

Clase 16: Formalismo de Schrödinger-Mecánica ondulatoria-1^{ra} parte

Estoy convencido de que quienes, al oír hablar por primera vez de física cuántica, no se escandalizan, no la han entendido.

Niels Bohr

En mecánica cuántica (MQ) se pueden encarar los procesos de un modo intuitivo, ateniéndose a la imagen onda-partícula. Esto no es lo que se hace en el formalismo de Schrödinger (1925): se describe el estado instantáneo de un sistema mediante una cantidad compleja ψ , que satisface una ecuación diferencial y que va cambiando con el tiempo. Schrödinger basa su formalismo en la hipótesis de de Broglie, las relaciones de incerteza de Heisenberg (que son, en realidad, una consecuencia de la dualidad onda-partícula) y en la interpretación probabilística de las características ondulatorias. Esta interpretación se debe a Max Born y es lo que se conoce como la interpretación de la Escuela de Copenhague: todo el curso de los acontecimientos está determinado por las leyes de la probabilidad, esto es, a un estado del espacio le corresponde una determinada probabilidad que está relacionada con la onda de de Broglie asociada con el estado. Un proceso mecánico, por lo tanto, va acompañado por un proceso ondulatorio, que nos da la probabilidad de un comportamiento determinado del proceso mecánico.

Por supuesto, esto tiene un carácter estadístico. Como discutimos en la clase anterior, en el experimento de la doble rendija, los e^- no se “pulverizan” para dar la figura de difracción. Si arrojo un e^- a la vez, este va a caer en algún punto de la pantalla, no cualquier punto sino uno en el que su probabilidad no sea nula. A media que voy arrojando e^- , estos van cayendo siempre en otros puntos con probabilidad no nula. Hasta que, si arrojo un número estadístico de e^- , voy a observar las características franjas con e^- y las franjas donde no ha caído ninguno. Los e^- llegan a la pantalla como bultos enteros (característica de partícula) y es su probabilidad la que se comporta en forma ondulatoria.

Empecemos, entonces, a desarrollar este formalismo de Schrödinger. Aclaro que no es el único formalismo matemático desarrollado para la MQ, pero, obviamente, todos conducen a los mismos resultados.

El formalismo de Schrödinger se basa en una serie de postulados. Nosotros no vamos a verlo en esa forma tan axiomática, sino que vamos a ir introduciendo sus elementos, indicando, cuando sea necesario, cuál es el hecho físico en el que está basado.

Empecemos, como corresponde, por el principio. Tomemos como ejemplo el experimento de la doble rendija. Con e^- , la probabilidad de que una partícula impacte en un intervalo $(x, x + dx)$ vimos que teníamos que describirla como la intensidad de una onda, es decir:

$$\frac{dN}{N} \propto |\phi(x)|^2$$

Vamos a formalizar este resultado y eso constituye el punto de partida del formalismo de Schrödinger:

1) Toda información sobre nuestro sistema se describe a través de una función de onda $\psi(\vec{x}, t)$ tal que la densidad de probabilidad de encontrar al sistema en una cierta región del espacio a un cierto tiempo t , está dada por:

$$\frac{dN}{N}(x, y, z, t) = |\psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz \quad (\text{cf. experimento doble rendija})$$

Observen que “lo físico” es la densidad de probabilidad. La función $\psi(\vec{x}, t)$ es lo que necesitamos para poder escribir la densidad de probabilidad teniendo en cuenta las características ondulatorias. Esto marca una diferencia con lo que sucede con ondas propiamente dichas. En el caso de una onda, la función $\psi(\vec{x}, t)$ la representa (es “lo físico”). Aquí, la función de onda es el instrumento para escribir la densidad de probabilidad, que es lo que podemos medir. Sin embargo, como la función de onda va a contener toda la información sobre nuestro sistema, muchas veces nos vamos a referir a ella llamándola el *estado del sistema*.

- La función de onda *puede ser compleja* (eso no es una elección). Como $|\psi|^2$ es una densidad de probabilidad, tiene que cumplir:

$$\int_{\forall \vec{x}} |\psi(x, y, z, t)|^2 d^3x = 1 \quad (1)$$

o sea, la probabilidad de encontrar a la partícula en todo el espacio tiene que ser la certeza.

