Resumen: cosas dadas en la teórica.

Función de onda: $\Psi(x)$ → nos habla de la dinámica de la partícula

→ $\rho(x) = |\Psi(x)|^2 = \Psi\Psi^*$ nos habla de la probabilidad de encontrar a la part en alguna región del espacio.

$\int \Psi^*\Psi\,dx = 1$ → normalización

También otras cosas que podemos medir, más que la probabilidad: operadores:

$\hat{O}$: aplican transformaciones (lineales) a Ψ (hoja nota 2)

→ si $\hat O$ está asociado a alguna cantidad física,

$\langle\hat O\rangle = \int \Psi^*\hat O\Psi\,dx$.

ejemplos: $\hat p$: $\hat p\Psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi$ $\quad \hat x\Psi = x\Psi$ ...

• Hay un tipo de operadores que nos van a interesar mucho: Los operadores hermíticos: $\hat F = \hat F^\dagger$.

$$\int \Psi^*\hat F^\dagger\varphi\,dx = \int\Psi^*\hat F^{*T}\varphi\,dx = \int\varphi\hat F^*\Psi^*\,dx = \int\varphi(\hat F\Psi)^*dx$$

→ si $\hat F$ es hermítico: $\int\Psi^*\hat F\varphi\,dx = \int\varphi(\hat F\Psi)^*dx$.

$\hat F = (\hat F^\dagger)^*$

¿Pq nos interesan? vamos a ver: 1° Todos los observables físicos van a estar asociados a ops hermíticos! ¿Pq? tienen valores medios reales: (ej: posición, momento, energía, campo eléctrico, magnetización, son todos reales)

ej 4:

$\langle\hat F\rangle = \int\Psi^*\hat F\Psi\,dx$,

$\langle\hat F\rangle^* = \int\Psi(\hat F\Psi)^*dx = \int\Psi^*\hat F\Psi\,dx = \langle\hat F\rangle$ ⇒ es real!

ej 5: probarlo

$\hat p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$: ⇒ $\int\Psi^*\hat p\varphi\,dx = \int\varphi(\hat p\Psi)^*dx$;

$$\int\Psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi\,dx = \int\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}i\hbar\varphi\,dx = \int\varphi\left(-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)^*dx$$

otros hermíticos: $\hat x, \hat H, \ldots$ $\quad \hat H = \frac{\hat p^2}{2m} + V(\hat x)$ $\quad (V(\hat x) \in \mathbb R)$

2 lograr: los ops hermíticos tienen una base ortonormal de autoestados con autovalores reales:

Que era una autofunción/autoestado $\hat O\varphi = \underbrace{a}_{\text{número}}\varphi$.

Hagamos algún ejercicio de esto:

5) determinar si Ψ es autoestado de $\hat p$ o $\hat p^2$:

a) $\Psi = A\sin(kx)$

→ $\hat p\Psi = -i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x} = -i\hbar kA\cos(kx) \neq p\Psi$ → no!

$\hat p^2\Psi = -\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \hbar^2k^2A\sin(kx) = \underbrace{\hbar^2k^2}_{p^2}\Psi$ sí!

e) $\Psi = Ae^{ik(x-a)}$

→ $\hat p\Psi = -i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x} = k\hbar Ae^{ik(x-a)} = \underbrace{k\hbar}_{p}\Psi$ → sí!

$\hat p^2\Psi = \hat p(\hat p\Psi) = k\hbar\hat p\Psi = \underbrace{k^2\hbar^2}_{p^2}\Psi$

→ 7c: para eso, voy a introducir un último

Cosa: operador hamiltoniano (energía)

$\hat H = \frac{\hat p^2}{2m} + V(\hat x)$ (va a ser cin + pot).

→ $\hat H\Psi = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi + V(x)\Psi$

cuál tiene que ser $V(x)$ para que la función sea autoestado?

$\Psi = Ae^{-ax^2/2}$ → $\int\Psi^*\Psi\,dx = 1$ → $A = \sqrt{\frac{a}{\pi}}$

→ si Ψ es afunc de $\hat H$ es porque:

$\hat H\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi + V(x)\Psi = E\Psi$

⇒ $\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = A(-a + a^2x^2)e^{-\frac{ax^2}{2}}$

→ reemplazo:

$$A\Big(\underbrace{\frac{a\hbar^2}{2m} - \frac{\hbar^2a^2}{2m}x^2 + V(x)}_{\text{no puede depender de }x}\Big)e^{-\frac{ax^2}{2}} = \underbrace{E}_{\text{número}}Ae^{-\frac{ax^2}{2}}$$

⇒ $V(x) = \frac{\hbar^2a^2}{2m}x^2 + \text{cte}$.

