Clase 1 - Martes 17/08/2021

Física Teórica 2 : Mecánica Cuántica

Teóricas: Pablo Tamborenea

Jefe de Trabajos Prácticos: David Blanco

Teóricas: martes y viernes - 9 a 11 hs

Prácticas: martes y viernes - 11 a 14 hs

Segundo Cuatrimestre 2021 (15 semanas)

Inicio de clases: martes 17 de agosto

Fin de clases: sábado 27 de noviembre

Régimen de aprobación de la materia

2 parciales (2 recuperatorios al final del cuatrimestre)

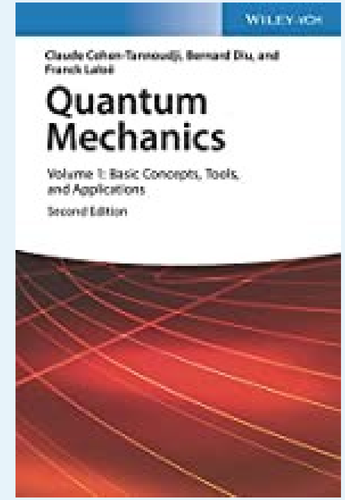
Examen Final

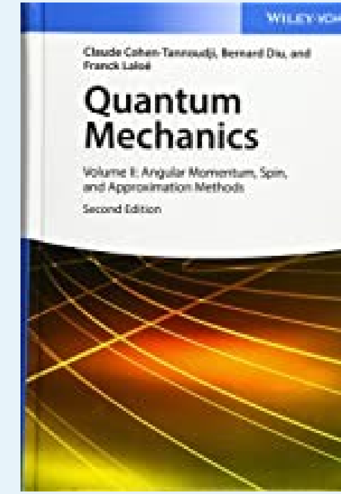
Nota: promedio de los parciales + hasta 2 puntos por desempeño en el final

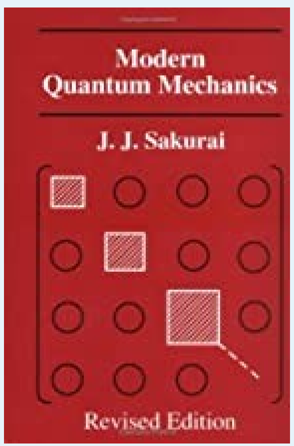
Bibliografía

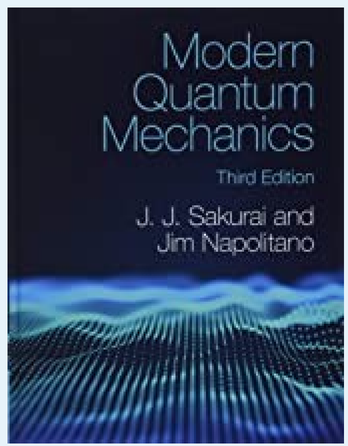
Quantum Mechanics, volúmenes I y II

C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë

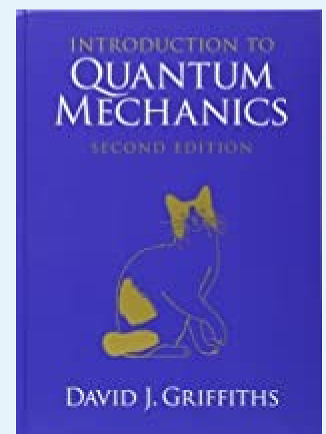


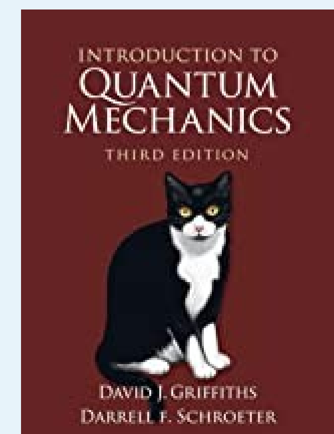






Modern Quantum Mechanics, **J. J. Sakurai**





Introduction to Quantum Mechanics, **D. Griffiths**

Página web de la materia

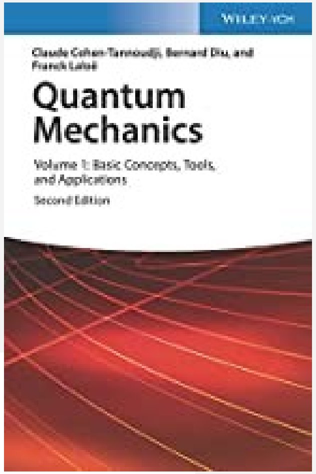
http://materias.df.uba.ar/ft2a2021c2/

Contiene toda la información sobre:

Cronogramas, programa, guias de problemas, links a los videos de las teóricas

y las prácticas, bibliografía, etc.