Como ψ puede ser compleja, vamos a escribir (1) de la siguiente manera:

$$\int_{\forall \vec{x}} \psi^*(x, y, z, t) \psi(x, y, z, t) d^3x = 1$$

\Rightarrow la función de onda ψ debe ser de *cuadrado integrable* y *normalizada*. Decimos que ψ vive en el espacio de coordenadas (o sea, depende de las coordenadas y nos da información sobre la probabilidad de encontrar a la partícula en alguna región del espacio).

- Como esto tiene un carácter estadístico, nos va a servir para calcular probabilidades y valores medios.

Por ejemplo, en una dimensión:

$$\langle x \rangle = \int_{\forall x} x |\psi(x)|^2 dx \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx$$

donde, por conveniencia (ya vamos a ver la razón), escribimos la variable x “ensanguchada” (valga el término) entre $\psi^*(x)$ y $\psi(x)$.

También va a interesar conocer la dispersión de los datos respecto del valor medio \Rightarrow desviación cuadrática media (lo ejemplificamos otra vez con x):

$$\sigma_x^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - 2\langle x \rangle \langle x \rangle + \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (\text{esto ya lo habíamos hecho})$$

- Ya vimos que un paquete de ondas tiene un cierto espectro de k 's que, de acuerdo a de Broglie, es equivalente a un espectro de momentos \vec{p} . Vamos, entonces, a introducir el equivalente al espectro de k 's como una función de onda ϕ que vive en el espacio de momentos:

$$\frac{dN}{N}(p_x, p_y, p_z, t) = |\phi(p_x, p_y, p_z, t)|^2 d^3 p \Rightarrow \text{probabilidad de que una partícula tenga su impulso en el}$$

intervalo $(\bar{p}, \bar{p} + d\bar{p})$ al tiempo t .

$|\phi(p_x, p_y, p_z, t)|^2$ es, entonces, una densidad de probabilidad en el espacio de momentos (o de impulsos, como quieran llamarlo), y la función de onda $\phi(p_x, p_y, p_z, t)$ también debe ser de cuadrado integrable y normalizada:

$$\int_{\forall \bar{p}} |\phi(p_x, p_y, p_z, t)|^2 d^3 p = \int_{\forall \bar{p}} \phi^*(p_x, p_y, p_z, t) \phi(p_x, p_y, p_z, t) d^3 p = 1$$

Por supuesto, se puede calcular el valor medio o las probabilidades de cualquier función que dependa de los impulsos con esta función ϕ (valen las mismas consideraciones que con ψ).

- Acá introduce Schrödinger los principios de incerteza de Heisenberg: las funciones $\psi(x, y, z, t)$ y $\phi(p_x, p_y, p_z, t)$ deben ser *funciones inversas de Fourier*. Vamos a ver cómo se relacionan.

Relación entre $\psi(x, y, z, t)$ y $\phi(p_x, p_y, p_z, t)$

- Consideremos, para fijar ideas, una sola dimensión (después lo extrapolamos a las tres dimensiones). En principio la función de onda $\psi(x)$ es un paquete de ondas que se escribe como una integral de Fourier (nos paramos en un tiempo cualquiera):

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k_x) e^{ik_x x} dk_x \quad (2)$$

donde $g(k_x)$ es la transformada de Fourier de $\psi(x)$. Es $g(k_x)$ la función de onda en el espacio de momentos? No, por dos razones:

→ no depende explícitamente del impulso.

→ no está normalizada.

Lo que sí podemos decir es que va a estar relacionada con $\phi(p_x)$. De aquí en adelante, para hacer más sencilla la notación, vamos a escribir: $k_x \equiv k$ y $p_x \equiv p$.

Usemos la relación de de Broglie:

$$p = \hbar k \Rightarrow dk = \frac{dp}{\hbar}$$

Entonces, cambiamos variables en (2):

$$\psi(x) = \frac{1}{\hbar\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(p) e^{i\frac{px}{\hbar}} dp$$

La función inversa de Fourier $g(p)$ es:

$$g(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-i\frac{px}{\hbar}} dx \quad (3)$$

- Cuál es la idea, entonces? $g(p)$ no está normalizada. Entonces, calculamos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} g^*(p)g(p)dp = \alpha^2 \neq 1 \quad (4)$$

La integral “de normalización” nos da un número distinto de 1 (lo llamé α^2). Entonces, la función de onda, que tiene que estar normalizada, va a ser:

$$\phi(p) = \frac{g(p)}{\alpha}$$

Así cumple con la condición de ser la transformada de Fourier de $\psi(x)$ y estar normalizada.

