal que

$$-m\omega^2 + \kappa(2 - 2 \cos ka) = 0, \quad (3.2.4)$$

resolviendo para  $\omega$  en términos de  $k$ ,

$$\omega_k = \pm 2 \sqrt{\frac{\kappa}{m}} \sin \frac{ka}{2} \quad (3.2.5)$$

de esta relación se puede obtener información de cómo las ondas se propagan en el sólido.

### 3.3. Relación de dispersión

La expresión (3.2.5) describe el efecto de la cadena como medio sobre la velocidad de la onda viajera  $q_r$ , ésta presenta un efecto de separación, o en otras palabras dispersión, si para un paquete de ondas que contenga elementos con diferentes longitudes de onda estos se propaguen a diferentes velocidades, esta aseveración puede realizarse al comparar la velocidad de grupo  $v_g$ , que es la velocidad de propagación del sistema, con la velocidad de fase  $v_f$ , que es la velocidad en la que una fase particular ( $ikra$ ) se propaga en el espacio; si  $v_g = v_f$  entonces la onda no se ve dispersada por el medio, estas velocidades están definidas como sigue

$$v_f = \frac{\omega}{k} \quad \text{y} \quad v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}. \quad (3.3.1)$$

Debido a que  $\omega$  solo puede ser positiva asociamos los valores negativos de  $k$  con el signo menos de la raíz, por lo tanto podemos reescribir (3.2.5) como

$$\omega_k = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} |\text{sen}(ka/2)|. \quad (3.3.2)$$

De las definiciones de velocidad de fase y de grupo se puede observar que la forma más evidente en que  $v_f = v_g$ , y por consecuencia ser un medio no dispersivo, es cuando  $\omega$  depende linealmente de  $k$ , pero para nuestra relación de dispersión los valores de las velocidades quedan

$$v_f = v_s \left| \frac{\text{sen}(ka/2)}{ka/2} \right| \quad (3.3.3)$$

$$v_g = v_s |\cos(ka/2)| \quad (3.3.4)$$

donde  $v_s \equiv (\kappa a^2/m)^{\frac{1}{2}}$ . Podemos ver claramente que  $v_f \neq v_g$ ; sin embargo si hacemos un desarrollo en serie de Taylor para longitudes de onda grandes comparadas con

la separación entre las partículas  $\lambda \gg a$ , considerando relevantes solo los valores a orden cero, la relación (3.3.2) queda,

$$\omega_k = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}}\left(\left|\frac{ka}{2}\right| + \dots\right) \simeq v_s|k|, \quad (3.3.5)$$

para esta sección de valores de  $k$ , la velocidad de fase y de grupo son iguales

$$v_f = v_g = v_s.$$

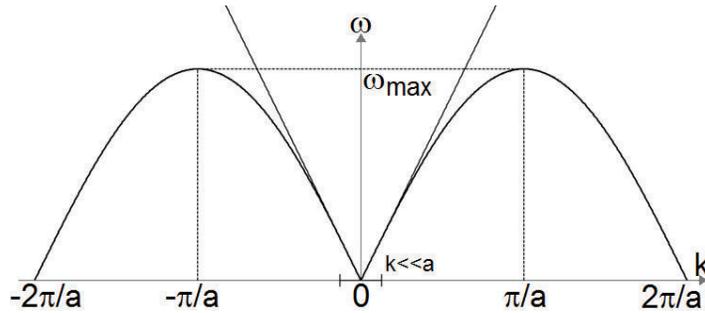


Figura 3.2: Relación de dispersión para la cadena lineal

Esta diferencia quiere decir que para longitudes de onda corta les corresponde un valor de la frecuencia menor al del medio no dispersivo, como se puede observar en la figura 3.2 esto se manifiesta como la separación entre la línea recta y la curva y se debe a la inercia de las partículas pues tienen que oscilar de cresta a valle a una velocidad menor.

### 3.4. Modos normales de oscilación

Hasta el momento no hemos analizado los valores de  $k$ , pues la relación de dispersión no supone restricción alguna sobre éstos, pero como podemos sospechar del análisis del problema de los dos osciladores acoplados en donde pasamos del espacio de las

coordenadas de posición con dos grados de libertad al espacio de las coordenadas normales con el mismo número de grados de libertad, podemos esperar lo mismo para el caso de  $N$  partículas, que las oscilaciones propias del sistema  $\omega_k$  tengan  $N$  modos normales asociados. Dicho esto podemos trabajar la solución propuesta (3.2.1) en la condición de frontera (3.1.2), para ver qué comportamiento tiene  $k$  en respuesta a la condición cíclica:

$$\begin{aligned}\phi_0 e^{ika(r+N)-i\omega t} &= \phi_0 e^{ikar-i\omega t} \\ q_r e^{ikaN} &= q_r,\end{aligned}\tag{3.4.1}$$

dividiendo la ecuación en  $q_r$  queda sencillamente.

$$e^{ikaN} = 1\tag{3.4.2}$$

la solución que satisface esta ecuación es

$$k = \frac{2\pi u}{aN},\tag{3.4.3}$$

donde  $u$  pertenece a los números enteros  $\mathbb{Z}$ . Esta condición discretiza los valores para  $k$ , esto tiene gran significado pues de haber sido una variable continua no hubiésemos podido asociar los  $N$  grados de libertad del espacio de posición. Así elegimos  $u$  para que tenga  $N$  valores,

$$u = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm(\frac{1}{2}N - 1), \frac{1}{2}N,\tag{3.4.4}$$

esto limita el dominio del numero de onda a

$$-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a}.\tag{3.4.5}$$

Encontrados los valores de las frecuencias donde las partículas del sistema oscilan a una frecuencia particular como la solución (3.2.1), proponemos un estado más general como una sumatoria de estas funciones, la familia de soluciones es

$$q_r(t) = \sum_k \phi_k e^{ikar-i\omega_k t}\tag{3.4.6}$$

donde  $\phi_k$  es una amplitud de oscilación. Separamos las componentes que solo dependen del número de onda e identificamos a estas como los modos normales de oscilación

$$Q_k(t) = N^{\frac{1}{2}} \phi_k e^{-i\omega_k t} \quad (3.4.7)$$

donde  $N^{\frac{1}{2}}$  es un factor de normalización, entonces (3.4.6) queda

$$q_r(t) = N^{-\frac{1}{2}} \sum_k Q_k(t) e^{ikar}, \quad (3.4.8)$$

una transformada de Fourier discreta del espacio de posición al espacio de frecuencias, la transformación inversa es

$$Q_k(t) = N^{-\frac{1}{2}} \sum_r q_r(t) e^{-ikar}; \quad (3.4.9)$$

podemos comprobar que esta solución es correcta si separa las ecuaciones de movimiento (3.1.5)

$$\begin{aligned} mN^{-\frac{1}{2}} \sum_k \ddot{Q}_k e^{ikar} + \kappa N^{-\frac{1}{2}} \sum_k Q_k (2e^{ikar} - e^{ika(r+1)} - e^{ika(r-1)}) &= 0 \\ N^{-\frac{1}{2}} \sum_k \{m\ddot{Q}_k + \kappa[2 - 2\cos(ka)]Q_k\} e^{ikar} &= 0 \end{aligned}$$

las funciones  $e^{ikar}$  forman una base para todo valor de  $k$  por lo tanto hay independencia lineal, la ecuación queda

$$m\ddot{Q}_k + 4\kappa \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) Q_k = 0$$

utilizando la relación de dispersión (3.3.2) reescribimos

$$\ddot{Q}_k + \omega_k^2 Q_k = 0. \quad (3.4.10)$$

Las ecuaciones de movimiento clásicas se separan como esperábamos. con el propósito de definir los momentos conjugados para el espacio de las coordenadas normales primero desarrollamos el momento lineal