Si hay múltiples (n) autovalores del mismo valor a, se dice que a es un autovalor degenerado (tiene degeneración $g(a) = n$)

Dijimos que para un operador hermítico había una base ortonormal de autoestados asociados;

Base $\{\varphi_i\}$, $\hat O\varphi_i = a_i\varphi_i$, $\int\varphi_i^*\varphi_j\,dx = \delta_{ij}$ ⇒ $\Psi = \sum c_i\varphi_i$

→ por ej, si nuestra función de onda fuese un autoestado,

$\langle\hat O\rangle = \int\Psi^*\hat O\Psi\,dx = a\int\Psi^*\Psi\,dx = a$ → el valor medio es el autovalor.

$$⇒ \langle\hat O\rangle = \int\sum c_i^*\varphi_i^*\hat O\sum_j c_j\varphi_j\,dx = \sum_{ij}a_jc_i^*c_j\underbrace{\int\varphi_i^*\varphi_j}_{\text{ortonormal}} = \sum_j a_j|c_j|^2$$

→ Esto nos dice algo: recordemos la definición para valor medio

$\langle A\rangle = \sum A_iP_i$ → $\boxed{P_i = |c_i|^2}$

$\langle\hat A\rangle = \sum a_i|c_i|^2$ y los A_i son todos los resultados posibles!

Cómo podemos obtener los c_i si conocemos Ψ?

así: $c_i = \int\varphi_i^*\Psi\,dx$. ¿Pq? $\int\varphi_i^*\sum c_j\varphi_j\,dx = c_j\int\varphi_i^*\varphi_j\,dx = c_i$

Hagamos un ejemplo boludo.

Sup tenemos $\hat H$ y φ_1, φ_2 / $\hat H\varphi_1 = E_1\varphi_1$, $\hat H\varphi_2 = E_2\varphi_2$ con $\int\varphi_i^*\varphi_j\,dx = \delta_{ij}$

y $\Psi = \sqrt{\frac{3}{4}}\varphi_1 + \sqrt{\frac{1}{4}}\,i\varphi_2$

→ $\langle\hat H\rangle$? $\quad \langle\hat H\rangle = \sum E_i|c_i|^2 = E_1\cdot\frac{3}{4} + E_2\cdot\frac{1}{4}$.

→

E	E_1	E_2
$P(E)$	3/4	1/4

solo puedo encontrar E_1 y E_2, y lo tomé con esas probas

Volvemos a la teoría: Vamos a hablar de conmutadores entre operadores:

dados 2 operadores $\hat A$ y $\hat B$, en general, $\hat A\hat B\varphi \neq \hat B\hat A\varphi$

→ se define $[\hat A,\hat B] = \hat A\hat B - \hat B\hat A$ que da cuenta de esta diferencia.

13 práctica. por ej: $[\hat x,\hat p]\varphi = \hat x\hat p\varphi - \hat p\hat x\varphi = -i\hbar\hat x\frac{\partial\varphi}{\partial x} - \hat p x\varphi = -i\hbar x\frac{\partial\varphi}{\partial x} + i\hbar x\frac{\partial\varphi}{\partial x} + i\hbar\varphi = i\hbar\varphi$

⇒ $[\hat x,\hat p] = i\hbar$

el conmutador cumple una serie de propiedades (ver ej 13)

$[\hat A,\hat B] = -[\hat B,\hat A]$, $\quad [\hat A,\hat A] = 0$, $\quad [\alpha\hat A + \beta\hat B,\hat C] = \alpha[\hat A,\hat C] + \beta[\hat B,\hat C]$

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

$$↳ \underbrace{\hat A\hat B\hat C - \hat C\hat A\hat B + (\hat A\hat C\hat B - \hat A\hat C\hat B)}_{\hat A[\hat B,\hat C] \quad [\hat A,\hat C]\hat B}$$

$[\hat A^n,\hat B] = [\hat A\hat A^{n-1},\hat B] = [A,B]\hat A^{n-1} + \hat A[\hat A^{n-1},\hat B]$ → $n\hat A^{n-1}[\hat A,\hat B]$ → inducción, si $[[\hat A,\hat B],\hat A] = 0$ (vale para $n=1$, y luego $[\hat A^n,\hat B] = \hat A^{n-1}[\hat A,\hat B] + (n-2)\hat A\hat A^{n-2}[\hat A,\hat B]$)

si tenemos $f(x) = \sum a_nx^n$ → $[f(\hat A),\hat B] = \sum_n a_n[\hat A^n,\hat B] = \sum_n n a_n\hat A^{n-1}[\hat A,\hat B] = (n-1)\hat A^{n-1}[\hat A,\hat B]$

$= \frac{\partial f}{\partial x}(\hat A)[\hat A,\hat B]$

⇒ como $[i\hbar,\hat x] = 0$ → $[V(\hat x),\hat p] = i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}(\hat x)$

ej: $[\hat H,\hat p] = [\frac{\hat p^2}{2m},\hat p] + [V(\hat x),\hat p] = i\hbar V'(\hat x)$

$\frac{1}{2m}(\underbrace{[\hat p,\hat p]}_{0}\hat p + \hat p\underbrace{[\hat p,\hat p]}_{0})$

¿Por qué nos interesan los conmutadores?