Calculemos, entonces, la integral (4):

$$\int_{-\infty}^{\infty} g^*(p)g(p)dp = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dp \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dx}_{\sqrt{2\pi}g^*(p)} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x') e^{-\frac{ipx'}{\hbar}} dx'}_{\sqrt{2\pi}g(p)}$$

donde reemplazamos $g(p)$ y su conjugada por su expresión (3). Redistribuimos los integrandos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} g^*(p)g(p)dp = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) dx \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x') dx' \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dp e^{\frac{iP}{\hbar}(x-x')}}_{2\pi\hbar\delta(x-x')} \quad (5)$$

Mostremos la última relación. Recordemos que la expresión integral de la delta de Dirac es:

$$\delta(x-x') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x')} dk \quad (\text{cf. clase 15})$$

Haciendo $k = \frac{P}{\hbar}$; $dp = \hbar dk$, la última integral de (5):

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{iP}{\hbar}(x-x')} dp = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x')} dk = 2\pi\hbar\delta(x-x')$$

Volvamos a (5):

$$\int_{-\infty}^{\infty} g^*(p)g(p)dp = \frac{2\pi\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) dx \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x') \delta(x-x') dx' = \hbar \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x) dx}_{=1} = \hbar$$

pues la función de onda $\psi(x)$ está normalizada. Entonces:

$$\alpha^2 = \hbar \Rightarrow \boxed{\phi(p) = \frac{g(p)}{\sqrt{\hbar}}}$$

y la relación entre ambas funciones de onda es (en una dimensión):

$$\boxed{\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sqrt{\hbar}}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp \\ \phi(p) &= \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dx \end{aligned}} \quad (6)$$

Esto es fácilmente extrapolable a tres dimensiones, ya que las tres coordenadas son independientes:

$$\psi(x, y, z) = \frac{1}{h^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p_x, p_y, p_z) e^{i \frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}} d^3 p$$

$$\phi(p_x, p_y, p_z) = \frac{1}{h^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, y, z) e^{-i \frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}} d^3 x$$

(7) donde, obviamente, son integrales triples.

- **Calculemos $\langle p_x \rangle$. Es necesario hacerlo en el espacio de impulsos?**

La respuesta es no. Vamos a ver por qué (otra vez, escribo $p_x \equiv p$):

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p) p \phi(p) dp = \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p) p \left[\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-i \frac{px}{\hbar}} dx \right] dp$$

donde hemos reemplazado $\phi(p)$ por su

expresión (6).

Integramos por partes la integral entre corchetes:

$$u = \psi(x) \quad dv = e^{-i \frac{px}{\hbar}} dx \quad du = \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} dx \quad v = -\frac{\hbar}{ip} e^{-i \frac{px}{\hbar}}$$

$$\left[\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-i \frac{px}{\hbar}} dx \right] = \underbrace{-\frac{\hbar}{ip} e^{-i \frac{px}{\hbar}} \psi(x)}_{=0} \Big|_{-\infty}^{\infty} + \frac{\hbar}{ip} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} e^{-i \frac{px}{\hbar}} dx$$

El primer término se anula pues $\psi(x)$ debe ser acotada para que la integral no diverja (recordar que tiene que ser de cuadrado integrable), por lo que $\psi(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$. (este argumento lo vamos a usar siempre).

Entonces:

$$\langle p \rangle = \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\phi^*(p) p \frac{\hbar}{ip} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} e^{-i \frac{px}{\hbar}} dx \right] dp = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\left[\frac{1}{\sqrt{h}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p) e^{-i \frac{px}{\hbar}} dp \right]}_{\psi^*(x)} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} dx$$

Reordenamos otra vez la expresión:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) dx \quad (8)$$

donde escribimos la expresión (8) como el valor medio de ... lo que está entre paréntesis.

- Llegamos a un resultado interesante. Hacer $\langle p \rangle$ en el espacio de coordenadas equivale a calcularlo introduciendo el operador diferencial $\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)$. La expresión (8) justamente es como si calculáramos en

el espacio de coordenadas el valor medio de dicho operador. La conclusión es que, en el espacio de coordenadas, a p_x lo representamos como el operador $\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)$. Esto es lo que se llama la

representación en coordenadas de p_x . Obviamente, vale lo mismo para cada componente, es decir:

$$p_s = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_s} \quad \text{con } x_s = x, y, z$$

Y para \vec{p} :

$$\vec{p} = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} \hat{x} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{y} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{z} \right) \equiv -i\hbar \nabla$$

O para potencias de p :

$$p^2 = (-i\hbar \nabla) \cdot (-i\hbar \nabla) = -\hbar^2 \nabla^2$$

El operador impulso angular, en cartesianas:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \Rightarrow \begin{cases} L_x = yp_z - zp_y \rightarrow -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ L_y = zp_x - xp_z \rightarrow -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ L_z = xp_y - yp_x \rightarrow -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{cases}$$

(si quieren convencerse de que esto es así, repitan, para alguno de estos casos, la cuenta que hicimos recién).