Herramientas matemáticas de la Mecánica Cuántica



OUTLINE OF CHAPTER II

A. ONE-PARTICLE WAVE FUNCTION SPACE

1. Structure of the wave function space $\mathscr{F}$
   - *a.* $\mathscr{F}$ as a vector space
   - *b.* The scalar product
   - *c.* Linear operators
2. Discrete orthonormal bases in $\mathscr{F}$: $\{ u_i(\mathbf{r}) \}$
   - *a.* Definition
   - *b.* Components of a wave function in the $\{ u_i(\mathbf{r}) \}$ basis
   - *c.* Expression for the scalar product in terms of the components
   - *d.* Closure relation
3. Introduction of "bases" not belonging to $\mathscr{F}$
   - *a.* Plane waves
   - *b.* "Delta functions"
   - *c.* Generalization : continuous "orthonormal" bases

Espacio de Hilbert de funciones de onda de una partícula

David Hilbert

(Königsberg, Prusia Oriental;   23 / 01 / 1862
Gotinga, Alemania; 14 / 02 / 1943)

Matemático alemán, reconocido como uno de los más influyentes del siglo XIX y principios del XX.

Herramientas matemáticas de mecánica cuántica

La función de onda de una partícula

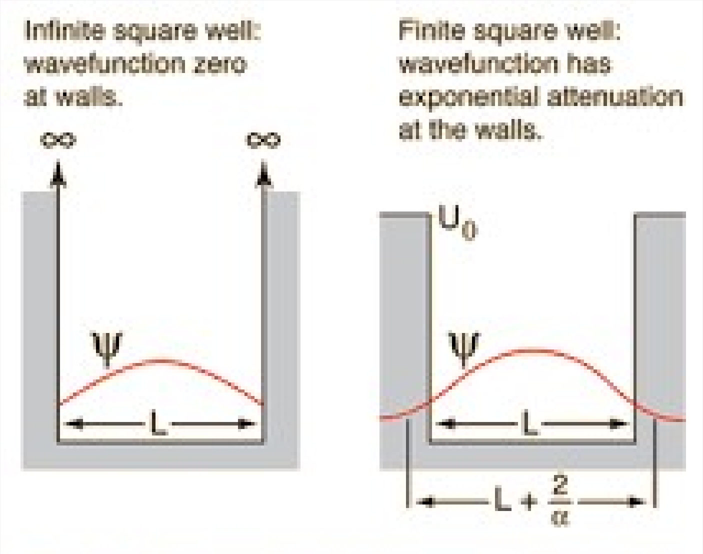
$\psi(\mathbf{r}, t)$ → $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$ Probabilidad de estar en $d^3\boldsymbol{r}$

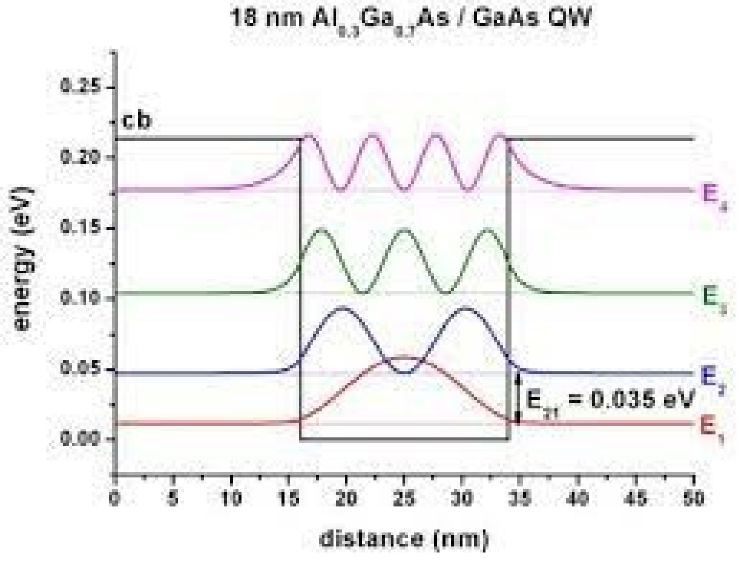
Estado de una partícula:
función de onda