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} = m\dot{q}_r \quad (3.4.11)$$

y de manera análoga definimos

$$P_k \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_k}. \quad (3.4.12)$$

Para realizar la diferencial necesitamos la lagrangiana en términos de los modos normales  $L(Q_k, \dot{Q}_k)$ , hacemos el cambio para la lagrangiana (3.1.1), primero la energía cinética,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}m \sum_r \dot{q}_r^2 &= \frac{1}{2}mN^{-1} \sum_r \sum_k \sum_{k'} \dot{Q}_k \dot{Q}_{k'} e^{i(k+k')ar} \\ &= \frac{1}{2}m \sum_k \sum_{k'} \dot{Q}_k \dot{Q}_{k'} \delta_{k(-k')} = \frac{1}{2}m \sum_k \dot{Q}_k \dot{Q}_{-k}, \end{aligned}$$

para reducir la expresión anterior usamos una relación ortogonal<sup>2</sup> de los valores  $k$  y  $k'$  que resulta en una delta de Kronecker, nos arroja  $k' = -k$ , ésto sugiere una relación entre  $Q_k$  y  $Q_{-k}$  que estudiaremos más adelante, por ahora completemos el desarrollo para la lagrangiana realizando el cambio de variable para el potencial,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\kappa \sum_r (q_{r+1} - q_r)^2 &= \frac{1}{2}\kappa N^{-1} \sum_r \left[ \sum_k Q_k e^{ikar} (e^{ika} - 1) \right]^2 \\ &= \frac{1}{2}\kappa N^{-1} \sum_r \sum_k \sum_{k'} Q_k Q_{k'} e^{i(k+k')ar} (e^{ika} - 1)(e^{ik'a} - 1) \\ &= \frac{1}{2}\kappa \sum_k Q_k Q_{-k} (2 - e^{ika} - e^{-ika}) = m \sum_k \omega_k^2 Q_k Q_{-k}, \end{aligned}$$

reescribimos la función lagrangiana en términos de los modos normales de oscilación

$$L = \frac{1}{2}m \sum_k \dot{Q}_k \dot{Q}_{-k} - m \sum_k \omega_k^2 Q_k Q_{-k}. \quad (3.4.13)$$

De manera que los momentos (3.4.12) quedan

$$P_k = m\dot{Q}_{-k}, \quad (3.4.14)$$

en términos de la derivada de (3.4.9) y (3.4.11),

$$P_k = N^{-\frac{1}{2}} \sum_r p_r e^{ikar}. \quad (3.4.15)$$

---

<sup>2</sup>desarrollada en el apéndice.

De esta relación podemos interpretar un nuevo concepto de momento además del momento lineal  $p_r$ , pues si  $k = 0$

$$P_0 = N^{-\frac{1}{2}} \sum_r p_r \quad (3.4.16)$$

donde  $\sum p_r$  es el momento lineal total del sistema, esto quiere decir que el momento lineal está relacionado solo con  $k = 0$ , Kittel(1967):” muchos procesos de interacción en cristales se comportan como si el número de onda total  $\sum k$  fuera conservado para las partículas interactuantes, y por esta razón  $k$  es referido como el momento del cristal o cuasimomento, son estas características que le dan al estudio de las vibraciones en un cristal un carácter de partícula.”

### 3.5. Cuantización

Para hacer el proceso de cuantización necesitamos hacer los mismos requerimientos que se utilizaron para el sistema de los dos osciladores, elegir funciones de cuadrado integrable en el espacio de Hilbert, representar las variables dinámicas con operadores, establecer las reglas de conmutación y determinar la descripción hamiltoniana. Comenzamos estudiando la función hamiltoniana para la lagrangiana (3.1.1)

$$H = \sum_{r=1}^N \frac{p_r^2}{2m} + \sum_{r=1}^N \frac{1}{2} \kappa (q_{r+1} - q_r)^2, \quad (3.5.1)$$

sabemos que el término de acoplamiento del potencial no permitirá proponer una solución como producto de osciladores independientes, por lo tanto similar al momento conjugado de los modos normales; definimos una descripción hamiltoniana en el espacio de los modos normales

$$H = \sum_k P_k \dot{Q}_k - L, \quad (3.5.2)$$

usando la lagrangiana (3.4.13) queda

$$H = \frac{1}{2m} \sum_k P_k P_{-k} + m \sum_k \omega_k^2 Q_k Q_{-k}. \quad (3.5.3)$$

Con los operadores de posición y momento definidos como es usual

$$[\hat{q}_r, \hat{p}_s] = i\hbar \delta_{rs}, \quad (3.5.4)$$

la relación de conmutación para las nuevas coordenadas queda

$$[\hat{Q}_k, \hat{P}_{k'}] = N^{-1} \sum_r \sum_s [\hat{q}_r, \hat{p}_s] e^{-ia(kr-k's)} = i\hbar \delta_{kk'} \quad (3.5.5)$$

y el problema cuántico descrito por la ecuación de Schrödinger es

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(Q, t) = \hat{H} \Psi(Q, t), \quad (3.5.6)$$

dado que el potencial no depende del tiempo podemos utilizar el método de separación de variables y separar en un producto de soluciones, la solución temporal que tiene la forma  $\exp(iEt/\hbar)$  donde  $E$  es la energía, y la solución estacionaria obedece la ecuación

$$\sum_k \left[ \frac{1}{2m} \hat{P}_k \hat{P}_{-k} + m\omega_k^2 \hat{Q}_k \hat{Q}_{-k} \right] \Psi(Q) = E \Psi(Q). \quad (3.5.7)$$

Una vez más utilizamos el método de separación de variables para reescribir la función de onda como osciladores independientes

$$\Psi(Q) = \prod_k \Psi(Q_k), \quad (3.5.8)$$

Entonces, usando  $E = \sum E_k$ , la ecuación estacionaria de Schrödinger para cada  $k$  queda

$$\frac{1}{2m} \hat{P}_k \hat{P}_{-k} + m\omega_k^2 \hat{Q}_k \hat{Q}_{-k} \Psi(Q_k) = E_k \Psi(Q_k). \quad (3.5.9)$$

Es un buen momento para estudiar la relación de  $\hat{Q}_k$  con  $\hat{Q}_{-k}$  utilizando el hecho de que el operador de posición es igual a su operador adjunto,  $\hat{q}_r = \hat{q}_r^\dagger$  sustituimos

la transformación (3.4.8).

$$\sum_k Q_k e^{ikar} = \sum_k Q_k^\dagger e^{-ikar},$$

esta relación se satisface si

$$\hat{Q}_k = \hat{Q}_{-k}^\dagger, \quad (3.5.10)$$

que a su vez implica

$$\hat{P}_k = \hat{P}_{-k}^\dagger. \quad (3.5.11)$$

Estas relaciones indican que los estados  $k$  y  $-k$  son estados degenerados, es decir, comparten la misma energía. El sistema queda descrito por un conjunto de  $N$  osciladores independientes que resolveremos de manera similar a la sección 2.5 pero con un cambio en la interpretación denominado como segunda cuantización.