Notación: a los operadores los vamos a indicar así \hat{F} (con un “sombrero”).

- **Consecuencia:** esto se puede generalizar considerando que, dentro del formalismo de Schrödinger, cualquier magnitud física tiene asociado (es decir, se puede representar por) un operador, ya sea en la representación de coordenadas o en la de impulsos. Es decir, las variables dinámicas que en mecánica clásica, representamos como funciones, dentro de este formalismo, se representan como operadores cuyo valor de expectación es lo que uno puede medir. En general, se puede trabajar en representación de coordenadas o de impulsos. Lo más común es trabajar en representación de coordenadas. Notar que, en ese caso, se trabaja únicamente con la función de onda que vive en el espacio de coordenadas, $\psi(\vec{x})$.

- **Observables físicos: operadores hermíticos**

Por supuesto, no cualquier operador va a representar una magnitud física medible. Notemos, por ejemplo, que el operador \hat{p}_x es complejo. Eso no es un problema, porque lo que vamos a medir, lo “físico”, es su valor de expectación, y este, entonces, sí tiene que ser real. Para que se cumpla que los valores de expectación sean reales, se pide que el operador que representa una magnitud física sea

hermítico o autoadjunto:

$$\boxed{\hat{F}^* = \hat{F}^t} \quad (9)$$

donde $\hat{F}^t \equiv$ operador F transpuesto (seguramente, estas definiciones las conocen para las matrices), y se define de esta manera:

$$\int \psi_1 \hat{F}^t \psi_2 d^3x = \int \psi_2 \hat{F} \psi_1 d^3x$$

Es decir, cualquier operador opera hacia la función que tiene hacia \rightarrow (derecha). El operador transpuesto opera hacia \leftarrow (izquierda). Entonces, para sacarle la “t” hay que dar vuelta las dos funciones.

- Si conjugamos la condición (9):

$$\boxed{\hat{F} = \hat{F}^{\dagger} \equiv \hat{F}^+} \quad (10)$$

Al operador \hat{F}^+ (=transpuesto conjugado) se lo llama conjugado hermítico o hermitiano, o adjunto. El operador que cumple con la condición de ser igual a su adjunto, se lo llama hermítico o autoadjunto.

• Vamos a ver que esto es condición suficiente (aunque no necesaria) para que un operador tenga valores medios reales, es decir:

$$\langle \hat{F} \rangle = \langle \hat{F} \rangle^*$$

$$\langle \hat{F} \rangle^* = \left[\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\vec{x}) \hat{F} \psi(\vec{x}) d^3x \right]^* = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\vec{x}) \hat{F}^* \psi^*(\vec{x}) d^3x = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\vec{x}) \hat{F}^{\dagger} \psi^*(\vec{x}) d^3x$$

Como dijimos, el operador transpuesto \hat{F}^{\dagger} es igual al operador \hat{F} operando hacia la izquierda; es decir, damos vuelta las dos funciones:

$$\langle \hat{F} \rangle^* = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\vec{x}) \hat{F} \psi(\vec{x}) d^3x = \langle \hat{F} \rangle$$

Un operador que cumple con esta condición y, por lo tanto, tiene valores medios reales se lo llama *observable físico*.

• Por ejemplo, el operador xp_x no es hermítico (o sea, no es un observable):

$$\langle xp_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* xp_x \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx$$

Integrando por partes:

$$u = \psi^* x \quad dv = \frac{\partial \psi}{\partial x} dx \quad du = \frac{\partial(\psi^* x)}{\partial x} dx \quad v = \psi$$

$$\begin{aligned} \langle xp_x \rangle &= \underbrace{x \psi^* \psi}_{=0} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi \frac{\partial(\psi^* x)}{\partial x} dx = -\frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi^* \psi + \psi x \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) dx = -\frac{\hbar}{i} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} (\psi^* \psi) dx}_{=1} - \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi x \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx = \\ &= -\frac{\hbar}{i} + \left[\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx \right]^* = -\frac{\hbar}{i} + \langle xp_x \rangle^* \end{aligned}$$

Ejercicio: probar que $\frac{xp_x + p_x x}{2}$ es hermítico.

