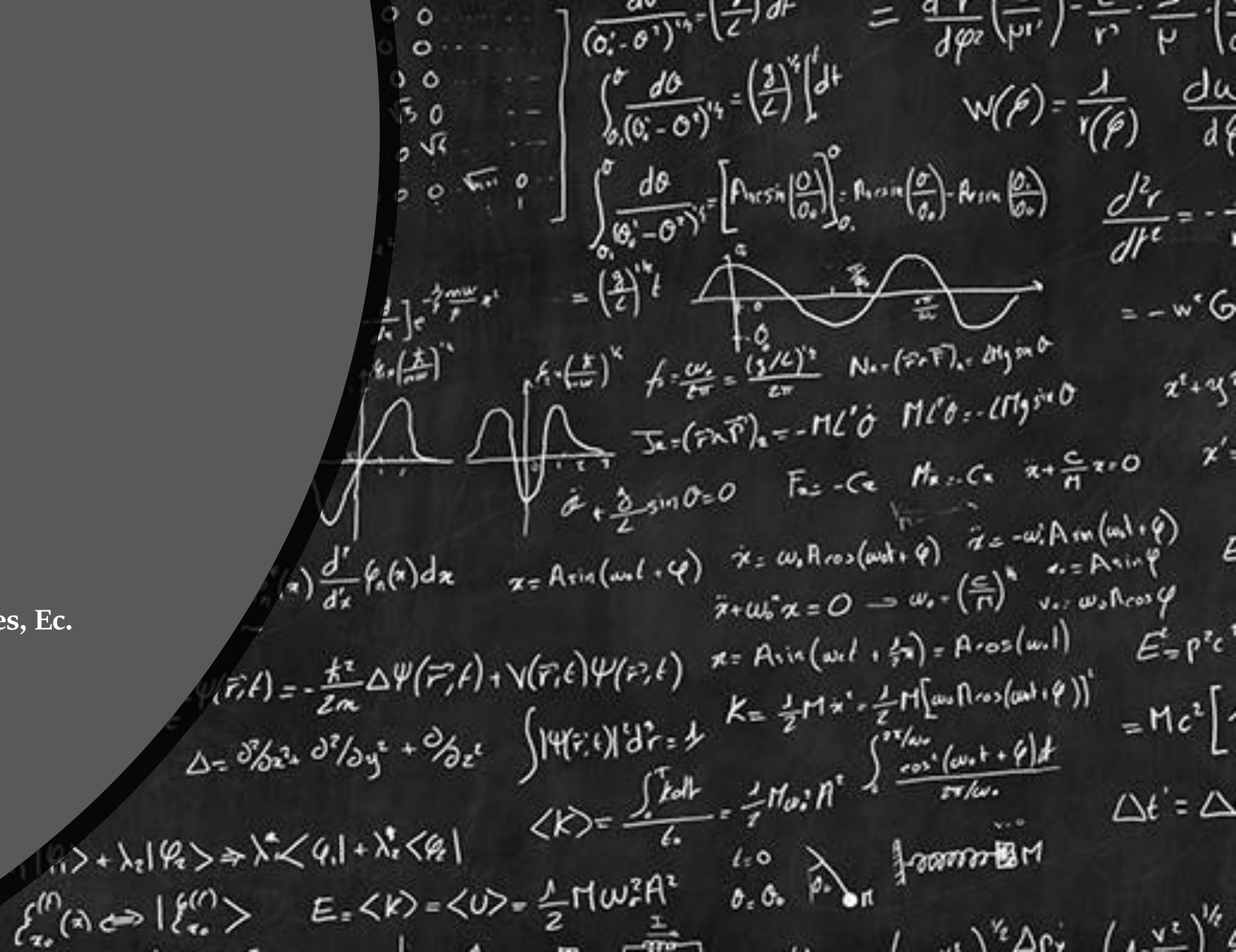
Física 4

Guía 7: Principio de incertidumbre, Operadores, Ec. de Schrödinger.