### 3.6. Segunda cuantización

Para resolver la ecuación (3.5.9) podemos hacer como en la sección 2.5 y definir un par de operadores para cada valor de  $k$ , tales que

$$\hat{A}_k^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega_k}} (-i\hat{P}_k + m\omega_k \hat{Q}_{-k}) \quad (3.6.1)$$

$$\hat{A}_k \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega_k}} (i\hat{P}_{-k} + m\omega_k \hat{Q}_k), \quad (3.6.2)$$

la inclusión de los estados  $-k$  no presenta ninguna diferencia en las reglas de conmutación,

$$[\hat{A}_k^\dagger, \hat{A}_{k'}] = \delta_{kk'} \quad (3.6.3)$$

$$[\hat{A}_k^\dagger, \hat{A}_{k'}^\dagger] = [\hat{A}_k, \hat{A}_{k'}] = 0, \quad (3.6.4)$$

tampoco en la forma del hamiltoniano

$$\hat{H} = \hbar\omega_k (\hat{A}_k^\dagger \hat{A}_k + \frac{1}{2}) = \hbar\omega_k (\hat{A}_k \hat{A}_k^\dagger - \frac{1}{2}). \quad (3.6.5)$$

Guiados por la idea, de que las vibraciones en los cristales se comportan como partículas con momento  $k$ , hacemos una reinterpretación de la función de onda extendiendo el espacio de Hilbert al espacio de Fock

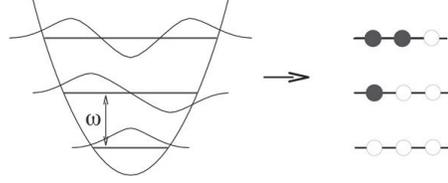


Figura 3.3: Cambio de interpretación

$$|n\rangle = \prod_k |n_k\rangle. \quad (3.6.6)$$

En vez de pensar en un sistema de una partícula a ciertos niveles de energía pensamos en un conjunto de cuasipartículas denominadas fonones, la interpretación de los operadores cambia

$$\hat{A}_k^\dagger |n_k\rangle = \sqrt{n_k + 1} |n_k + 1\rangle \quad (3.6.7)$$

$$\hat{A}_k |n_k\rangle = \sqrt{n_k} |n_k - 1\rangle \quad (3.6.8)$$

el operador  $\hat{A}_k^\dagger$  crea un fonón en el estado  $k$  y el operador  $\hat{A}_k$  remueve un fonón en el estado  $k$  del sistema, por eso se renombran como operadores de creación y aniquilación, respectivamente. El estado (3.6.6), a diferencia de los estados utilizados anteriormente es un estado en la representación del número de ocupación, es decir que cada valor  $n_k$  es el número de partículas en el estado  $k$  del sistema, donde este es el valor propio del operador de número

$$\hat{n}_k |n_k\rangle \equiv \hat{A}_k^\dagger \hat{A}_k |n_k\rangle = n_k |n_k\rangle. \quad (3.6.9)$$

Cada partícula tiene una contribución de  $\hbar\omega_k$  en la energía,

$$\hat{H} \hat{A}_k^\dagger |n_k\rangle = (E + \hbar\omega_k) \hat{A}_k^\dagger |n_k\rangle \quad (3.6.10)$$

$$\hat{H} \hat{A}_k |n_k\rangle = (E - \hbar\omega_k) \hat{A}_k |n_k\rangle, \quad (3.6.11)$$

por esta razón es que el fonón es el cuanto de energía de las vibraciones en cristales, así como el fotón es el cuanto en el campo electromagnético. Definimos el estado

de mínima energía como el estado que contiene cero partículas  $|0\rangle = |0, 0, \dots, 0, 0\rangle$  para todo estado  $k$ , la acción del operador de aniquilación sobre el estado vacío es

$$\hat{A}_k |0\rangle = 0. \quad (3.6.12)$$

Los estados excitados se obtienen de agregar fonones mediante la aplicación operador de creación al estado vacío.

### 3.7. Estados coherentes

Se dice que dos ondas son coherentes si tienen la misma frecuencia y la diferencia de fase entre ambas se mantiene constante. Para el caso de la mecánica cuántica, el concepto fue propuesto por Schrödinger en 1926 con la idea de encontrar soluciones que satisficieran el principio de correspondencia, éstos son estados del oscilador armónico cuántico que evolucionan siguiendo el movimiento de oscilador armónico clásico.

$$|\alpha\rangle = \prod_k e^{-\frac{1}{2}|\alpha_k|^2} \sum_{n_k} \frac{\alpha_k^{n_k}}{n_k!} (\hat{A}_k^\dagger)^{n_k} |0\rangle \quad (3.7.1)$$

donde  $\alpha_k$  es el valor propio del operador de aniquilación aplicado al estado coherente

$$\hat{A}_k |\alpha_k\rangle = \alpha_k |\alpha_k\rangle \quad (3.7.2)$$

con  $|\alpha\rangle = \prod |\alpha_k\rangle$ ,  $\alpha_k$  es un número complejo porque el operador de aniquilación no es hermitiano. En apariencia complicado, este estado es una transformación efectuada sobre el estado base por un operador unitario  $|\alpha\rangle = S^\dagger(\alpha) |0\rangle$  cuyo propósito es desplazar las funciones del centro; en la representación de coordenadas de posición

$$\Psi_\alpha(q_r) = \Psi(q_r - \langle q_r \rangle_\alpha), \quad (3.7.3)$$

donde  $\langle q_r \rangle_\alpha$  es el valor esperado de  $q_r$  en el estado  $\alpha$ , si obtenemos la dependencia temporal de este estado podremos comprobar si es cierto que sigue la evolución del

sistema clásico, para esto colocaremos  $q_r$  en términos de los operadores de creación y aniquilación, usando las ecuaciones (3.6.1) y (3.6.2) reescribimos

$$Q_k(t) = \left(\frac{\hbar}{2m\omega_k}\right)^{\frac{1}{2}}(A_k(t) + A_{-k}^\dagger(t)), \quad (3.7.4)$$

sustituimos en (3.4.8)

$$q_r(t) = \left(\frac{\hbar}{2m\omega_k N}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_k (A_k e^{ikar-i\omega_k t} + A_k^\dagger e^{-ikar-i\omega_k t}), \quad (3.7.5)$$

utilizado (3.7.2) para resolver el valor esperado de  $q_r(t)$  en el estado coherente queda

$$\langle \alpha | q_r(t) | \alpha \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega_k N}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_k (\alpha_k e^{ikar-i\omega_k t} + \alpha_k^* e^{-ikar-i\omega_k t}), \quad (3.7.6)$$

el resultado es una onda viajera.

$$\langle q_r \rangle_\alpha(t) = \left(\frac{2\hbar}{m\omega_k N}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_k \cos(kar - \omega_k t) \quad (3.7.7)$$

En síntesis, de acuerdo al principio de correspondencia, cada modo normal de vibración clásico tiene asociado en mecánica cuántica un estado coherente al que se le asocia un conjunto de kets de la forma  $|\alpha_k\rangle$ . Así como clásicamente la solución más general posible es una combinación lineal de todos los modos normales de vibración, en mecánica cuántica tenemos la expresión (3.7.7). En el momento de visualizar la onda del fonón, lo que haremos será recurrir a la conducta de cada una de las  $Q_k$  porque son las que están asociadas con los modos normales.

