# *Formalismo de Schrödinger-Mecánica ondulatoria-1ra parte*

*Paquetes de ondas - Incerteza*

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

*Niels Bohr*

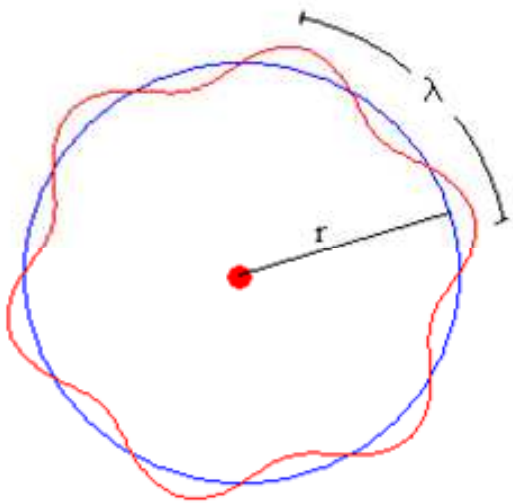
*De Broglie:*

*La naturaleza es simétrica: la dualidad onda-partícula de la radiación electromagnética propuesta por Einstein se extiende a toda la naturaleza física.*

*Radiación:* a veces, ondas y a veces, partículas

$\Rightarrow$ la *materia* también tiene ese carácter dual!

*Y las reglas de cuantificación?* Condiciones sobre las ondas!




Onda estacionaria $2\pi\, r = n\lambda$

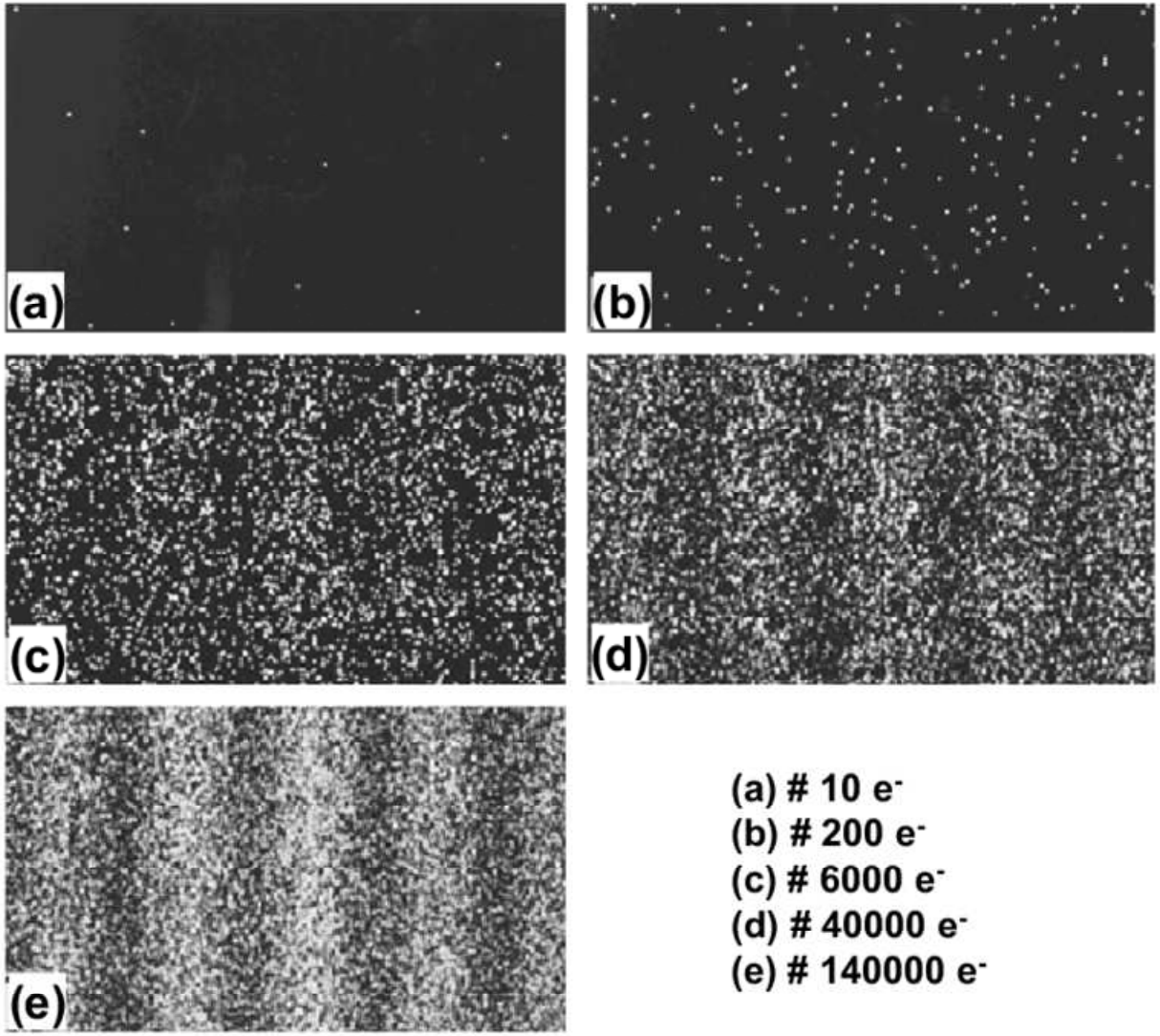
Dualidad onda-partícula para un fotón:

$$p = \hbar k = \frac{h}{\lambda} \qquad (\lambda = \frac{2\pi}{k})$$

$$2\pi\, r = n\frac{h}{p} \Rightarrow \boxed{pr = L = n\hbar}$$

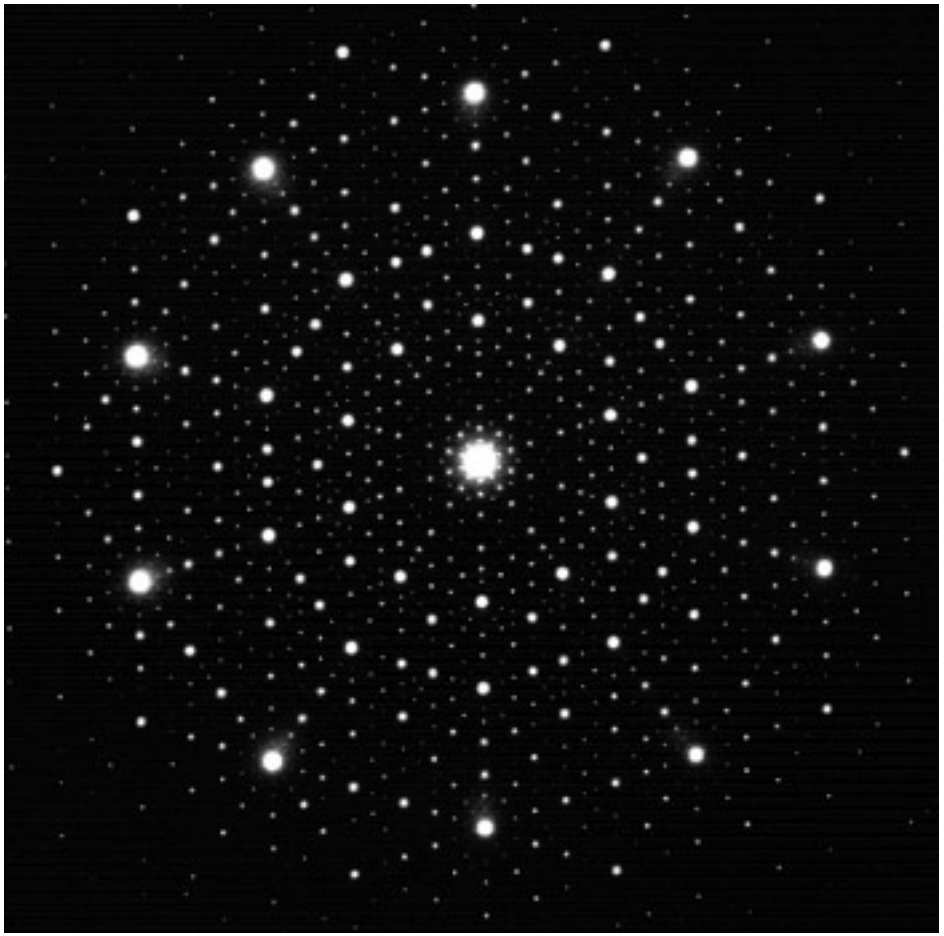
*Ambas condiciones son equivalentes!*

*Y el "caracter ondulatorio"?…*
*La **probabilidad!** La probabilidad tiene "**caracter ondulatorio**"*




(a) # 10 $e^-$
(b) # 200 $e^-$
(c) # 6000 $e^-$
(d) # 40000 $e^-$
(e) # 140000 $e^-$

The picture on the main page is a Selected Area Electron Diffraction pattern of a decagonal phase of Al70Co11Ni19 . The beautiful bright Bragg peaks, resembling those from crystallographic diffraction, along with the perfect ten-fold symmetry, which violates crystallographic symmetry, According the latest definition adopted by International Union of Crystallography (1992), a crystal is that which displays an essentially discrete diffraction pattern.