→ $$\int d^3r \, |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = 1$$ → Necesitamos funciones de cuadrado integrable: L^2

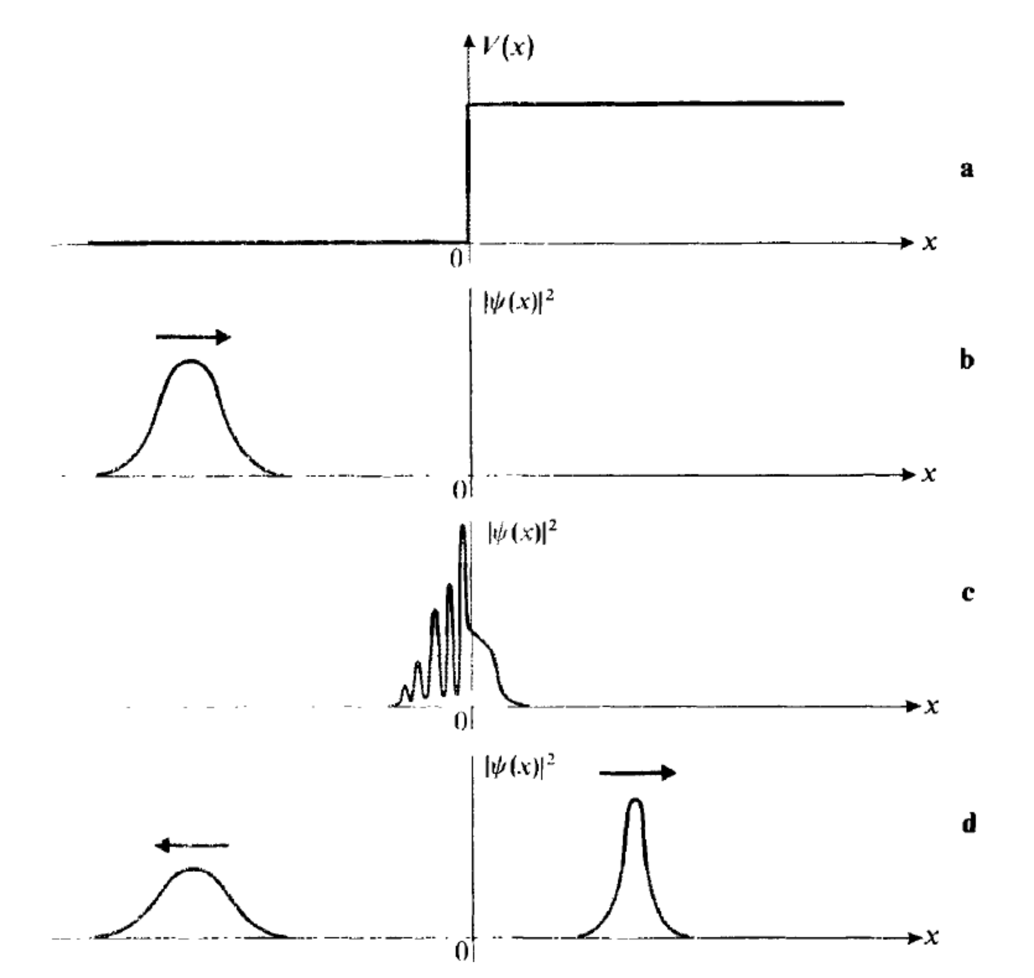
Físicamente, sólo nos quedamos con el conjunto de funciones de cuadrado integrable pero "buenas": contínuas, diferenciables: $\mathcal{F} \subset L^2$