En el siguiente capítulo veremos cómo abordar el caso de la cuerda continua y de qué manera aplicar los elementos que hemos visto para la cadena de masas.

## 4. Cuerda continua

En este capítulo vamos a estudiar las vibraciones en una cuerda continua para establecer las diferencias y similitudes del proceso discreto y el continuo.

### 4.1. Campo clásico

El sistema es una cuerda con densidad homogénea  $\rho$  y longitud  $L$  que oscila con vibraciones pequeñas, el desplazamiento de la  $r$ -ésima partícula  $q_r(t)$  del sistema discreto es ahora una función de la posición  $q(x, t)$ , denominado campo. La condición de frontera cíclica toma la forma

$$q(0, t) = q(L, t). \quad (4.1.1)$$

Los elementos de nuestro sistema se encontrarán en el continuo, por ejemplo, las funciones lagrangiana y hamiltoniana son densidades y la fuerza es medida por unidad de longitud; así, la ley de Hooke para el continuo es

$$\sigma = \mathcal{E} \frac{\partial q}{\partial x} \quad (4.1.2)$$

donde  $\sigma$  es la tensión en la cuerda,  $\mathcal{E}$  es el módulo de elasticidad de Young y  $\frac{\partial q}{\partial x}$  es la deformación de la cuerda, entonces la densidad lagrangiana será

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \rho \dot{q}^2 - \frac{1}{2} \mathcal{E} \left( \frac{\partial q}{\partial x} \right)^2. \quad (4.1.3)$$

Para obtener las ecuaciones de movimiento ya no podemos invocar las ecuaciones de Euler-Lagrange, pues funcionaba para partículas puntuales, entonces hacemos una generalización para el continuo.

Dada una densidad lagrangiana  $\mathcal{L}(\phi, \partial_\mu \phi)$  que depende del campo  $\phi$  y de sus gradientes  $\partial_\mu \phi = \partial \phi / \partial x^\mu$ , con  $\mu = 0, 1, 2, 3$  donde  $\mu = 0$  es la coordenada temporal, y los

otros tres las coordenadas espaciales<sup>3</sup>. definimos la acción como la integral en una región  $\Omega$  del espaciotiempo como

$$S = \int_{\Omega} \mathcal{L} d^{\mu}x \quad (4.1.4)$$

donde  $d^{\mu}x = dx^0 dx^1 dx^2 dx^3$ , La variación de la acción es

$$\delta S = \int_{\Omega} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} \delta \phi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_{\mu} \phi)} \delta (\partial_{\mu} \phi) \right) d^{\mu}x \quad (4.1.5)$$

utilizando

$$\delta (\partial_{\mu} \phi) = \partial_{\mu} (\delta \phi) \quad (4.1.6)$$

derivamos por partes el segundo término de la integral, haciendo uso de que la variación en las fronteras es cero, tenemos

$$\delta S = \int_{\Omega} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial x^{\mu}} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_{\mu} \phi)} \right) \delta \phi d^{\mu}x \quad (4.1.7)$$

Aplicamos el principio variacional de mínima acción  $\delta S = 0$ , para cualquier variación en el campo  $\delta \phi \neq 0$ ,

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial x^{\mu}} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_{\mu} \phi)} = 0. \quad (4.1.8)$$

Estas son las ecuaciones de Euler-Lagrange para el campo. Aplicado la lagrangiana (4.1.3) obtenemos

$$\rho \frac{\partial^2 q}{\partial t^2} - \mathcal{E} \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} = 0, \quad (4.1.9)$$

la familiar ecuación de la onda.

## 4.2. Frecuencia de oscilación

Siguiendo las ideas de la cadena lineal, forzamos al sistema a oscilar a una frecuencia  $\omega$  proponiendo como solución una onda plana con el propósito de encontrar cómo

---

<sup>3</sup>Usando notación covariante

cambia la frecuencia con respecto al número de onda,

$$q(x, t) = q_0 e^{ikx - i\omega t} \quad (4.2.1)$$

con  $q_0$  el desplazamiento en la posición  $x = 0$  en  $t = 0$ ; sustituimos esta propuesta en la ecuación (4.1.9). Calculando las segundas derivadas parciales

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} &= -k^2 q_0 e^{ikx - i\omega t} \\ \frac{\partial^2 q}{\partial t^2} &= -\omega^2 q_0 e^{ikx - i\omega t} \end{aligned}$$

entonces queda sencillamente

$$\begin{aligned} -\rho\omega^2 q_0 e^{ikx - i\omega t} + \mathcal{E}k^2 q_0 e^{ikx - i\omega t} &= 0 \\ -\rho\omega^2 + \mathcal{E}k^2 &= 0 \end{aligned}$$

resolviendo para  $\omega$

$$\omega_k = \left(\frac{\mathcal{E}}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}} |k| \quad (4.2.2)$$

obtenemos una relación de dispersión lineal.

### 4.3. Relación de dispersión

El módulo de Young y la densidad son características del medio, por lo tanto, siempre constantes; reescribimos

$$\omega = v_s |k| \quad (4.3.1)$$

donde  $v_s = \left(\frac{\mathcal{E}}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}}$ , esta es la velocidad de propagación de la onda plana en el medio. Como establecimos previamente, el medio será dispersivo si la velocidad de grupo y fase son diferentes; de las definiciones (3.3.1) se puede ver claramente que

$$v_g = v_f = v_s, \quad (4.3.2)$$

Por lo tanto la cuerda continua es un medio no dispersivo.

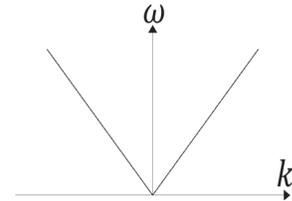


Figura 4.1: Relación de dispersión para una cuerda.