2 ops conmutan si y solo si tienen una base ortonormal de autoestados en común!

$[\hat A,\hat B] = 0 \Leftrightarrow \exists\ \varphi_i$ / $\hat A\varphi_i = a_i\varphi_i$, $\quad \hat B\varphi_i = b_i\varphi_i$

↳ sirven para calcular valores medios fácilmente para 2 operadores a la vez.

Muchas veces vamos a buscar cjtos completos de operadores que conmutan, pq vamos a ver que la dinámica para c/u es simple.

Esto se puede demostrar en el ej 14, aunque nunca se demuestra el si y solo si en el caso general; siempre se demuestra solo el ⇐

→ si $\exists\ \varphi_i$ / $\hat A\varphi_i = a_i\varphi_i$, $\hat B\varphi_i = b_i\varphi_i$

→ $\Psi = \sum c_i\varphi_i$, $\quad [\hat A,\hat B]\Psi = \sum c_i[\hat A,\hat B]\varphi_i = \sum c_i[\hat A\hat B - \hat B\hat A]\varphi_i$

$= \sum c_i(a_ib_i - b_ia_i)\varphi_i = 0$

y → si $[\hat A,\hat B] = 0$ y $\hat A,\hat B$ $\underline{\text{no tienen autovals degenerados y son hermíticos}}$ ⇒ ...
no hace falta

→ $\hat A$ tiene base de aests $\{\varphi_i\}$ / $\hat A\varphi_i = a_i\varphi_i$,

→ $[\hat A,\hat B]\varphi_i = \hat A(\hat B\varphi_i) - \hat B(\hat A\varphi_i) = 0$ → $a_i\hat B\varphi_i = \hat A(\hat B\varphi_i)$

→ $\hat B\varphi_i$ es aest de $\hat A$ con igual autovalor.

Como todos los autovalores son ≠ (no degenerado, solo $\hat B\varphi_i = \varphi$ cumple $\hat A\varphi = a_i\varphi$)

⇒ $\hat B\varphi_i = b_i\varphi_i$ → φ_i es aest de $\hat B$ con aval b_i

que tengan autoestados en común vamos a ver que quiere decir que pueden estar bien definidos en simultáneo. de hecho (no demo): Cuando dice Ty 18.

$\Delta A\Delta B \geq \frac{|\langle[\hat A,\hat B]\rangle|}{2}$

Pero dijimos la palabra dinámica, cómo es la dinámica?

Ec de Schrödinger: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \hat H\Psi = \frac{\hat p^2}{2m}\Psi + V(\hat x)\Psi$

Ahora vamos a ver alguna cosa más, pero sabemos que: si Ψ es autoestado de $\hat H$: $\hat H\Psi = E\Psi$ y $\underline{\hat H \text{ no depende del tiempo}}$

⇒ $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = E\Psi(x,t)$ ⇒ $\Psi(x,t) = \Psi(x,0)e^{-iEt/\hbar}$

más en general, si $\hat H$ no depende del tiempo, estrictamente tendría que decir

$\Psi(x,t) = e^{-i\hat Ht/\hbar}\Psi(x,0)$. $\qquad e^{\hat A} = \sum\frac{\hat A^n}{n!}$

Esto vale, pero es poco práctico:

$e^{-i\frac{\hat H}{\hbar}t}\psi \sim \sum\underbrace{\hat H\hat H\hat H\hat H\hat H\ldots}_{n}\psi$

cada $\hat H \sim \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V$. quilombo.

⇒ $\hat H$ es hermítico! → tiene base de aests: $\{(\varphi_i, E_i)\}$

→ $\Psi(x,t) = e^{-i\frac{\hat H}{\hbar}t}\Psi(x,0) = \sum_n\left(\frac{-it}{\hbar}\right)^n\frac{1}{n!}\hat H^n\sum c_i\varphi_i(x)$

$\hat H^n\varphi_i = \hat H^{n-1}\underbrace{\hat H\varphi_i}_{E_i\varphi_i} = E_i\hat H^{n-1}\varphi_i = \ldots = E_i^n\varphi_i$ →

$= \sum_i c_i\sum_n\left(\frac{-itE_i}{\hbar}\right)^n\frac{1}{n!}\varphi_i = \sum c_i\underbrace{e^{-i\frac{tE_i}{\hbar}}\varphi_i}_{\text{conocemos}} = \Psi(x,t)$

c_i? $\quad c_i = \int\varphi_i^*\Psi(x,0)dx$.

