Clase 10 - Viernes 17/09/2021

La clase pasada vimos:

- Compatibilidad de observables: medición, preparación de estados
- Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo
- Conservación de la norma del estado
- Conservación de la densidad de probabilidad
- Evolución del valor medio de un observable
- Teorema de Ehrenfest
- Sistemas conservativos

En esta clase veremos:

- Estados estacionarios
- Constantes de movimiento
- Operadores unitarios
- Operador evolución
- Representación de Heisenberg

REPASO

Medición de observables compatibles

El resultado es el mismo:

$$\mathcal{P}(a_n, b_p) = \mathcal{P}(b_p, a_n) = \sum_i |c_{npi}|^2 \quad \text{probab.}$$

$$|\psi_{final}\rangle = \sum_i c_{npi} |a_n b_p i\rangle \Big/ \sqrt{\sum_i |c_{npi}|^2}$$

Conservación de la norma del estado durante la evolución:

E.S.D.T. $\longrightarrow$ $\dfrac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 0$ Evolución unitaria: se conserva la norma del estado

Vale $\dfrac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\cdot\vec{J}(\vec{r},t) = 0$ conservación de la densidad de probabilidad

REPASO

Evolución temporal del valor medio de un operador:

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

Teorema de Ehrenfest:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \mathbf{R} \rangle = \frac{1}{m}\langle \mathbf{P} \rangle$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \mathbf{P} \rangle = -\langle \nabla V(\mathbf{R}) \rangle$$

REPASO

Sistemas conservativos : $H \neq H(t)$

$$H\,|\varphi_{ni}\rangle = E_n\,|\varphi_{ni}\rangle$$

Evolución de un estado general:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{ni} c_{ni}(t_0)\, e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}\, |\varphi_{ni}\rangle$$

Con la condición inicial: $|\psi(t_0)\rangle = \sum_{ni} c_{ni}(t_0)\,|\varphi_{ni}\rangle$

Seguimos con sistemas conservativos

Sistemas conservativos : $H \neq H(t)$

$$H\,|\varphi_{ni}\rangle = E_n\,|\varphi_{ni}\rangle$$

$$\Rightarrow \quad |\psi(t)\rangle = \sum_{ni} c_{ni}(t_0)\, e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}\,|\varphi_{ni}\rangle$$

Estados estacionarios

Si $|\psi(t_0)\rangle$ es autoestado de H con E_n :

$$\Rightarrow \quad |\psi(t_0)\rangle = \sum_{i} c_{ni}(t_0)\,|\varphi_{ni}\rangle$$

otros $c_{mi}(t_0)$ con $m \neq n$ son cero.

Evolución de un **estado estacionario:**

$$\Rightarrow \quad |\psi(t)\rangle = \sum_i c_{ni}(t_0)\, e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}\, |\varphi_{ni}\rangle$$

$$= \underbrace{e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}}_{\text{fase global}} \sum_i c_{ni}(t_0)\, |\varphi_{ni}\rangle$$

$$= e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}\, |\psi(t_0)\rangle$$

El estado no varía en el tiempo

Constantes de movimiento

Constantes de movimiento

Sea obs. A tq: $\dfrac{\partial A}{\partial t} = 0$

$$[A, H] = 0$$

Propiedades de las constantes de movimiento

(1) $\dfrac{d\langle A\rangle}{dt} = \dfrac{d}{dt}\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle = 0 \Rightarrow$ A es const. de movimiento.

$\forall$ estado

Sistemas conservativos

Constante de movimiento $[A, H] = 0$ $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$

(2) La prob. de medir a_p es indep. de t. en $|\psi(t)\rangle$ general.