(20/10)

2C 2021. Clase Giribet



- Vimos que los observables físicos están representados por operadores

  OBS $A \longrightarrow$ OPERADOR $\hat{A}$

- Todos los posibles resultados de A son los autovalores de $\hat{A}$, es decir $\{a_n\}$

- Toda observación de un sistema en un estado propio u_n conduce a la medición de a_n.

- La aplicación sucesiva de dos operadores depende en general del orden. Es decir, que en general $\hat{A}\hat{B}\phi \neq \hat{B}\hat{A}\phi$

- Si no dependiera del orden, i.e. $\hat{A}\hat{B}\phi = \hat{B}\hat{A}\phi \Longrightarrow (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\phi = 0 \Longrightarrow \underbrace{\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}}_{[\hat{A},\hat{B}]} = 0$

  $[\hat{A},\hat{B}]$ conmutador de $\hat{A}$ y $\hat{B}$

  Cuando dos operadores conmutan decimos que son <u>compatibles</u>.

13. Se define el conmutador entre dos operadores lineales $\hat{A}$ y $\hat{B}$ como:

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]\phi \equiv \hat{A}\left(\hat{B}\phi\right) - \hat{B}\left(\hat{A}\phi\right)$$

donde ϕ es una función arbitraria. Algunas de las propiedades de los conmutadores son las siguientes:

$$\begin{aligned}
\left[\hat{A},\hat{B}\right] &= -\left[\hat{B},\hat{A}\right] \quad (*)\\
\left[\hat{A},\hat{A}\right] &= 0\\
\left[\hat{A}+\hat{B},\hat{C}\right] &= \left[\hat{A},\hat{C}\right]+\left[\hat{B},\hat{C}\right]\\
\left[\hat{A}\star\hat{B},\hat{C}\right] &= \hat{A}\left[\hat{B},\hat{C}\right]+\left[\hat{A},\hat{C}\right]\hat{B}
\end{aligned}$$

Calcular $[\hat{x},\hat{p}_x]$, $[\hat{x},\hat{p}_x^2]$, $[\hat{x}^{-1},\hat{p}_x]$, $[\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x,\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y]$ y sus variantes intercambiando las cooordenadas, $\left[\hat{x},\hat{H}\right]$ y $\left[\hat{p}_x,\hat{H}\right]$. Nota: considere que $\hat{H}=\hat{p}_x^2/2m+V(\hat{x})$.

En la rep. de posición

$$\hat{x} \rightarrow x$$

$$\hat{p}_x \rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

$$-[\hat{A}\hat{B},\hat{C}] = -\hat{A}[\hat{B},\hat{C}]-[\hat{A},\hat{C}]\hat{B}$$

$$[\hat{C},\hat{A}\hat{B}] = \hat{A}[\hat{C},\hat{B}]+[\hat{C},\hat{A}]\hat{B} \quad (*)$$

- $$[\hat{x},\hat{p}_x]\phi = (\hat{x}\hat{p}_x-\hat{p}_x\hat{x})\phi = \left[x(-i\hbar)\frac{\partial\phi}{\partial x} - (-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x}(x\phi)\right]$$

$$= -i\hbar\left[x\cancel{\frac{\partial\phi}{\partial x}} - \phi - x\cancel{\frac{\partial\phi}{\partial x}}\right] = i\hbar\phi \Rightarrow \boxed{[\hat{x},\hat{p}_x]=i\hbar}$$

En general $[\hat{r}_i,\hat{p}_j]=i\hbar\delta_{ij}$ $\quad([\hat{y},\hat{p}_x]=0)$

- $$[\hat{x},\hat{p}_x^2] = [\hat{x},\hat{p}_x\hat{p}_x] \overset{(*)}{=} \hat{p}_x\underbrace{[\hat{x},\hat{p}_x]}_{i\hbar} + \underbrace{[\hat{x},\hat{p}_x]}_{i\hbar}\hat{p}_x = \boxed{2i\hbar\,\hat{p}_x = [\hat{x},\hat{p}_x^2]}$$

En general $[A,B^n]=n[A,B]B^{n-1}$

- <u>El principio de correspondencia</u>: Las relaciones de la mecánica clásica son satisfechas en mecánica cuántica reemplazando las magnitudes clásicas por operadores.