ej: valores medios de operadores: (ej 18)

tenemos $\hat A(t)$ →

$\langle\hat A(t)\rangle = \int dx\,\Psi^*\hat A\Psi$.

$$\frac{d}{dt}\langle\hat A(t)\rangle = \int dx\Big[\underbrace{\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}}_{-\frac{1}{i\hbar}\Psi^*\hat H}\hat A\Psi + \Psi^*\frac{\partial\hat A}{\partial t}\Psi + \Psi^*\hat A\underbrace{\frac{\partial\Psi}{\partial t}}_{\frac{1}{i\hbar}\hat H\Psi}\Big]$$

y conjugando y transponiendo Schrödinger: $-i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = \Psi^*\hat H^\dagger = \Psi^*\hat H$

$= \langle\frac{\partial\hat A}{\partial t}\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int dx\,\Psi^*(\hat A\hat H - \hat H\hat A)\Psi$

$= \langle\frac{\partial\hat A}{\partial t}\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat A,\hat H]\rangle = \frac{d}{dt}\langle\hat A\rangle$

⇒ si $\hat A$ no depende del tiempo, y $[\hat A,\hat H] = 0$ → $\hat A$ es una constante de movimiento!

ej: energía: se conserva?

$\frac{d}{dt}\langle\hat H\rangle = \langle\frac{\partial\hat H}{\partial t}\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\underbrace{[\hat H,\hat H]}_{0}\rangle$ → se conserva si $\hat H$ es indep de t

(ej: no hay forzado, es lo que vamos a trabajar)

otros: $\hat p$ y $\hat x$: $\frac{d}{dt}\langle\hat p\rangle = \underbrace{\langle\frac{\partial\hat p}{\partial t}\rangle}_{0} + \frac{1}{i\hbar}\langle\underbrace{[\hat p,\hat H]}_{-i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}}\rangle = -\langle\frac{\partial V}{\partial x}(\hat x)\rangle$ más o menos. $F(\hat x)$ $\quad \langle F(\hat x)\rangle \neq F(\langle\hat x\rangle)$

$\frac{d}{dt}\langle\hat x\rangle = \underbrace{\langle\frac{\partial\hat x}{\partial t}\rangle}_{0} + \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat x,\hat H]\rangle = \frac{\langle\hat p\rangle}{m}$ ← $([\hat x,\hat p^2] = 2i\hbar\hat p,\ [\hat x,V(\hat x)] = 0)$

Teo de Ehrenfest.

→ se conserva $\hat p$? solo si $\frac{\partial V}{\partial x} = 0$ → si no hay fzas externas.

→ Lo que nos quedaría que pase en Meca cuántica:

nos dan un problema con cierto hamiltoniano $\hat H$,

encontramos un cjto de operadores $\hat A, \hat B, \ldots$

$[\hat H,\hat A] = [\hat H,\hat B] = [\hat A,\hat B] = \ldots = 0$.

→ existen φ_i / $\hat H\varphi_i = E_i\varphi_i$, $\hat A\varphi_i = a_i\varphi_i$, $\hat B\varphi_i = b_i\varphi_i$, ...

→ encontrarlos (guías 8 y 9)

Luego, conds iniciales: $\Psi(x,0)$

→ $\Psi(x,t) = \sum c_ie^{-iE_it/\hbar}\varphi_i$ $\qquad c_i = \int\varphi_i^*\Psi(x,0)dx$

ya está resuelto

podemos hacer una tabla

O_i \ P_i	1	2	3	....
E_i	$\lvert c_1\rvert^2$	$\lvert c_2\rvert^2$	$\lvert c_3\rvert^2$	
a_i	⋮	⋮	⋮	
b_i	⋮	⋮	⋮	
⋮				

y $\langle\hat A\rangle, \langle\hat B\rangle$ son ctes.

Último caso: que pasa al medir: colapso func de onda.

tenemos $\Psi = \sum c_i\varphi_i$ con $\hat A\varphi_i = a_i\varphi_i$

→ teníamos

a_i	a_1	a_2	...
P_i	$\lvert c_1\rvert^2$	$\lvert c_2\rvert^2$	

mido y obtengo a_2

→ Ψ' después de medir es $\Psi' = \varphi_3$

→ ahora

a_i	a_1	a_2	a_3	a_4	....
P_i	0	1	0	0	

y que pasa si, por ej, $\underbrace{a_2 = a_3 = a}_{\text{degenerados}}$ y el resto son $\neq a$.

→ si mido a:

⇒ $\Psi' = A[c_2\varphi_2 + c_3\varphi_3]$ $\qquad A = \frac{1}{\sqrt{|c_2|^2 + |c_3|^2}}$ normalizo Ψ'