Supongamos: $H|\varphi_{npi}\rangle = E_n|\varphi_{npi}\rangle$

$$A|\varphi_{npi}\rangle = a_p|\varphi_{npi}\rangle$$

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_{npi} c_{npi}(t_0)\,|npi\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{npi} \underbrace{c_{npi}(t_0)\, e^{-iE_n(t-t_0)}}_{c_{npi}(t)}\,|npi\rangle$$

La probabilidad de medir a_p a tiempo t es:

$$\mathcal{P}(a_p, t) = \sum_{ni} |c_{npi}(t)|^2 = \underbrace{\sum_{ni} |c_{npi}(t_0)|^2}_{\text{indep. de } t} \quad ///$$

Sistemas conservativos

Constante de movimiento $\left[A, H\right] = 0$ $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$

(3) Buen número cuántico

Si en particular $|\psi(t_0)\rangle = |n p i\rangle$ Tenemos

$$\mathcal{P}(a_p, t) = 1 \quad \text{indep. de } t$$

El estado sigue siendo autoestado de A

$\Rightarrow$ vemos que el autovalor a_p es una "etiqueta" que permanece, decimos que es un buen número cuántico.

Sistemas conservativos

Frequencias de Bohr (Leer III-D-2-d)

Sea un obs. B cualquiera.

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

$$\langle\psi(t)|B|\psi(t)\rangle = \sum_{ni}\sum_{mj} C^*_{mj}(t_0)\, C_{ni}(t_0)\, \langle\varphi_{mj}|B|\varphi_{ni}\rangle\, e^{i(E_m-E_n)t/\hbar}$$

$$\omega_{mn} \equiv \frac{E_m - E_n}{\hbar}$$ frequencias de Bohr

Notar: ω_{mn} son independientes de B, solo dependen del Hamiltoniano.
B aparece en los "pesos" dados por $\langle\varphi_{mj}|B|\varphi_{ni}\rangle$.

Regla de selección

Si $\langle\varphi_{mj}|B|\varphi_{ni}\rangle = 0 \Rightarrow \omega_{mn}$ estará ausente

Esto está relacionado con la capacidad de emitir o absorber en ciertas condiciones (en presencia de un H' que contenga a B)

Operadores unitarios

Operadores unitarios (C_{II})

Def: U es unitario si $U^{-1} = U^{\dagger}$

o sea $U^{\dagger} U = U U^{\dagger} = \mathbb{1}$

Teo: U conserva el producto escalar:

Sean $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{E}$. Aplicando U:

$$|\tilde{\psi}_1\rangle = U |\psi_1\rangle$$

$$|\tilde{\psi}_2\rangle = U |\psi_2\rangle$$

El producto escalar de los Transformados es:

$$\langle \tilde{\psi}_1 | \tilde{\psi}_2 \rangle = \langle \psi_1 | \underbrace{U^{\dagger} U}_{\mathbb{1}} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \qquad ///$$

En particular, U conserva la norma $\langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle = \langle \psi | \psi \rangle$

Propiedades de los operadores unitarios

(1) Sea A hermítico $\Rightarrow T = e^{iA}$ es unitario

$$T^{+} = \left(e^{iA}\right)^{+} = \left(\sum_n \frac{(iA)^n}{n!}\right)^{+} = \sum_n \frac{(-iA^{+})^n}{n!} =$$

$$= \sum_n \frac{(-iA)^n}{n!} = e^{-iA} \rightarrow \begin{array}{l} T^{+}T = e^{-iA}e^{iA} = \mathbb{1} \\ TT^{+} = e^{iA}e^{-iA} = \mathbb{1} \end{array}$$

(2) Si U, V son unitarios $\rightarrow$ UV también.

(3) U es unitario $\Longleftrightarrow$ U aplicado a base $\{|v_i\rangle\}$ da otra base $\{U|v_i\rangle\}$

Propiedades de los operadores unitarios

(4) Si U es unitario $\Rightarrow$ su matriz $U_{ij} = \langle v_i | U | v_j \rangle$ es unitaria

Ej: Matriz de una rotación

(5) Sea U op. unitario $\Rightarrow$ sus autovalores satisfacen $u = e^{i\varphi}$, $\varphi \in \mathbb{R}$

Notar: $|u| = 1$

Transformaciones unitarias

Transformaciones unitarias de operadores

Sobre un operador A, aplicamos el operador unitario U así:

$$\tilde{A} = U A U^{+}$$

Propiedades

1) Sea $\{|v_i\rangle\}$ una base de $\mathcal{E}$.