CLÁSICAMENTE   CUÁNTICAMENTE

Ej: $L_z = (\bar{r} \times \bar{p})_z = x p_y - y p_x \longrightarrow \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$

$$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \; ; \; \hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y$$

$$[\underbrace{\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x}_{\hat{L}_z}, \underbrace{\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y}_{L_x}] = [\hat{L}_z, \hat{L}_x] \longrightarrow$$ Usando reglas de suma:

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = [\hat{x}\hat{p}_y, \hat{y}\hat{p}_z] - \underbrace{[\hat{x}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_y]}_{=0} - \underbrace{[\hat{y}\hat{p}_x, \hat{y}\hat{p}_z]}_{=0} + [\hat{y}\hat{p}_x, \hat{z}\hat{p}_y]$$

(*) $[\hat{p}_y, \hat{p}_y]\phi = (\hat{p}_y\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{p}_y)\phi = (-i\hbar)^2\left[\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} - \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\right] = 0$

$[\hat{y}, \hat{y}]\phi = (\hat{y}\hat{y} - \hat{y}\hat{y})\phi = 0$

---

regla del producto

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = [\hat{x}\hat{p}_y, \hat{y}\hat{p}_z] + [\hat{y}\hat{p}_x, \hat{z}\hat{p}_y] =$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = \hat{x}\underbrace{[\hat{p}_y, \hat{y}\hat{p}_z]}_{[\hat{p}_y,\hat{y}]\hat{p}_z + \underbrace{\hat{y}[\hat{p}_y,\hat{p}_z]}_{=0}} + \underbrace{[\hat{x}, \hat{y}\hat{p}_z]}_{=0}\hat{p}_y + \hat{y}\underbrace{[\hat{p}_x, \hat{z}\hat{p}_y]}_{=0} + \underbrace{[\hat{y}, \hat{z}\hat{p}_y]}_{\hat{z}[\hat{y},\hat{p}_y]}\hat{p}_x$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = \hat{x}(-i\hbar)\hat{p}_z + \hat{z}(i\hbar)\hat{p}_x = i\hbar\underbrace{(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)}_{\hat{L}_y}$$

$$\boxed{[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y}$$

En general $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk} L_k$

Símbolo de Levi-Civita

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} +1, & ijk \text{ están ordenados cíclicamente } (*) \\ -1, & \text{si no lo están} \\ 0, & \text{si algún índice está repetido} \end{cases}$$

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\, \varepsilon_{123} L_z$$

$i = x = $ "1" $\quad j = y = $ "2" $\quad k = z = $ "3"

$\{123\}$ están ordenados cíclicamente

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_y] = i\hbar\, \underbrace{\varepsilon_{321}}_{-1} \hat{L}_x \qquad \{321\}$$

$$= -i\hbar \hat{L}_x$$

• Consideremos el operador $\underset{1D}{\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \hat{V}(x)$

En la base de POS:

$\hat{X} \to x$

$\hat{V}(x)\phi(x) = V(x)\phi(x)$

$$[\hat{X}, \hat{H}] = \left[\hat{X}, \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \hat{V}(x)\right] = \underbrace{\left[\hat{X}, \frac{\hat{p}_x^2}{2m}\right]}_{} + \underbrace{[\hat{X}, \hat{V}(x)]}_{}$$

$$\frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x [\hat{X}, \hat{p}_x] + [\hat{X}, \hat{p}_x]\hat{p}_x\right) = \frac{2}{2m}[\hat{X}, \hat{p}_x]\hat{p}_x \qquad [\hat{X},\hat{p}_x] = i\hbar$$

$$[\hat{X}, \hat{V}(x)]\phi = (\hat{X}\hat{V}(x) - \hat{V}(x)\hat{X})\phi(x) = (\hat{X}V(x)\phi(x) - \hat{V}(x)\, x\,\phi(x)) = (V(x)\, x\,\phi(x) - x\, V(x)\phi(x)) = 0$$

$$[\hat{X}, \hat{H}] = \frac{1}{m} i\hbar\, \hat{p}_x = i\hbar \frac{\hat{p}_x}{m}$$