# Interference in Electrons Thru 2 slits

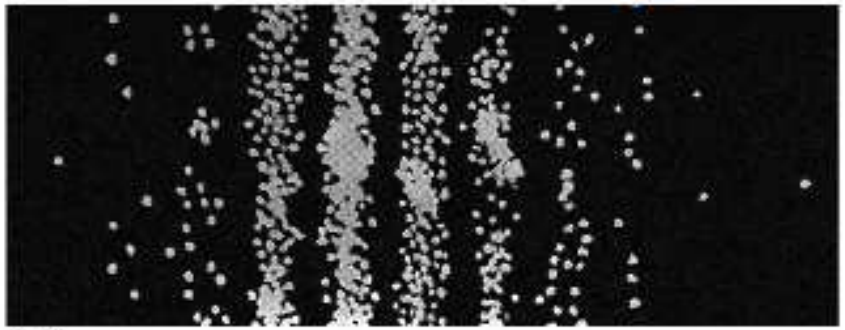
Growth of 2-slit Interference pattern thru different exposure periods

Photographic plate (screen) struck by:

28 electrons

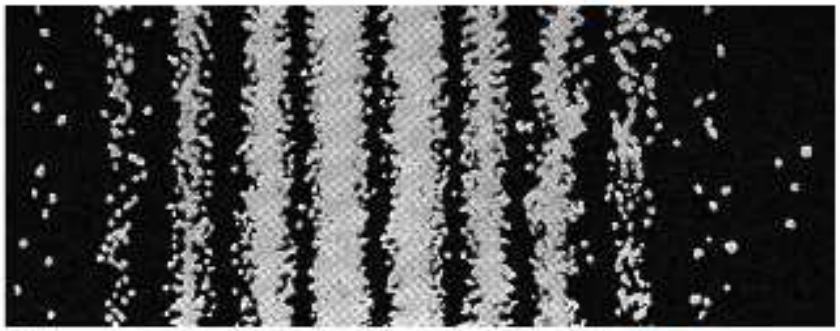
(a)

1000 electrons



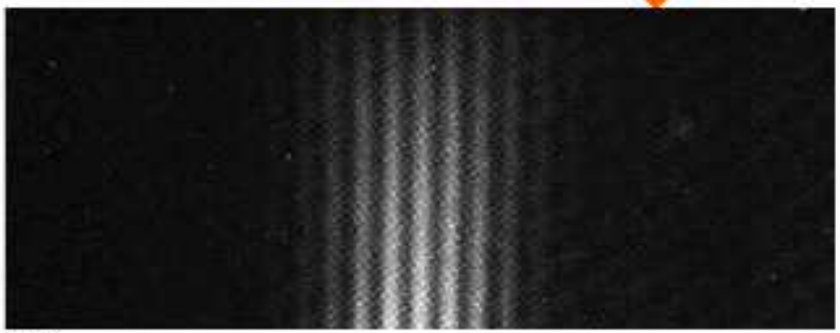
(b)

10,000 electron



(c)

$10^6$ electrons



(d)

White dots simulate presence of electron

No white dots at the place of destructive Interference (minima)

*Vamos a tener que trabajar con ondas …*

## ➢ *Ondas – Paquetes de ondas*

- *Paquete de ondas* $\psi(x,t)$

$$\left.\begin{array}{l} \Rightarrow \textit{dependencia espacial}: \\ \psi(x,0) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} g(k)e^{ikx}dk \\ \Rightarrow \textit{distribución espectral}: \\ g(k) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0)e^{-ikx}dx \end{array}\right\} \textit{fns. inversas de Fourier}$$

$$\left.\begin{array}{l} \Rightarrow \textit{evolución temporal}: \\ \psi(0,t) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} f(\omega)e^{i\omega t}d\omega \\ \Rightarrow \textit{distribución en frecuencias}: \\ f(\omega) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \psi(0,t)e^{-i\omega t}dt \end{array}\right\} \textit{fns. inversas de Fourier}$$