Ejemplo: partícula en un potencial tipo caja unidimensional

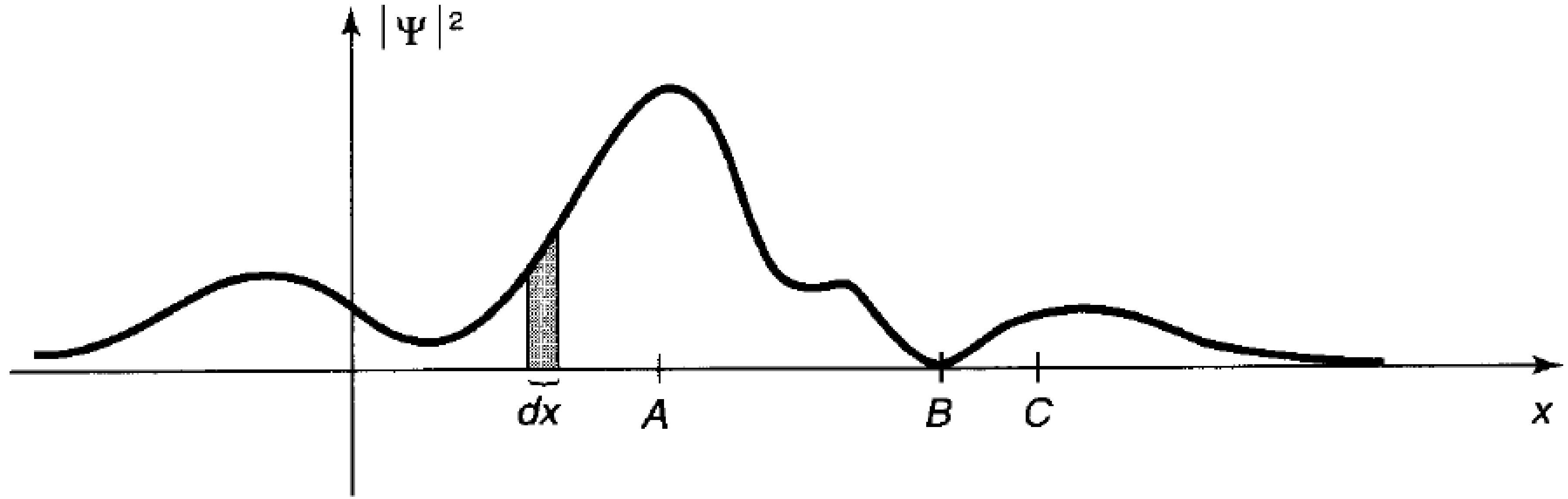




Ejemplo: evolución de una función de onda al encontrar una barrera de potencial



Densidad de probabilidad de encontrar a la partícula en un dx



$$|\Psi(x,t)|^2\,dx = \left\{ \begin{array}{l} \text{probability of finding the particle} \\ \text{between } x \text{ and } (x+dx), \text{ at time } t. \end{array} \right\}$$

Un espacio de Hilbert es un espacio vectorial equipado con producto interno o escalar, que permite definir longitudes y ángulos.

El conjunto $\mathcal{F}$ forma un espacio de Hilbert

- $\mathcal{F}$ es un espacio vectorial:

Si $\psi_1(\mathbf{r}), \psi_2(\mathbf{r}) \in \mathcal{F} \;\Rightarrow\; \psi(\mathbf{r}) = \lambda_1\psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2\psi_2(\mathbf{r}) \in \mathcal{F}$

con $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$

Se demuestra viendo que $\psi(\mathbf{r})$ también es de cuadrado integrable.

- Se define un producto escalar en $\mathcal{F}$:

$$\left(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b} = \sum_{i=1}^{3} a_i b_i\right)$$

Vectores en R^3

$$(\varphi, \psi) = \int d^3r \;\; \varphi^*(\mathbf{r}) \;\; \psi(\mathbf{r})$$

Producto escalar en $\mathcal{F}$:

$$(\varphi, \psi) = \int d^3r \ \varphi^*(\mathbf{r}) \ \psi(\mathbf{r})$$

Ortogonalidad $(\varphi, \psi) = 0$

$$(\psi, \psi) = \int d^3r \, |\psi(\mathbf{r})|^2$$

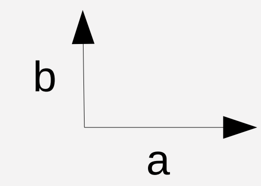
Real y positivo

$\Rightarrow$ $\sqrt{(\psi, \psi)}$ “norma” o módulo de los vectores Ψ

Vectores en R^3 :

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_{i=1}^{3} a_i b_i$$

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = |\mathbf{a}||\mathbf{b}| \cos\theta = 0 \ \Rightarrow \ \theta = \frac{\pi}{2}$$



$$|\mathbf{a}| = \sqrt{\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}} = \sqrt{\sum_{i=1}^{3} a_i^2}$$