• El ejercicio muestra una propiedad más general: siempre se puede construir un operador hermítico a partir de uno no hermítico, haciendo:

$$\hat{O} = \frac{\hat{F} + \hat{F}^+}{2}$$

• Un observable que es solo función de las coordenadas (como, por ejemplo, el operador energía potencial $\hat{V}(x)$) siempre es real:

$$\left. \begin{aligned} \langle \hat{V}(x) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{V}(x) \psi dx \\ \langle \hat{V}(x) \rangle^* &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi \hat{V}^*(x) \psi^* dx \end{aligned} \right\} \text{para que sean iguales } \hat{V} = \hat{V}^*$$

- **Autofunciones y autovalores**

Una cuestión importante es preguntarse cuándo un sistema va a tener una determinada variable dinámica bien definida (es decir, mido esa variable dinámica con dispersión nula). Eso va a depender de la función de onda (es decir, del estado) de la partícula. Entonces, vamos a ver para qué estados, un observable puede medirse sin dispersión. Sea \hat{F} ese observable:

$$\sigma_F^2 = \langle (\hat{F} - \langle F \rangle)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (\hat{F} - \langle F \rangle) \underbrace{(\hat{F} - \langle F \rangle) \psi}_{\phi} d^3x$$

donde $\langle F \rangle$ es el valor medio obtenido con el estado ψ . Hemos llamado a $(\hat{F} - \langle F \rangle) \psi \equiv \phi$, ya que un operador aplicado a una función da como resultado una función. El operador $(\hat{F} - \langle F \rangle)$ es hermítico, ya que \hat{F} lo es, y un número real ($\langle F \rangle$) siempre lo es.

Entonces:

$$\sigma_F^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (\hat{F} - \langle F \rangle) \phi d^3x = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (\hat{F} - \langle F \rangle)^* \phi d^3x = \int_{-\infty}^{\infty} \phi (\hat{F} - \langle F \rangle)^* \psi^* d^3x$$

donde hicimos la operación de transponer. Volvamos a escribir lo que vale la función ϕ :

$$\sigma_F^2 = \int_{-\infty}^{\infty} [(\hat{F} - \langle F \rangle) \psi] (\hat{F} - \langle F \rangle)^* \psi^* d^3x$$

A $(\hat{F} - \langle F \rangle) \psi$ lo encerramos entre corchetes para indicar que $(\hat{F} - \langle F \rangle)$ **solo** actúa sobre ψ y no sobre el resto. Entonces:

$$\sigma_F^2 = \int_{-\infty}^{\infty} [(\hat{F} - \langle F \rangle) \psi] [(\hat{F} - \langle F \rangle) \psi]^* d^3x = \int_{-\infty}^{\infty} |(\hat{F} - \langle F \rangle) \psi|^2 d^3x \geq 0$$

El producto de una función por su conjugada es el módulo de la función al cuadrado. Por lo tanto, la integral es definida positiva. Para que sea $\sigma_F^2 = 0$, el integrando tiene que ser nulo:

$$|(\hat{F} - \langle F \rangle) \psi|^2 = 0 \Rightarrow (\hat{F} - \langle F \rangle) \psi = 0 \Rightarrow \boxed{\hat{F} \psi = \langle F \rangle \psi} \text{ ecuación de autovalores}$$

- Este es un resultado muy importante. Nos dice que el conjunto de funciones de onda (o estados) para las cuales un determinado observable \hat{F} está bien definido son las autofunciones de \hat{F} , y los autovalores son los valores medios de \hat{F} calculados con esas autofunciones. Esos autovalores son, por lo tanto, los únicos valores posibles que puede tomar el observable \hat{F} . Ese conjunto de autovalores se llama el *espectro de \hat{F}* .

- El conjunto de autofunciones de un operador hermítico es un conjunto ortonormal. En efecto, sea:

$$\hat{F}\psi_n = f_n\psi_n$$

$$\hat{F}\psi_m = f_m\psi_m$$

donde $\psi_n, \psi_m \in \{\psi_F\}$, conjunto de autofunciones de \hat{F} , con autovalores f_n y f_m respectivamente.