*Ejemplo*. Onda plana: $f(x) = e^{ikx}$

- Espectro de $k's$ es un único $k \Rightarrow \Delta k = 0$ y $\Delta x \to \infty$

$$f(x) = e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k') e^{ik'x} dk'$$

donde

$$g(k') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ik'x} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} e^{-ik'x} dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')x} dx$$

- "Función" $\delta(x-a)$ tq.:

$$\int_{\Delta} \delta(x-a) y(x) dx = \begin{cases} y(a) \; sii \; a \in \Delta \\ 0 \; sii \; a \notin \Delta \end{cases}$$

$\Rightarrow \delta(x-a) \equiv$ *delta de Dirac* $\Rightarrow$ funcional

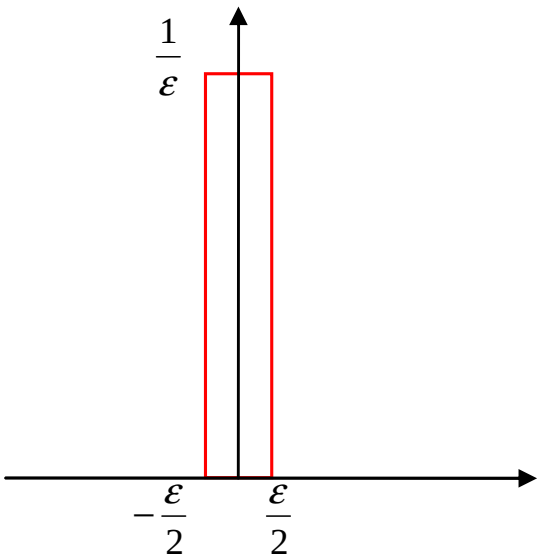
$$\Rightarrow g(k') = \sqrt{2\pi}\delta(k-k') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')x}dx$$

$$\Rightarrow \boxed{\delta(k-k') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')x}dx}$$

➢ Notemos que:

$$\int_{x_1}^{x_2} \delta(x-a)dx = 1 \;\; sii \; a \in [x_1, x_2]$$

Por ejemplo:




$$\delta_\varepsilon(x) = \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon} & si \; -\frac{\varepsilon}{2} \le x \le \frac{\varepsilon}{2} \\ 0 \; en \; otro \; caso \end{cases}$$

Teorema del valor medio:

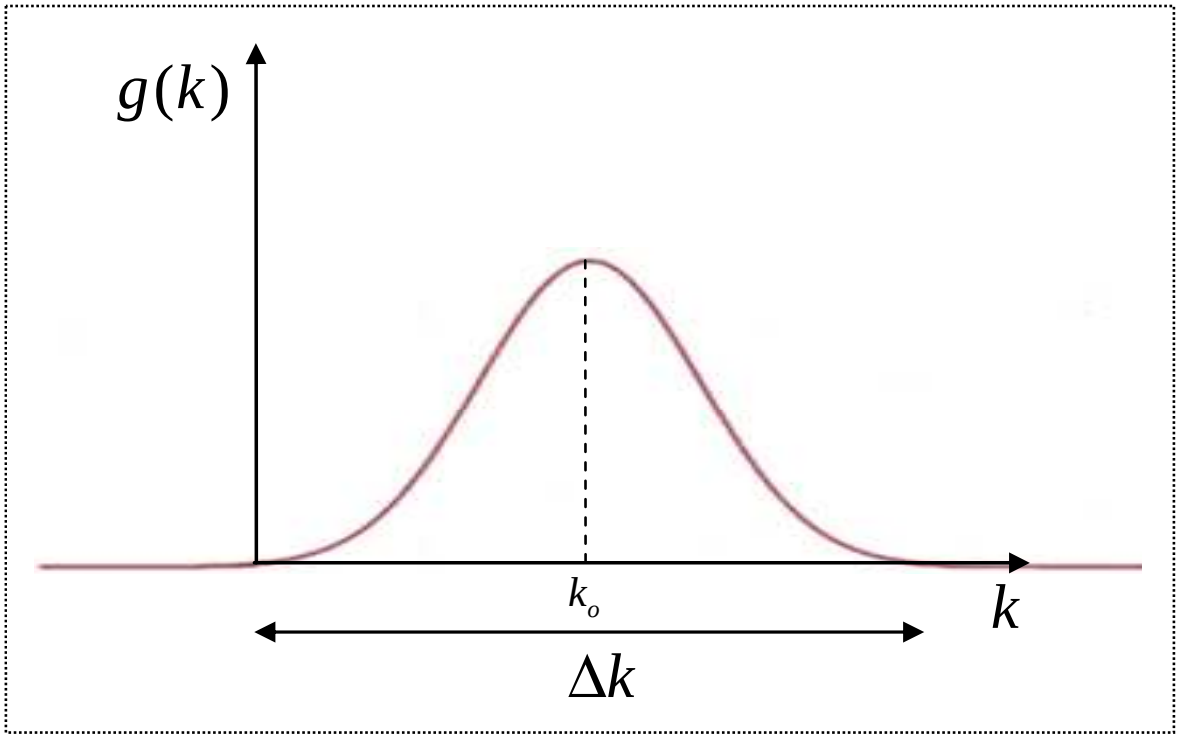
$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta_\varepsilon(x)dx \cong f(0)\int_{-\frac{\varepsilon}{2}}^{\frac{\varepsilon}{2}} \delta_\varepsilon(x)dx = f(0)$$