(Caso particular de: $[\hat{A}, f(\hat{B})] = [\hat{A}, \hat{B}]\, f'(\hat{B})$)

$$\left[\hat{p}_x, \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \hat{V}(x)\right] = \overbrace{\left[\hat{p}_x, \frac{\hat{p}_x^2}{2m}\right]}^{=0} + \underbrace{[\hat{p}_x, \hat{V}(x)]}_{}$$

depende del problema

$$-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}(V(x)\phi(x)) - V(x)\frac{\partial \phi}{\partial x}\right) \neq 0$$

14. Demostrar que si dos operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$ conmutan $\left(\left[\hat{A},\hat{B}\right]=0\right)$, entonces existe una base de autofunciones ϕ común a ambos operadores $\left(\textit{es decir } \hat{A}\phi=\alpha\phi \textit{ y } \hat{B}\phi=\beta\phi\right)$.

• Si $[\hat{A},\hat{B}]=0$ se dice que A y B son observables COMPATIBLES

- Supongo (caso sin degeneración y discreto) que $\hat{A}\phi_n=\alpha_n\phi_n$ y que $[\hat{A},\hat{B}]=0$
Entonces lo que hay que probar es que $\{\phi_n\}$ también es base de autofunciones de $\hat{B}$.

- Calculemos

$$\underbrace{\int \phi_m^*(x)\,\hat{B}\overbrace{\hat{A}\,\phi_n(x)}^{\alpha_n\phi_n}\,dx}_{\displaystyle\int \phi_n(x)\left(\hat{B}\hat{A}\right)^*\phi_m^*(x)\,dx} = \alpha_n\int \phi_m^*\,\hat{B}\,\phi_n\,dx$$

$$\int \phi_n(x)\left(\hat{B}\hat{A}\right)^*\phi_m^*(x)\,dx = \int \phi_n(x)\,B^*\underbrace{A^*\phi_m^*(x)}\,dx =$$

$$A^*\phi_m^*(x) = \left(\alpha_m\phi_m(x)\right)^* = \alpha_m\phi_m^*$$

Como $\hat{A}$ y $\hat{B}$ son observables entonces deben ser hermíticos y sus a. valores reales

$$= \alpha_m \int \phi_n \, B^* \phi_m^* \, dx = \alpha_m \int \phi_m^* \, B \, \phi_n \, dx$$

Por lo tanto:

$$\alpha_n \int \phi_m^* \hat{B} \, \phi_n \, dx = \alpha_m \int \phi_m^* \hat{B} \, \phi_n \, dx$$

$$\Rightarrow \underbrace{(\alpha_n - \alpha_m)}_{\neq 0} \underbrace{\int \phi_m^*(x) \, \hat{B} \, \phi_n(x) \, dx}_{= 0 \ \forall \, m \neq n} = 0 \Rightarrow \boxed{B \phi_n = \beta_n \phi_n}$$

Entonces $\hat{A}$ y $\hat{B}$ comparten las mismas autofunciones.

¿Qué implicaciones tiene que dos operadores sean compatibles? (i.e. que conmuten)

Podemos medir simultáneamente los observables con tanta precisión como queramos.

Si $[A,B]=0 \Longrightarrow \psi(x) \xrightarrow{\text{mido } \hat{A}}$ (Ej.) obtengo α_n y estoy con $\phi_n(x)$ $\xrightarrow{\text{mido } \hat{B}}$ obtengo β_n y estoy con $\phi_n(x)$

Si $[A,B]\neq 0 \Longrightarrow \psi(x) \xrightarrow{A}$ (Ej.) obtenemos α_n y estamos con $\phi_n(x)$ $\xrightarrow{\text{mido } \hat{B}}$ ¿? Depende del problema

15. Si $\psi(x)$ es una función normalizable y continua, puede escribirse en términos de las autofunciones $\phi(x)$ de un operador hermítico $\hat{A}$ de la siguiente manera

$$\psi(x) = \sum_i c_i \phi_i(x)$$

con $\hat{A}\phi_i(x) = a_i \phi_i(x)$.

(a) Obtener una expresión para los coeficientes c_i.