Hacemos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \underbrace{\hat{F}\psi_n}_{f_n\psi_n} d^3x = f_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n d^3x$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \hat{F}^+ \psi_n d^3x = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \underbrace{\hat{F}^+ \psi_m^*}_{f_m\psi_m^*} d^3x = f_m \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \psi_m^* d^3x$$

ya que si conjugamos la ecuación de autovalores, el autovalor es el mismo pues es un número real. La dos integrales son iguales pues \hat{F} es hermítico ($\hat{F} = \hat{F}^+$). Si restamos una de otra:

$$(f_n - f_m) \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n d^3x = 0 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n d^3x = \delta_{nm} = \begin{cases} \text{si } n = m \Rightarrow (f_n - f_m) = 0 \text{ y } \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_n d^3x = 1 \\ \text{si } n \neq m \Rightarrow (f_n - f_m) \neq 0 \text{ y } \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n d^3x = 0 \end{cases}$$

Entonces, las autofunciones son ortonormales. Se puede probar (no lo vamos a hacer - queda para Teórica 2) que forman un conjunto completo, por lo que también son una base del espacio. Entonces, cualquier función puede escribirse como una combinación lineal de las autofunciones de un observable:

$$\chi = \sum_n c_n \psi_n$$

Vamos a ver cómo esto se interpreta cuando consideremos el proceso de medición de un observable.

Nota: esto no es estrictamente válido si hay degeneración. Lo veremos más adelante.

• *Observables que conmutan – Conmutadores*

Vimos cuáles son los estados para los cuales un observable está bien definido. Ahora bien, supongamos que tenemos dos observables, \hat{F} y \hat{G} que comparten autofunciones:

$$\hat{F}\psi_n = f_n\psi_n$$

$$\hat{G}\psi_n = g_n\psi_n$$

\Rightarrow las ψ_n tienen bien definidos a ambos observables. Veamos cuándo dos observables pueden estar bien definidos simultáneamente, haciendo:

$$\hat{G}\underbrace{\hat{F}\psi_n}_{f_n\psi_n} = f_n \underbrace{\hat{G}\psi_n}_{g_n\psi_n} = f_n g_n \psi_n$$

$$\hat{F}\underbrace{\hat{G}\psi_n}_{g_n\psi_n} = g_n \underbrace{\hat{F}\psi_n}_{f_n\psi_n} = g_n f_n \psi_n$$

Restando miembro a miembro:

$$(\hat{G}\hat{F} - \hat{F}\hat{G})\psi_n = 0$$

Como además, cualquier función puede escribirse como combinación lineal de autofunciones de un observable, entonces también:

$$(\hat{G}\hat{F} - \hat{F}\hat{G})\chi = 0$$

Esto significa que aplicar primero \hat{F} y después \hat{G} sobre una función es lo mismo que aplicar primero \hat{G} y luego \hat{F} . El operador $(\hat{G}\hat{F} - \hat{F}\hat{G})$ se llama conmutador de \hat{G} con \hat{F} y se denota $[\hat{G}, \hat{F}]$ (también se dice que \hat{G} conmuta con \hat{F}). En la práctica van a ver propiedades de los conmutadores.

- Entonces, la conclusión es:

⇒ Dos observables pueden estar bien definidos simultáneamente si su conmutador vale 0

⇒ Otra consecuencia importante es que si dos observables conmutan, comparten autofunciones.

Por el contrario, vamos a ver que si dos observables no conmutan, va a haber una relación de incerteza entre ellos (es decir, no pueden estar bien definidos simultáneamente). Veámoslo para un caso conocido: calculemos el conmutador de \hat{x} y \hat{p}_x . Para calcular un conmutador se lo aplica sobre una función cualquiera:

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

$$\Rightarrow \boxed{[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar}$$

\hat{x} y \hat{p}_x no conmutan y ya sabemos que hay una relación de incerteza entre ellos. La próxima clase vamos a calcular esa incerteza en forma exacta.

-----⊗-----

- Les dejo tres ejercicios para demostrar usando lo aprendido en esta clase. Los resultados vamos a usarlos la clase que viene.

Sean \hat{A} y \hat{B} dos observables físicos (=operadores hermíticos). Demostrar :

1) $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}\hat{A}$

2) $[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = -[\hat{A}, \hat{B}]$ (se dice que es antihermítico) (hint: usar el resultado 1))

3) Si escribimos (sin perder generalidad) que:

$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$ entonces \hat{C} es hermítico.