Para $\varepsilon \to 0$: $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)dx = f(0)$

➢ *Cuanto más ancho es el rango espectral (es decir, cuantos más $k's$ incluyo) más angosto es el paquete (y viceversa).*

- Paquete de ondas:

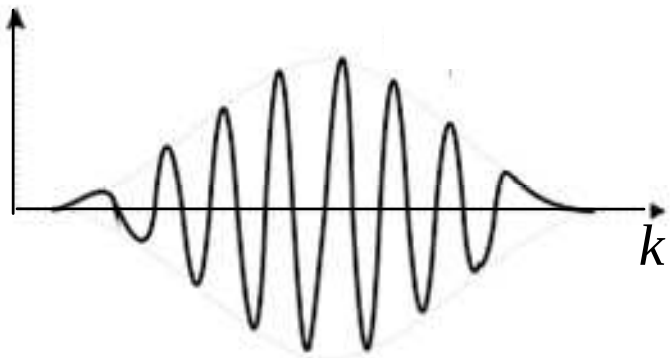
$$\psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{i(k-k_o)(x-x_o)} dk$$



➢ *Vamos a estimar el ancho del paquete* $\Rightarrow$ nos paramos en un $x$ y vemos si el valor de la integral es grande o chico.

$$\psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{i(k-k_o)(x-x_o)} dk$$

a) $x$ tq $|x - x_o| > \dfrac{1}{\Delta k}$ ($x$ alejado del centro del paquete).

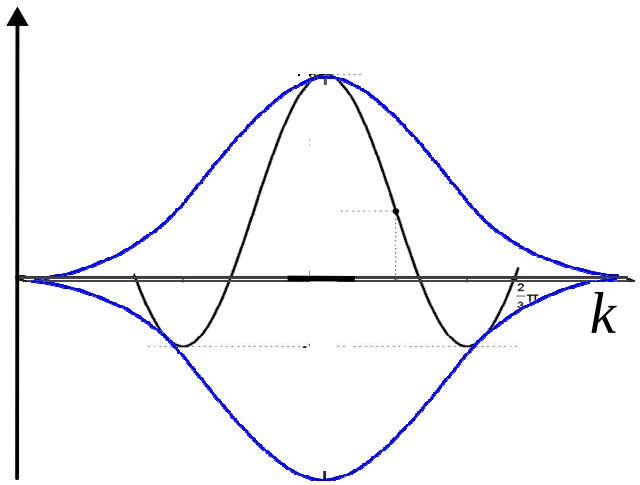



$\Rightarrow$La función $e^{i(k-k_o)(x-x_o)}$ oscila muchas veces en $\Delta k$ (exponente grande!):

$\Rightarrow$ la integral, es decir, $\psi(x,0) \to 0$

b) $x$ tq $|x - x_o| < \dfrac{1}{\Delta k}$ (un $x$ cerca del centro del paquete):

$$\psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{i(k-k_o)(x-x_o)} dk$$




El exponente de $e^{i(k-k_o)(x-x_o)}$ es chico $\Rightarrow$la función apenas oscila en el intervalo $\Delta k \Rightarrow$ la integral, es decir, $\psi(x,0)$ tiene un valor considerable.