#### 4.4. Modos normales de oscilación

Antes de encontrar los modos normales de oscilación, tenemos que conocer cómo afecta la condición de frontera a los valores de  $k$ ; podemos adelantarnos y decir que esperamos un valor asociado de  $k$  para cada valor  $x$ , pero aún no podemos decir si es una variable continua o discreta, por lo tanto, de la condición de frontera (4.1.1)

$$\begin{aligned} q_0 e^{-i\omega t} &= q_0 e^{ikL - i\omega t} \\ e^{ikL} &= 1 \end{aligned}$$

se sigue que

$$k = \frac{2\pi u}{L} \quad (4.4.1)$$

Donde  $u$  pertenece a los enteros. De nuevo la condición de frontera ha discretizado los valores de  $k$ ; más aún, ya que  $x$  es una variable real tiene infinitos valores, por lo tanto los valores permitidos de  $k$  son

$$-\infty \leq k \leq \infty \quad (4.4.2)$$

y naturalmente los valores de  $u$  son todos los valores del conjunto de los enteros  $\mathbb{Z}$

$$u = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm \infty. \quad (4.4.3)$$

La solución general es un campo  $q$  como una sumatoria de estados caracterizados por el número de onda y su frecuencia de oscilación

$$q(x, t) = \sum_k \phi_k e^{ikx - i\omega_k t} \quad (4.4.4)$$

estos estados caracterizados por la frecuencia de oscilación son los modos normales de oscilación

$$Q_k(t) = L^{\frac{1}{2}} \phi_k e^{-i\omega t}, \quad (4.4.5)$$

el campo en términos de los modos normales queda

$$q(x, t) = L^{-\frac{1}{2}} \sum_k Q_k e^{ikx} \quad (4.4.6)$$

siendo la transformada inversa

$$Q_k = L^{-\frac{1}{2}} \int_0^L q(x, t) e^{-ikx} dx. \quad (4.4.7)$$

Es importante notar que la ecuación de movimiento (4.1.9) aparentemente no presenta el acoplamiento que presentan los sistemas discretos anteriormente abordados, pero si recordamos la definición de derivada, nos daremos cuenta de que esto no es cierto y existe acoplamiento, pues

$$\frac{\partial q(x, t)}{\partial x} = \frac{q(x + \Delta x, t) - q(x, t)}{\Delta x}, \quad (4.4.8)$$

se asocia a las elongaciones de dos "partículas" a distancia infinitesimal  $\Delta x$ . Entonces a partir de nuestra experiencia esperaríamos que el espacio de los modos normales de oscilación describan osciladores independientes; calculemos las segundas derivadas parciales

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} &= - \sum_k k^2 Q_k e^{ikx} \\ \frac{\partial^2 q}{\partial t^2} &= \sum_k \ddot{Q}_k e^{ikx} \end{aligned}$$

al sustituirla en la ecuación de la onda

$$\begin{aligned} \rho \sum_k \ddot{Q}_k e^{ikx} + \mathcal{E} \sum_k k^2 Q_k e^{ikx} &= 0 \\ \rho \ddot{Q}_k + \mathcal{E} k^2 Q_k &= 0, \end{aligned}$$

finalmente obtenemos

$$\ddot{Q}_k + \omega_k^2 Q_k = 0, \quad (4.4.9)$$

una familia de ecuaciones de movimiento de osciladores armónicos, idénticas a las ecuaciones de movimiento (3.4.10).

## 4.5. Cuantización del campo

Para hacer el proceso de cuantización de un campo debemos hacerlo de manera similar al proceso de cuantización para sistemas de partículas y establecer el valor del conmutador para los operadores asociados al campo clásico:

$$[\hat{q}(x, t), \hat{p}(x', t)] = i\hbar\delta(x - x'), \quad (4.5.1)$$

para lograr obtener la ecuación de Schrödinger se requiere la descripción hamiltoniana, por lo tanto, definimos la densidad de momentos conjugados y la densidad hamiltoniana basados en una transición al continuo, la densidad de momentos es

$$p(x, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} = \rho \dot{q}(x, t) \quad (4.5.2)$$

y la densidad hamiltoniana queda

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= p\dot{q} - \mathcal{L} \\ \mathcal{H} &= \frac{p^2}{2\rho} + \frac{1}{2}\mathcal{E}\left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)^2, \end{aligned} \quad (4.5.3)$$

podemos obtener la función hamiltoniana como sigue

$$H = \int_0^L \mathcal{H} dx \quad (4.5.4)$$

Como bien conocemos la descripción en términos de los modos normales resulta la más conveniente para describir los sistemas de osciladores acoplados, por lo tanto haremos la transformación directamente en la hamiltoniana, definiendo el momento lineal en términos de los momentos para los modos normales como

$$p(x, t) = L^{-\frac{1}{2}} \sum_k P_k e^{ikx}, \quad (4.5.5)$$

Así calculamos las componentes del hamiltoniano

$$\begin{aligned} \int_0^L \frac{p^2}{2\rho} dx &= \frac{1}{2\rho} L^{-1} \sum_k \sum_{k'} P_k P_{k'} \int_0^L e^{ix(k+k')} dx = \frac{1}{2\rho} \sum_k P_k P_{-k} \\ \int_0^L \frac{1}{2}\mathcal{E}\left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)^2 dx &= -\frac{1}{2}\mathcal{E} \sum_k \sum_{k'} k k' Q_k Q_{k'} \int_0^L e^{ix(k+k')} dx = \frac{1}{2}\mathcal{E} \sum_k k^2 Q_k Q_{-k}, \end{aligned}$$

esto es posible usando la relación de ortogonalidad para el continuo desarrollada en el apéndice; finalmente el operador hamiltoniano queda.

$$\hat{H} = \frac{1}{2\rho} \sum_k \hat{P}_k \hat{P}_{-k} + \frac{1}{2}\rho \sum_k \omega_k^2 \hat{Q}_k \hat{Q}_{-k} \quad (4.5.6)$$

A partir de aquí utilizamos el formalismo de segunda cuantización desarrollado en la sección 3.6 para describir las perturbaciones o vibraciones en el campo como fonones. Podemos notar que el operador hamiltoniano que describe la cuerda continua es idéntico al operador (3.5.3) de la descripción de la cadena lineal, así como las ecuaciones de movimiento clásicas para ambas descripciones coinciden, las condiciones son iguales cuando  $N \rightarrow \infty$  y  $Na = L$ , estas condiciones serán clave en el siguiente capítulo para visualizar un campo.

## 5. Densidad de probabilidad

En este capítulo desglosaremos la idea de visualizaciones de densidades de probabilidad para sistemas de fonones de Johnson y Gutiérrez.

### 5.1. Técnica de visualización

Para el sistema de dos osciladores acoplados la densidad de probabilidad puede ser observada de manera completa en tres dimensiones, también puede ser visualizada en dos dimensiones representando el eje vertical por medio de una escala de grises, según sea el valor de la densidad marca la tonalidad del punto, a mayor valor se acerca al negro y el blanco representa densidad de probabilidad cero. Esta técnica simula de manera adecuada la superficie de la función que será la clave de las siguientes representaciones.

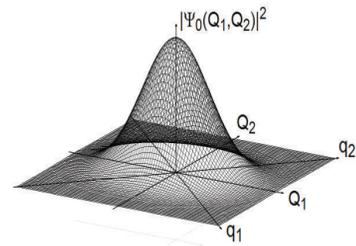


Figura 5.1: Estado base para dos osciladores.

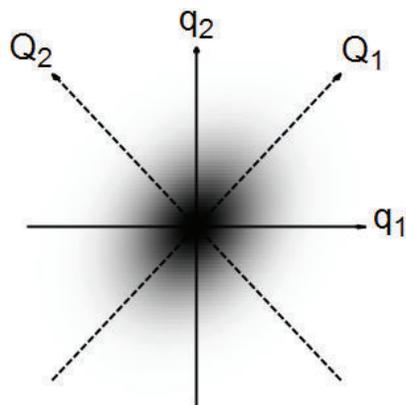


Figura 5.2: Escala de grises para el estado base de un sistema de dos osciladores.