Propiedades del producto escalar

$$(\varphi, \psi) = \int d^3r \;\; \varphi^*(\mathbf{r}) \;\; \psi(\mathbf{r})$$

$$(\varphi, \psi) = (\psi, \varphi)^*$$

$$(\varphi, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\varphi, \psi_1) + \lambda_2(\varphi, \psi_2)$$

Lineal en el segundo argumento

$$(\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2, \psi) = \lambda_1^*(\varphi_1, \psi) + \lambda_2^*(\varphi_2, \psi)$$

Antilineal en el primer argumento

Operadores lineales

Operadores lineales

$$A : \psi(\mathbf{r}) \longrightarrow \psi'(\mathbf{r})$$

$$\psi'(\mathbf{r}) = A\psi(\mathbf{r})$$

$$A[\lambda_1\psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2\psi_2(\mathbf{r})] = \lambda_1 A\psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2 A\psi_2(\mathbf{r})$$

$$A : \psi(\mathbf{r}) \longrightarrow \psi'(\mathbf{r})$$

Operadores lineales: ejemplos

$$X\psi(x, y, z) = x\psi(x, y, z)$$

Operador posición en x

$$D_x\psi(x, y, z) = \frac{\partial\psi(x, y, z)}{\partial x}$$

Operador derivada con respecto a x
Está relacionado con p_x

$$\Pi\psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z)$$

Operador paridad

Producto de operadores: $(AB)\psi(\mathbf{r}) = A(B\psi(\mathbf{r}))$

Conmutatividad del producto de operadores: $\text{En general } AB \neq BA$

Definimos el **conmutador** de A y B: $\boxed{[A, B] = AB - BA}$

Conmutador: $[A, B] = AB - BA$

Ejemplo importante:

$$
\begin{aligned}
[X, D_x] \; \psi(\mathbf{r}) &= \left(x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} x \right) \psi(\mathbf{r}) \\
&= x \frac{\partial}{\partial x} \psi(\mathbf{r}) - \frac{\partial}{\partial x} [x \psi(\mathbf{r})] \\
&= x \frac{\partial}{\partial x} \psi(\mathbf{r}) - \psi(\mathbf{r}) - x \frac{\partial}{\partial x} \psi(\mathbf{r}) = - \psi(\mathbf{r})
\end{aligned}
$$

$\Rightarrow$ $[X, D_x] = -1$

1: Operador Identidad

Bases ortonormales del espacio de Hilbert

Bases ortonormales del espacio de Hilbert

Considero un conjunto de funciones $\{u_i(\mathbf{r})\} \subset \mathcal{F}$

Ortonormalidad: $(u_i, u_j) = \int d^3r \, u_i^*(\mathbf{r}) u_j(\mathbf{r} = \delta_{ij}$

Es base si $\forall \psi(\mathbf{r}) \; \Rightarrow \; \psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i u_i(\mathbf{r})$

Notar entonces: $\boxed{\psi(\mathbf{r}) \longleftrightarrow \{c_i\}}$

Vemos como obtener los coeficientes de la expansión de Ψ:

$$(u_j, \psi) = \left(u_j, \sum_i c_i\, u_i\right)$$

$$= \sum_i c_i (u_j, u_i)$$

linealidad

$$= \sum_i c_i\, \delta_{ij} = c_j$$

ortogonalidad

$$\boxed{c_i = (u_i, \psi) = \int d^3r \; u_i^*(\mathbf{r}) \; \psi(\mathbf{r})}$$

Producto escalar expresado en componentes:

Sean

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_i b_i\, u_i(\mathbf{r})$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_j c_j\, u_j(\mathbf{r})$$

$$(\varphi, \psi) = \left(\sum_i b_i u_i, \sum_j c_j u_j\right)$$

Linealidad y antilinealidad

$$= \sum_{i,j} b_i^* c_j\, (u_i, u_j)$$

ortogonalidad

$$= \sum_{i,j} b_i^* c_j\, \delta_{ij}$$

$$= \sum_i b_i^* c_i$$

$$(\psi, \psi) = \sum_i |c_i|^2$$

Norma o módulo al cuadrado

Relación de clausura: expresa que la base es completa (todo estado se puede expandir en ella)