➢ Entonces: $|x - x_o| \geq \dfrac{1}{\Delta k} \Rightarrow \boxed{\Delta x \Delta k \geq 1}$ (orden de magnitud!)

- *Paquete de de Broglie:*

$$k = \frac{p}{\hbar} \Rightarrow \Delta k = \frac{\Delta p}{\hbar}$$

➢ *Paquete de de Broglie:*

$$k = \frac{p}{\hbar} \Rightarrow \Delta k = \frac{\Delta p}{\hbar}$$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta x \Delta p \geq \hbar}$$ *1^ra relación de incerteza de Heisenberg*

➢ *Paquete de de Broglie:*

$$k = \frac{p}{\hbar} \Rightarrow \Delta k = \frac{\Delta p}{\hbar}$$

$\Rightarrow$ $\boxed{\Delta x \Delta p \geq \hbar}$ *1$^{ra}$ relación de incerteza de Heisenberg*

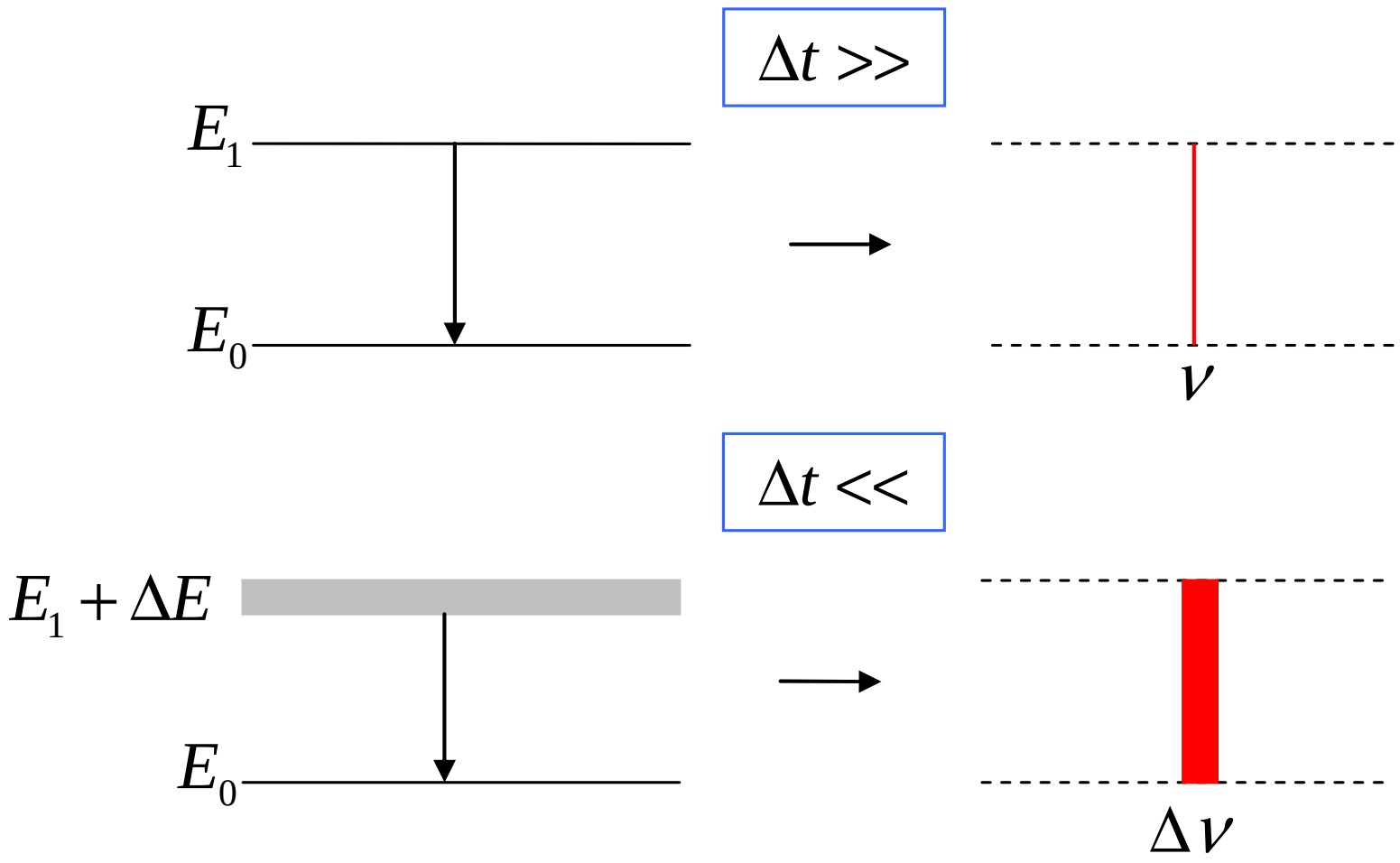
*No se puede medir la posición y el impulso de una partícula con una precisión mayor que esta.*