Como hemos establecido a lo largo del texto, el sistema en el espacio de las coordenadas normales es descrito por un conjunto de osciladores armónicos unidimensionales independientes; individualmente describen una densidad de probabilidad familiar, una función gaussiana, así que guiados por la representación en escala de grises realizamos una proyección en una dimensión, pero agregamos un ancho arbitrario para que sea apreciable; los cálculos individuales de las densidades son fácilmente calculables mediante

$$P(Q_1) = |\Psi(Q_1)|^2$$

$$P(Q_2) = |\Psi(Q_2)|^2,$$

finalmente, la última representación del sistema son proyecciones unidimensionales iguales a las anteriores pero en el espacio de coordenadas de posición; para calcular las densidades individuales hacemos

$$P(q_1) = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(Q_1, Q_2)|^2 dq_2$$

$$P(q_2) = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(Q_1, Q_2)|^2 dq_1$$

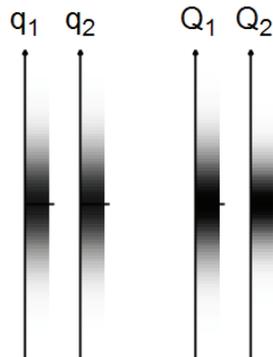


Figura 5.3: Proyecciones unidimensionales

Las proyecciones unidimensionales de la figura 5.3 son complicadas de interpretar, sobre todo las proyecciones en  $Q$ , pues para el espacio de posición se tiene una gráfica que proporciona la probabilidad de encontrar a las partículas en las diferentes posiciones a lo largo del eje  $q$  y las proyecciones en los modos normales no tienen una explicación directa; sin embargo si recordamos las ecuaciones (2.2.12),  $Q_1 = 1/\sqrt{2}(q_2 + q_1)$  describe el centro de masa y  $Q_2 = 1/\sqrt{2}(q_2 - q_1)$  la posición relativa de las partículas

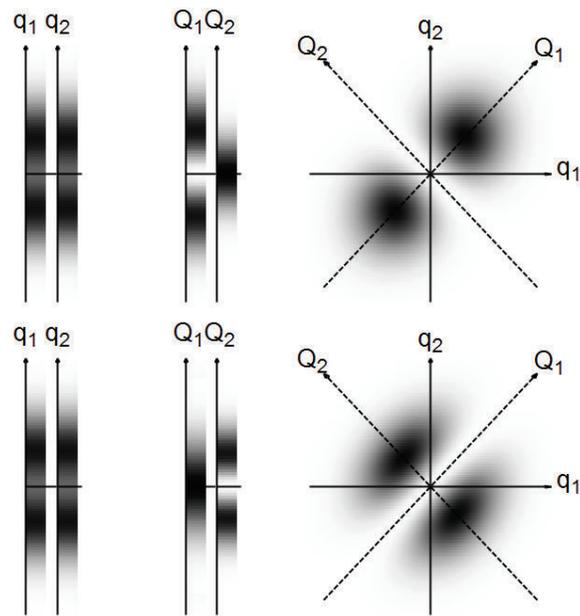


Figura 5.4: Ejemplo de estados excitados en las tres proyecciones  $A_1^\dagger |0, 0\rangle$  (superior) y  $A_2^\dagger |0, 0\rangle$  (inferior).

## 5.2. Visualización de la cadena lineal

Para un sistema con más de dos partículas no podemos seguir usando la proyección en dos dimensiones, pero podemos adaptar los conjuntos de gráficas unidimensionales para representar un espacio de  $N$  partículas; primero agrupamos todos los ejes en uno solo  $q_r$ , con un eje horizontal  $r$  adimensional donde las distancias entre las proyecciones es la distancia  $a$  entre las masas, luego realizamos el mismo procedimiento para las proyecciones en las coordenadas normales, el eje vertical es la agrupación de los ejes en  $Q_k$  y el eje horizontal es el número de onda  $k$ , de igual manera adimensional, la proyección en  $k = 0$  es no existente pues como discutimos anteriormente este corresponde exclusivamente al momento lineal total. Las densidades de probabilidad individuales de  $Q_k$  se calculan

$$P(Q_k) = |\Psi(Q_k)|^2$$

son sencillas, como en el caso para dos partículas, en cambio las proyecciones  $q_r$  se vuelven bastante complejas de calcular

$$P(q_r) = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(q)|^2 dq_1 dq_2 \dots dq_{r-1} dq_{r+1} \dots dq_{N-1} dq_N$$

Donde  $\Psi(q)$  es la función de onda completa en términos de las coordenadas de posición, Una integral que es mejor realizarla numéricamente.

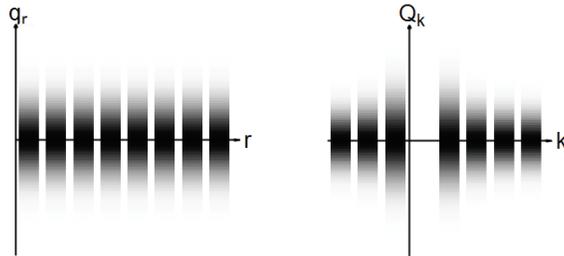


Figura 5.5: Estado base de un sistema de 8 partículas

En la sección 3.7 se estableció que los estados coherentes eran aquellos donde la función de onda era desplazada del centro siguiendo la evolución temporal del sistema clásico; como indica el teorema de Ehrenfest, la evolución del operador de posición sigue la trayectoria de una onda viajera que se propaga en el medio, sea un sólido o el campo de fonones. En la figura 5.7 podemos observar el estado base de la combinación de una onda viajera en  $k = 1$  y  $k = -1$ , este estado es especialmente ilustrativo pues simula de manera adecuada una onda propagándose a través de un sólido, como se aprecia en la figura 5.6.