Supongamos que se puede expandir:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i \, u_i(\mathbf{r})$$

$$= \sum_i (u_i, \psi) \, u_i(\mathbf{r})$$

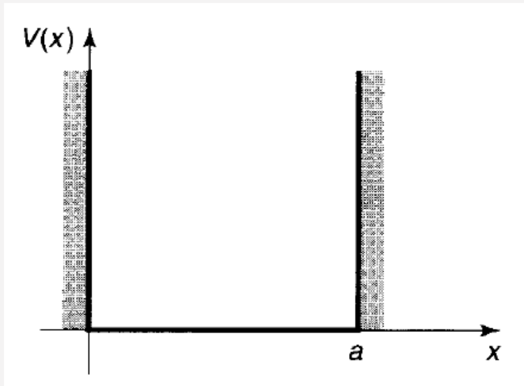
$$= \sum_i \left[\int d^3r' \; u_i^*(\mathbf{r}') \; \psi(\mathbf{r}') \right] u_i(\mathbf{r})$$

$$= \int d^3r' \; \psi(\mathbf{r}') \left[\sum_i u_i(\mathbf{r}) \; u_i^*(\mathbf{r}') \right]$$

$$\boxed{\sum_i u_i(\mathbf{r}) \; u_i^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}$$

Ejemplos de bases del espacio de Hilbert

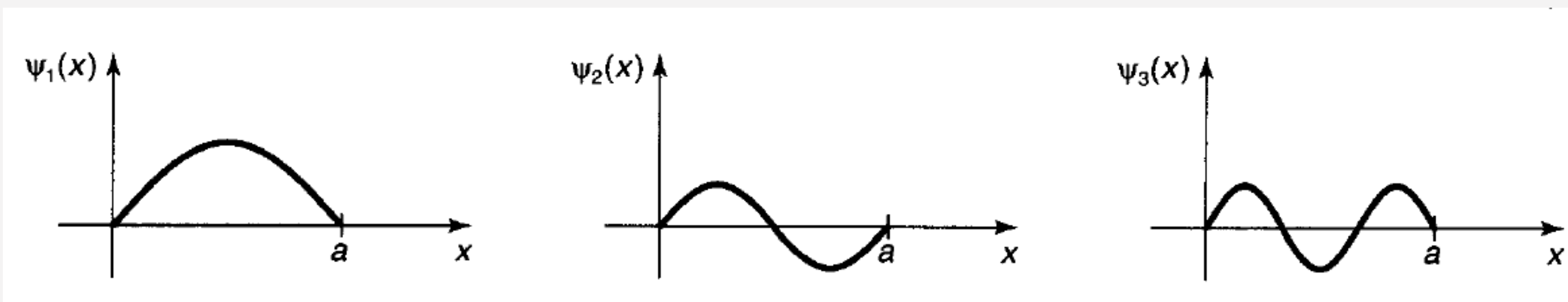
Pozo cuadrado infinito



$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

(Griffiths, Cap. 2)

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$



Es una base ortonormal y completa para funciones definidas en el intervalo (0.a)

$$\int dx\, \psi_m^*(x)\psi_n(x) = \delta_{mn}$$

ortonormalidad

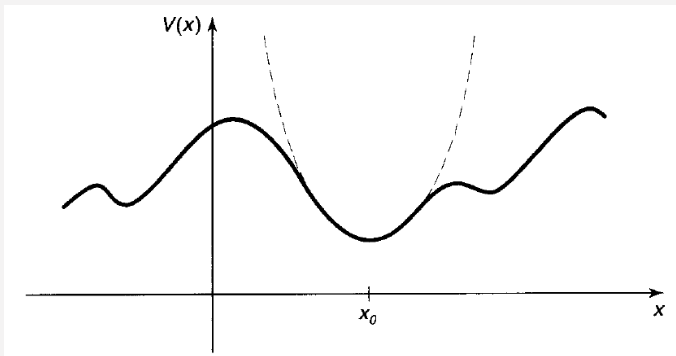
$$\sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(x') = \delta(x - x')$$