$\Rightarrow$no es un "problema" de nuestro aparato de medida
$\Rightarrow$no se puede hablar de trayectorias!
$\Rightarrow$ nos habla del carácter ondulatorio de las partículas.

➢ Igualmente: $\Delta t \Delta \omega \geq 1$

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \Rightarrow \Delta \omega = \frac{\Delta E}{\hbar}$$

$\Rightarrow$ $\boxed{\Delta t \Delta E \geq \hbar}$ *2$^{da}$ relación de incerteza de Heisenberg*


$\Delta t >>$
$E_1$
$E_0$
$\nu$
$\Delta t <<$
$E_1 + \Delta E$
$E_0$
$\Delta \nu$

*En 1925, un físico austríaco, Erwin Schrödinger, desarrolla un formalismo matemático, basado fundamentalmente en la hipótesis de de Broglie, para formalizar todas este cuerpo de ideas cuánticas.*

## *Formalismo de Schrödinger*

*Erwin Schrödinger (1925):*

- Hipótesis de de Broglie $\Leftrightarrow$ *dualidad onda partícula*
- Relaciones de incerteza de Heisenberg $\Rightarrow$ consecuencia de la dualidad onda-partícula
- Interpretación probabilística de las características ondulatorias $\Rightarrow$*Max Born*, 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.*

***Carácter estadístico!***

- Recordemos: $\dfrac{dN}{N} \propto |\phi(x)|^2$ (doble rendija)

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:

$$\boxed{\frac{dN}{N}(x,y,z,t) = \left|\psi(x,y,z,t)\right|^2 dxdydz}$$

➢ $\psi(\vec{x},t) \Rightarrow$puede ser compleja! (lo "físico" es la densidad de prob.)

$$\int_{\forall\vec{x}} \frac{dN}{N}(\vec{x},t) = \int_{\forall\vec{x}} \left|\psi(x,y,z,t)\right|^2 d^3x$$

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

$\Rightarrow \psi(\vec{x},t)$ de cuadrado integrable y normalizada.

$\Rightarrow$"vive" en el espacio de coordenadas.

- Probabilidades y valores medios. En una dimensión:

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

$$\sigma_x^2 = \left\langle \left(x - \langle x \rangle\right)^2 \right\rangle = \left\langle x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \right\rangle = \left\langle x^2 \right\rangle - 2\langle x \rangle\langle x \rangle + \langle x \rangle^2 = \left\langle x^2 \right\rangle - \langle x \rangle^2$$

- Función de onda $\phi$ que vive en el espacio $\vec{p}$ ($\equiv$ espectro de $k's$):

$$\boxed{\frac{dN}{N}(p_x, p_y, p_z, t) = \left|\phi(p_x, p_y, p_z, t)\right|^2 d^3p}$$

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

➢ $\psi(x, y, z, t)$ y $\phi(p_x, p_y, p_z, t)$ $\Rightarrow$ *funciones inversas de Fourier.*

$\Rightarrow$*principios de incerteza de Heisenberg*

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

➢ En una dimensión:

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

$g(k_x)$ no es la función de onda:

$\rightarrow$ no depende explícitamente del impulso.

$\rightarrow$ no está normalizada.