(b) Calcular el valor medio de A. Interpretar físicamente la cantidad $|c_i|^2$.

→ Estado mixto

$\{\phi_i\}$ constituye una base ortonormal:

$$\int \phi_j^*(x)\, \phi_i(x)\, dx = \delta_{ij} \quad (*)$$

(a) Multiplico por $\phi_j^*(x)$ e integro:

$$\int \phi_j^*(x) \psi(x)\, dx = \int \phi_j^*(x) \left(\sum_i c_i \phi_i(x) \right) dx$$

$$= \sum_i c_i \underbrace{\int \phi_j^*(x)\, \phi_i(x)\, dx}_{\delta_{ij}} = \sum_i c_i \delta_{ij} = c_j$$

$$\Rightarrow \boxed{c_i = \int \phi_i^*(x)\, \psi(x)\, dx = \underbrace{\langle \phi_i, \psi \rangle}_{\text{Producto interno entre } \phi_i \text{ y } \psi}}$$

(b) Por definición $\langle \hat{A} \rangle = \int \psi^*(x)\, \hat{A}\, \psi(x)\, dx$

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \Big(\sum_j c_j^* \phi_j^*(x) \Big) \hat{A} \Big(\sum_i c_i \phi_i(x) \Big) dx$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_j \sum_i c_j^* c_i \int \phi_j^* \underbrace{\hat{A}\, \phi_i(x)}_{a_i \phi_i(x)} dx$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_j \sum_i c_j^* c_i a_i \underbrace{\int \phi_j^* \phi_i \, dx}_{\delta_{ij}} = \sum_j |c_j|^2 a_j = \langle \hat{A} \rangle$$

Por otro lado $\langle \hat{A} \rangle = \sum_j h_j a_j$, donde h_j: prob. de obtener a_j

Así $h_i = |c_i|^2 = |\langle \phi_i , \psi \rangle|^2$

Probabilidad de medir el valor a_i para $\hat{A}$ si el sistema se encuentra en el estado $\psi(x)$

$$\Longrightarrow \boxed{P_\psi(a_i) = |\langle \phi_i , \psi \rangle|^2 = \left| \int \phi_i^*(x)\, \psi(x)\, dx \right|^2}$$

20. Escribir la ecuación de Schrödinger para:

(a) la partícula libre
(b) una partícula bajo la influencia de una fuerza uniforme y constante
(c) el átomo de hidrógeno
(d) el átomo de helio
(e) oscilador armónico.

• El principio de correspondencia: Los relaciones de la mecánica clásica son satisfechos en mecánica cuántica reemplazando las magnitudes clásicas por operadores

$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$ donde $\hat{H}$: operador hamiltoniano

CLÁSICAMENTE — CUÁNTICAMENTE — $\hat{p} = -i\hbar\bar{\nabla}$

(a) $H = T = \frac{p^2}{2m} \longrightarrow \hat{H} = \hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E\psi$

(b) Sup. $\bar{F} = F\hat{x}$ ← versor x!

$H = T + V = \frac{p^2}{2m} + (-Fx) \longrightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - F\hat{x} \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - Fx\psi = E\psi$

19. Dada la función de onda:

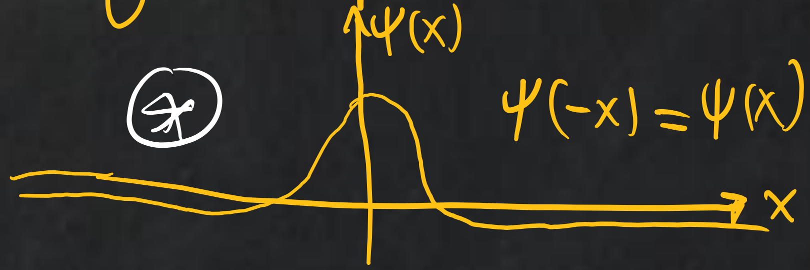
$$\psi(x) = \begin{cases} A(1+ax)\exp(ax) & para \quad x \le 0 \\ A(1-ax)\exp(-ax) & para \quad x \ge 0 \end{cases}$$

(a) Normalizar esta función de onda.