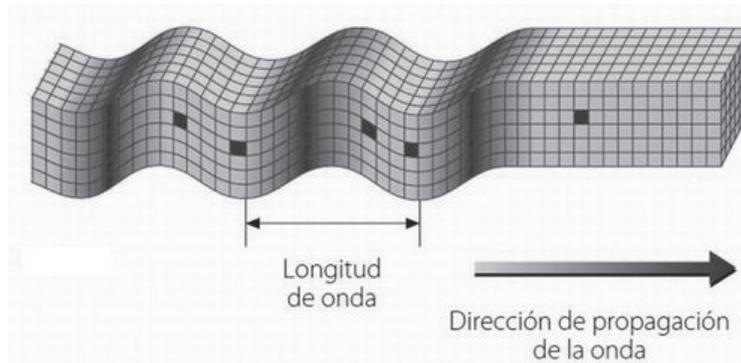


Figura 5.6: Representación de una onda transversal en un sólido

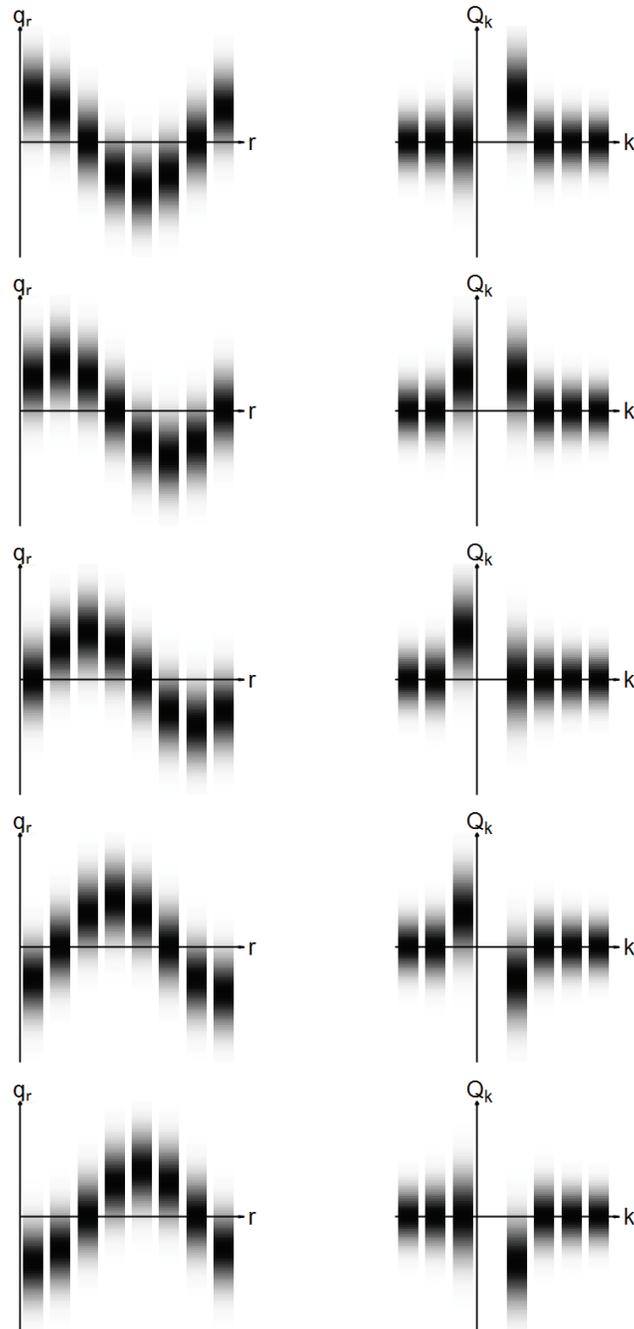


Figura 5.7: Evolución temporal de un estado coherente en  $|k| = 1$  de 8 partículas

### 5.3. Visualización del campo

El estudio de la cuerda elástica nos llevó a que bajo la interpretación de los modos normales de oscilación las ecuaciones de movimiento son iguales para ésta y la cadena lineal, por lo tanto es válido que al aumentar de manera considerable el número de partículas nos acerquemos a la descripción de un campo de fonones, mismo argumento que se traslada a la técnica de visualización de densidad.

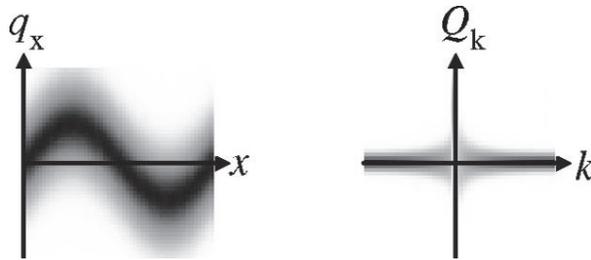


Figura 5.8: Estado coherente en  $k=-1$  de un sistema de 50 partículas

Johnson y Gutiérrez dicen que un estado de 50 partículas es cualitativamente una buena representación de un láser de luz coherente. También pueden representar las ondas eléctricas de la emisión de una antena de radio.

## 6. Análisis y conclusiones

En este trabajo se partió de un estudio del sistema dos osciladores acoplados para establecer que los modos normales de oscilación son aquéllos en los que cada una de las masas del sistema oscila con la misma frecuencia. La descripción en términos de las coordenadas normales permite separar las ecuaciones de movimiento y describir el sistema como dos osciladores armónicos independientes. Debido a que este sistema puede ser observado de manera completa es utilizado para desglosar la técnica de visualización de Johnson y Gutiérrez.

Enseguida estudiamos la cadena lineal, un sistema de  $N$  osciladores acoplados; considerado como un modelo de sólido unidimensional ya que mediante su estudio clásico mostró características como la relación de dispersión que presentan materiales sólidos, como los metales. Otra característica que nos mostró el sistema fue que al ser descrito en términos de los modos normales este muestra dos conceptos de momento, el primero y familiar es el momento lineal  $p_r$  y el segundo es el número de onda  $k$ , denominado como el momento del cristal como consecuencia de que es una cantidad conservada, este último concepto de momento da pie a que cuando describamos la cuantización en términos de los modos normales y obtenemos  $N$  osciladores armónicos cuánticos independientes podamos hacer uso del formalismo de segunda cuantización del cual interpretamos los operadores de ascenso y descenso, usuales de la solución de un oscilador armónico cuántico, como operadores de creación y aniquilación, respectivamente, cuya aplicación sobre la función de onda agrega o elimina una partícula de energía  $\hbar\omega_k$ , en vez de la interpretación usual de los niveles de energía; la diferencia recae en que las funciones de onda existen en una extensión del espacio de Hilbert llamado espacio de Fock.

La cuerda continua es estudiada mediante la mecánica clásica de campos, tras aplicar el principio de mínima acción obtenemos la familiar ecuación de la onda, el

acoplamiento se da en elementos separados a una distancia infinitesimal, por lo tanto, podemos seguir las ideas de la cadena lineal y resolver la ecuación de movimiento en la descripción de las coordenadas normales  $Q_k(t)$ , la diferencia es que para este sistema tenemos un número infinito de modos pues el sistema consta de un número infinito de grados de libertad  $q(x, t)$ , después de realizar la cuantización canónica y la subsecuente descripción en términos de los modos normales de oscilación se vuelve aparente que la descripción discreta y continua coinciden. El uso de la segunda cuantización para describir un campo cuántico lleva a la interpretación de que las vibraciones del campo se manifiestan en forma de elementos con características de partículas, específicamente cuasipartículas, llamadas fonones para las vibraciones de una red cristalina como nuestro sistema.

Son todos estos desarrollos y conceptos en los que descansa la técnica de visualización de la densidad de probabilidad del sistema de osciladores acoplados; el principal, es el hecho de que bajo la descripción de los modos normales  $Q_k$  el sistema queda descrito por un conjunto de osciladores independientes; así cada función de onda separada es una gaussiana proyectada en una dimensión cuyo ancho permite observar la escala de grises que representa el valor de la función de densidad, después esta idea es abstraída al espacio de la posición  $q_r$ , estas dos proyecciones son especialmente ilustrativas cuando se utilizan los estados coherentes, los cuales descentralizan la función de onda en valor de la posición promedio, es decir el sistema cuántico sigue la evolución temporal del sistema clásico como indica el teorema de Ehrenfest y el principio de correspondencia, así como es el caso para la figura 5.7, las funciones siguen el movimiento de una onda viajera, similar a como se propaga una onda en un sólido, y cuando  $N \rightarrow \infty$  se puede observar la función de densidad de probabilidad de un campo cuántico.

## 7. Apéndice

En esta sección se presentan ciertos desarrollos que son utilizados recurrentemente durante el texto, no son esenciales pero pueden ser de gran utilidad si se desea analizar los desarrollos con más detalle.