- Relación de de Broglie $(k_x \equiv k)$:

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

Cambiamos variables:

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

Función inversa de Fourier $g(p)$:

$$g(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-i\frac{px}{\hbar}} dx \Rightarrow \text{no esta normalizada}$$

- Calculamos:

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

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

---

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

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

---

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

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

---

$$\delta(x-x') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x')}dk$$

Haciendo $k = \frac{p}{\hbar}$ ; $dp = \hbar dk$, la última integral:

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

---

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

$$= \hbar\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\psi(x)dx}_{=1} = \hbar$$

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

➢ Relación entre las funciones de onda (en una dim.):

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

➢ En 3 dimensiones:

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

(integrales triples)

➢ ***Calculemos*** $\langle p_x \rangle$**.**

*Es necesario hacerlo en el espacio de impulsos..?*

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

Por partes [ ]:

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

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

$$(\psi(x \to \pm\infty) \to 0)$$

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

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

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

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

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

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

- Reordenando:

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

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

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

- Reordenando:

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

*Moraleja: hacer $\langle p \rangle$ en el espacio de coordenadas equivale a calcularlo introduciendo el operador diferencial $\left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)$:*

$\Rightarrow$ ***representación en coordenadas de*** $p_x$**.**

***Consecuencia***: *dentro del formalismo de Schrödinger, cualquier magnitud física tiene asociado un* ***operador****, cuyo valor de expectación es lo que uno puede medir.*

- Igualmente: $p_s = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial x_s}$ *con* $x_s = x, y, z$

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

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

Operador impulso angular, en cartesianas:

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

## *Observables físicos: operadores hermíticos*

$$\hat{F} \equiv operador$$

No cualquier operador es una magnitud física medible

$\Rightarrow$ valores medios reales $\Rightarrow$ *observable físico*

➢ *Condición* $\Rightarrow$ *hermítico o autoadjunto:*

$\boxed{\hat{F}^* = \hat{F}^t}$ con $\hat{F}^t \equiv$ operador $F$ *transpuesto*:

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

- Si conjugamos la condición:

$\boxed{\hat{F} = \hat{F}^{t*} \equiv \hat{F}^+}$ $\hat{F}^+$ (transpuesto conjugado)

$\Rightarrow$ *conjugado hermítico* o *hermitiano*, o *adjunto*.

$$\Rightarrow \hat{F} \equiv \textit{autoadjunto o hermítico}$$

- Condición suficiente (aunque no necesaria):

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

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

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

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

- *Ejemplo:* $xp_x$ no es hermítico (no es un *observable*):

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

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

$$\langle xp_x \rangle = \underbrace{x \psi^* \psi \Big|_{-\infty}^{\infty}}_{=0} - \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi \frac{\partial (\psi^* x)}{\partial x} dx$$

$$= -\frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \psi^* \psi + \psi x \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) dx$$

$$= -\frac{\hbar}{i} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} (\psi^* \psi) dx}_{=1} - \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi x \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx$$

$$= -\frac{\hbar}{i} + \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi \, dx \right]^* = -\frac{\hbar}{i} + \langle xp_x \rangle^*$$

$$\langle xp_x \rangle = -\frac{\hbar}{i} + \langle xp_x \rangle^*$$

- $\dfrac{xp_x + p_x x}{2}$ es hermítico

$\Rightarrow$ en gral:

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

es *hermítico*

## *Autofunciones y autovalores*

*Cuándo un sistema va a tener una determinada variable dinámica*

$\hat{F}$ *bien definida?* $\Rightarrow \sigma_F^2 = 0$

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

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

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

## *Autofunciones y autovalores*

*Cuándo un sistema va a tener una determinada variable dinámica*

$\hat{F}$ *bien definida?* $\Rightarrow \sigma_F^2 = 0$

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

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

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

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

## *Autofunciones y autovalores*

*Cuándo un sistema va a tener una determinada variable dinámica*

$\hat{F}$ *bien definida?* $\Rightarrow \sigma_F^2 = 0$

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

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

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

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

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

- Integral definida positiva:

$$\left|\left(\hat{F} - \langle F \rangle\right)\psi\right|^2 = 0 \Rightarrow \left(\hat{F} - \langle F \rangle\right)\psi = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{F}\psi = \langle F \rangle \psi}$$ *ecuación de autovalores*

- $\{\langle F \rangle\} \Rightarrow$ espectro de $\hat{F} \Rightarrow$ *únicos valores posibles!*
- $\{\psi_n\} \Rightarrow$ autofunciones de $\hat{F} \Rightarrow \{\ \}$ *ortonormal y completo* $\Rightarrow$ *base:*

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

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

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

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

*Restamos una de otra:*

$$(f_n - f_m)\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n d^3x = 0 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n d^3x = \delta_{nm}$$

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

$\Rightarrow$ *base:* $\quad \chi = \sum_n c_n \psi_n$