clausura

Ejemplos de bases del espacio de Hilbert

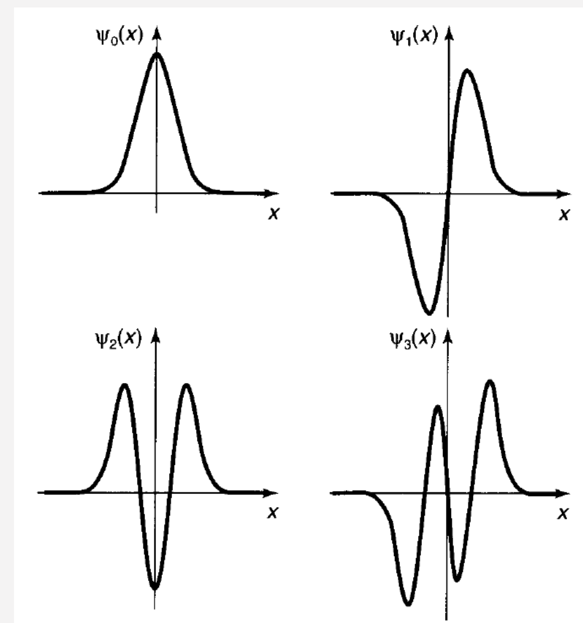
(Griffiths, Cap. 2)

Oscilador armónico



$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$$



Ejemplos de bases del espacio de Hilbert

(Griffiths, Cap. 2)

Partícula libre

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad \Rightarrow \quad \psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

Autoestados
Ondas planas

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^3r\,|\psi(\mathbf{r})|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} d^3r\,|e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} d^3r\,1 = \infty$$

Norma infinita

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} F(k)e^{ikx}\,dk \iff F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{-ikx}\,dx.$$

Transformada de Fourier, son base completa y ortogonal

Bases de “estados” que no pertenecen a L^2

En el capítulo 1 del Cohen se presenta la transformada de Fourier de Ψ(x) con la siguiente notación:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \ \bar{\psi}(p)\, e^{ipx/\hbar}$$

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \ \psi(x)\, e^{-ipx/\hbar}$$

Llamemos: $$v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$ Onda plana con vector de onda: $k = p/\hbar$

$$|v_p(x)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \Rightarrow v_p(x) \notin \mathscr{F}_x$$

Bases de "estados" que no pertenecen a L²

$$v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

$\{ v_p(x) \}$ Es una "base" porque permite expandir cualquier estado:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \; \bar{\psi}(p) \; v_p(x)$$

Los coeficientes de la expansión son la transformada de Fourier:

$$\bar{\psi}(p) = (v_p, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \; v_p^*(x) \; \psi(x)$$

Pero como $|v_p(x)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$ = constante, entonces $v_p(x)$ no es de cuadrado integrable

$$\Rightarrow \quad v_p(x) \notin \mathscr{F}_x$$

Bases de “estados” que no pertenecen a L^2

$$v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

$\{v_p(x)\}$ es una “base” pero:

(1) No es de cuadrado integrable

(2) Indice p es contínuo, $-\infty < p < \infty$

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ \bar{\psi}(p)\ v_p(x) \quad \longleftrightarrow \quad \psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i\, u_i(\mathbf{r})$$

$$\bar{\psi}(p) \quad \longleftrightarrow \quad c_i.$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp \quad \longleftrightarrow \quad \sum_i$$

Bases de “estados” que no pertenecen a L^2

$$v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{ipx/\hbar}$$

Usamos la expresión de la delta de Dirac:

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dk\, e^{iku} = \delta(u)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp\; v_p(x)\; v_p^*(x') = \frac{1}{2\pi}\int \frac{dp}{\hbar}\, e^{i\frac{p}{\hbar}(x-x')} = \delta(x-x')$$

Relación de clausura

$$(v_p, v_{p'}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\; v_p^*(x)\; v_{p'}(x) = \frac{1}{2\pi}\int \frac{dx}{\hbar}\, e^{i\frac{x}{\hbar}(p'-p)} = \delta(p-p')$$

“Ortonormalidad” en el sentido de Dirac

Bases de "estados" que no pertenecen a L^2

Para pasar a 3D:

$$v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \longrightarrow v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} e^{i\mathbf{p}.\mathbf{r}/\hbar}$$

$$\boxed{\begin{array}{ccc} i & \longleftrightarrow & \mathbf{p} \\ \sum_i & \longleftrightarrow & \int d^3p \\ \delta_{ij} & \longleftrightarrow & \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \end{array}}$$

Resumen de la Clase 1

En esta clase vimos:

- Formalidades del curso
- Espacio de Hilbert de funciones de onda de una partícula
- Operadores lineales
- Conmutador
- Bases del espacio de Hilbert
- Producto escalar expresado en componentes
- Relación de clausura de la base
- Base de estados no normalizable e indice contínuo: ondas planas