(b) Hallar la energía total E y la potencial $V(x)$ suponiendo que $V(x) \to 0$ cuando $x \to \pm\infty$.

(c) Calcular los valores medios de x, p y la dispersión correspondiente a cada uno.

FUNCIÓN DE ONDA: es una función par en este caso

(*) 

$\psi(-x) = \psi(x)$

(a) Como $|\psi(x)|^2$ representa una densidad de probabilidad (BORN),

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 = 1 \underset{(*)}{=} 2\int_0^{\infty} |\psi(x)|^2 = 2A^2 \underbrace{\int_0^{\infty} (1-ax)^2 e^{-2ax}\, dx}_{\text{Ejercicio: } 1/4a}$$

$$\Rightarrow \boxed{A = \sqrt{2a}}$$

(b) ¡Ejercicio!

19. Dada la función de onda:

$$\psi(x) = \begin{cases} A(1+ax)\exp(ax) & para \quad x \le 0 \\ A(1-ax)\exp(-ax) & para \quad x \ge 0 \end{cases}$$

(a) Normalizar esta función de onda.

(b) Hallar la energía total E y la potencial $V(x)$ suponiendo que $V(x) \to 0$ cuando $x \to \pm\infty$.

(c) Calcular los valores medios de x, p y la dispersión correspondiente a cada uno.

c) $$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \underbrace{\hat{x}\, \psi(x)}_{x\psi(x)}\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \overbrace{x \underbrace{|\psi(x)|^2}_{\text{FUNCIÓN PAR}}}^{\text{FUNCIÓN IMPAR}} dx \overset{\text{POR PARIDAD}}{=} 0$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{x^2 |\psi(x)|^2}_{\text{FUNCIÓN PAR}} dx = 2\int_0^{\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx = 2A^2 \underbrace{\int_0^{\infty} x^2 (1-ax)^2 e^{-2ax} dx}_{\text{Ejercicio: } 1/a^3}$$

$$\langle x^2 \rangle = 1/a^2$$

$$(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \underbrace{\langle x \rangle^2}_{=0} = \frac{1}{a^2} \Rightarrow \boxed{\Delta x = \frac{1}{a}}$$

Ejercicio: Hacer lo mismo para $\hat{p}_x$

ADICIONAL: Supongamos un sistema que inicialmente se encuentra en el estado $\psi(x) = A\left[\sqrt{2}\,\phi_1(x) + \sqrt{3}\,\phi_2(x) + \phi_3(x) + \phi_4(x)\right]$

con $\{\phi_n(x)\}$ autoestados del operador $\hat{H}$ definido por $\hat{H}\phi_n = n^2 \varepsilon_0 \phi_n$

ⓐ NORMALIZAR

$\{\phi_n\}$ es BASE ORTONORMAL

$$\int |\psi(x)|^2 dx = 1 = A^2 \cdot (2 + 3 + 1 + 1) \Rightarrow \boxed{A = 1/\sqrt{7}}$$

ⓑ Si se mide la energía, ¿qué valores pueden obtenerse y con qué probabilidad?

Podemos obtener $E_n = n^2 \varepsilon_0$ (autovalores de $\hat{H}$)

$E_1 = \varepsilon_0$; $E_2 = 4\varepsilon_0$; $E_3 = 9\varepsilon_0$; $E_4 = 16\varepsilon_0$, ...

$$P(E_1) = |\langle \phi_1, \psi \rangle|^2 = \left| \int \phi_1^*(x) \sum_i A c_i \phi_i(x)\, dx \right|^2 = A^2 c_1^2 = \frac{2}{7}$$

$$P(E_2) = |\langle \phi_2, \psi \rangle|^2 = \frac{3}{7} \; ; \quad P(E_3) = \frac{1}{7} \; ; \quad P(E_4) = \frac{1}{7}$$

c) Supongamos el operador $\hat{A}$ definido por $\hat{A} \phi_n = n a_0 \phi_{n+1}$

¿Es lo mismo medir $\hat{H}$ y $\hat{A}$ en cualquier orden?

NO ES LO MISMO PUES $[\hat{A}, \hat{H}] \neq 0$