### 7.1. Relaciones ortogonales

Probemos la siguiente representación de la delta de Kronecker en una serie geométrica finita

$$\sum_{n=0}^{N-1} e^{\frac{2\pi i}{N}(r-s)n} = N\delta_{rs}, \quad (7.1.1)$$

donde  $n, r, s$  son números enteros, si  $r=s$  entonces

$$\sum_{n=0}^{N-1} 1 = N,$$

Si  $r - s = \sigma$ , con  $\sigma$  como cualquier entero entonces

$$\sum_{n=0}^{N-1} e^{\frac{2\pi i}{N}\sigma n} = \frac{1 - e^{2\pi i\sigma}}{1 - e^{2\pi i\sigma/N}} = 0.$$

De manera similar, para el continuo, probemos la siguiente representación de la delta de Dirac

$$\int_0^L e^{\frac{2\pi i}{L}(r-s)x} dx = L\delta_{rs}, \quad (7.1.2)$$

donde  $r$  y  $s$  son números enteros y  $x$  una variable real, si  $r=s$  entonces

$$\int_0^L dx = L,$$

si  $r - s = \sigma$ , con  $\sigma$  cualquier entero entonces

$$\int_0^L e^{\frac{2\pi i}{L}\sigma x} dx = \frac{e^{2\pi i\sigma} - 1}{2\pi i\sigma} L = 0.$$

## 7.2. Código de gráficos

Los gráficos de las figuras 5.1, 5.2, 5.3, 5.4, 5.5 y 5.7 se encuentran en el trabajo de Johnson y Gutierrez, pero para el presente trabajo se reprodujeron en el lenguaje del graficador Gnuplot versión 4.6; aquí se presentan algunos ejemplos por si se desean analizar.

```
gnuplot> set termopt enhanced
gnuplot> set termoption dash
gnuplot> set style line 1 lt 2 lc rgb 'black' lw 2
gnuplot> set size square
gnuplot> set border 0
gnuplot> set samples 1000
gnuplot> unset colorbox
gnuplot> set isosamples 100, 100
gnuplot> set view map scale 1
gnuplot> set style function pm3d
gnuplot> set palette negative nops_allcF maxcolors 0 gamma 1 gray
gnuplot> set arrow 1 from -2.2,-2.2 to 2.2,2.2 ls 1 front filled
gnuplot> set arrow 2 from 2.2,-2.2 to -2.2,2.2 ls 1 front filled
gnuplot> set label 1 'Q_1' at graph 0.93, graph 0.99 front font 'Arial,20'
gnuplot> set label 2 'Q_2' at graph -0.05, graph 1 front font 'Arial,20'
gnuplot> unset xtics
gnuplot> set xrange [-2.5:2.5]
gnuplot> set xzeroaxis
gnuplot> set label 3 'q_1' at graph 1.02, graph 0.53 font 'Arial,20'
gnuplot> set arrow 3 from -2.5,0 to 2.5,0 front filled lw 2
gnuplot> unset ytics
gnuplot> set yrange [-2.5:2.5]
gnuplot> set yzeroaxis
gnuplot> set label 4 'q_2' at graph 0.45, graph 1.08 font 'Arial,20'
gnuplot> set arrow 4 from 0,-2.5 to 0,2.5 front filled lw 2
gnuplot> f(x,y) = ((y+x)**2)*exp(-(1.3*x**2)-(1.3*y**2)+0.7*x*y)
gnuplot> splot f(x,y)
```

Este es el código del gráfico en dos dimensiones de la parte superior de la figura 5.4, en su mayor parte son ajustes estéticos, el comando más importante es “set style function pm3d” el cual permite realizar el mapeado de las superficies en escala de grises.

```
gnuplot> set size ratio 1
gnuplot> set view map scale 1
gnuplot> set termopt enhanced
gnuplot> set border 0
gnuplot> unset colorbox
```

```

gnuplot> set isosamples 100, 100
gnuplot> set samples 1000
gnuplot> set style function pm3d
gnuplot> set palette negative nops_allcF maxcolors 0 gamma 1 gray
gnuplot> unset xtics
gnuplot> set xzeroaxis
gnuplot> set xrange [-6:10]
gnuplot> set arrow 1 from -6,0 to 10.5,0 front filled lw 2
gnuplot> set label 1 'k' at graph 1.05, graph 0.5 font ,arial,20"
gnuplot> unset ytics
gnuplot> set yzeroaxis
gnuplot> set yrange [-5:5]
gnuplot> set arrow 2 from 0,-5 to 0,5 front filled lw 2
gnuplot> set label 2 'Q_k' at graph 0.33, graph 1.05 font ,arial,20"
gnuplot> f1(x,y) = (x > -5.75 && x < -4.25) ? exp(-0.9238*y**2) : 0/0
gnuplot> f2(x,y) = (x > -3.75 && x < -2.25) ? exp(-(sqrt(2)/2)*y**2) : 0/0
gnuplot> f3(x,y) = (x > -1.75 && x < -.25) ? exp(-0.3826*y**2) : 0/0
gnuplot> f4(x,y) = (x > 2.25 && x < 3.75) ? exp(-0.3826*y**2) : 0/0
gnuplot> f5(x,y) = (x > 4.25 && x < 5.75) ? exp(-(sqrt(2)/2)*y**2) : 0/0
gnuplot> f6(x,y) = (x > 6.25 && x < 7.75) ? exp(-0.9238*y**2) : 0/0
gnuplot> f7(x,y) = (x > 8.25 && x < 9.75) ? exp(-y**2) : 0/0
gnuplot> splot f1(x,y), f2(x,y), f3(x,y), f4(x,y), f5(x,y), f6(x,y), f7(x,y)

```

Este es el código del gráfico del estado base en la representación de los modos normales de oscilación de la figura 5.5, para representar las proyecciones en una dimensión en la escala de grises las funciones se definieron en dos dimensiones lo que crea una superficie en todo el espacio, así limitamos el grosor de esa superficie con la herramienta “(x > a && x < b)” para simular el pequeño grosor y la separación entre las proyecciones unidimensionales.

## Bibliografía

Johnson, Scott C., Gutierrez, Thomas D., Visualizing the phonon wave function, American Journal of Physics, 70(2002), 227, [figura 5.8].

Pávlov, P.V., Jojlov, A.F. Física del estado sólido, Mir, 1987.

Kittel, Charles, Quantum theory of solids, John Wiley & Sons, Inc., 1967.

Marion, Jerry B., Thornton, Stephen T., Classical Dynamics of particles and systems, Thomson Brooks/Cole, 5ed.

Griffiths, David J., Introduction to Quantum Mechanics, Pearson Education, Inc., 2005 2ed.

Greiner, Walter, Reinhardt, Joachim, Field quantization, Springer, 1986.

Nebot, Miguel, Oscilaciones acopladas, Departamento de Física Teórica – IFIC Universidad de València – CSIC.

Simons, Ben, Advanced Quantum Mechanics - course webpage, Lec 16-17 Quantum field theory: from phonons to photons, [figura 3.3].

Hermele, Mike, Notes on 2nd Quantization for Physics 7450, spring 2010.

Martín Fierro, Eva, Los estados coherentes en la descripción semiclásica de la mecánica cuántica, Universidad de La Laguna, 2004.

García, Miguel Á. Terremotos o seísmos, [Figura 5.6].