Aplicando U: $U|v_i\rangle = |\tilde{v}_i\rangle$ $\quad (\Rightarrow \langle v_i|U^{+} = \langle\tilde{v}_i|)$

$$\Rightarrow \langle\tilde{v}_i|\tilde{A}|\tilde{v}_j\rangle = \langle v_i|U^{+} U A U^{+} U|v_j\rangle$$

$$= \langle v_i|A|v_j\rangle$$

Los elementos de matriz de operadores no cambian al aplicar la transformación U simultáneamente a operadores y estados.

2) En particular, si $|\alpha_n\rangle$ es / $A|\alpha_n\rangle = \alpha_n|\alpha_n\rangle$

Sea $|\tilde{\alpha}_n\rangle = U|\alpha_n\rangle$

$$\Rightarrow \tilde{A}|\tilde{\alpha}_n\rangle = UAU^{\dagger}U|\alpha_n\rangle$$

$$= UA|\alpha_n\rangle = \alpha_n U|\alpha_n\rangle = \alpha_n|\tilde{\alpha}_n\rangle$$

$|\tilde{\alpha}_n\rangle$ es autoestado de $\tilde{A}$ con mismo autovalor α_n.

3) $\widetilde{F(A)} = F(\tilde{A})$

Operador unitario infinitesimal

Sea $U(\varepsilon)$ op. unitario / $U(\varepsilon) \xrightarrow{\varepsilon \to 0} \mathbb{1}$

$\Rightarrow U(\varepsilon) = \mathbb{1} + \varepsilon G + \dots$

Tomando el adjunto: $U^\dagger(\varepsilon) = \mathbb{1} + \varepsilon G^\dagger + \dots$

Multiplicando: $U(\varepsilon)\, U^\dagger(\varepsilon) = U^\dagger(\varepsilon)\, U(\varepsilon) = \mathbb{1} + \varepsilon(G + G^\dagger) + \dots$

Como $U(\varepsilon)$ es unitario $\Rightarrow$ $G + G^\dagger = 0$ $\Rightarrow$ $G^\dagger = -G$

G es anti-hermítico

Operador unitario infinitesimal

$$U(\epsilon) = \mathbf{1} + \varepsilon\, G + \cdots$$

$$\left.\begin{array}{r} G^{\dagger} = -G \\ \text{Definimos el operador: } F = iG \end{array}\right\} \Rightarrow F - F^{\dagger} = 0$$

F es hermítico

$$\Rightarrow \boxed{U(\varepsilon) = \mathbb{1} - i\,\varepsilon\, F}$$

con F hermítico

Operador de evolución

Operador de evolución

Como ESDT es lineal, podremos escribir:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)\,|\psi(t_0)\rangle$$

Propiedades

$$U(t_0, t_0) = \mathbb{1}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle = H(t)\, U(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle \quad \forall\, |\psi(t_0)\rangle$$

$$\Longrightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t,t_0) = H(t)\, U(t,t_0)$$

Caso conservativo $H \neq H(t)$

La ecuación diferencial:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H U(t, t_0)$$

Se puede integrar: $U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}$

Operador evolución

$$|\psi(t)\rangle = U(t,t')\,U(t',t'')\,|\psi(t'')\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = U(t,t'')|\psi(t'')\rangle$$

$$\Rightarrow \quad U(t,t'') = U(t,t')U(t',t'')$$

$$\Rightarrow \quad U(t_n,t_1) = U(t_n,t_{n-1})\ldots U(t_3,t_2)U(t_2,t_1)$$

Usando lo anterior:

$$\mathbb{1} = U(t,t')U(t',t)$$

$$\mathbb{1} = U(t',t)U(t,t')$$

$$\Rightarrow \quad U(t',t) = U^{-1}(t,t')$$

Operador evolución

Operador evolución infinitesimal

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle$$

$$d|\psi(t)\rangle = |\psi(t+dt)\rangle - |\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} H(t)|\psi(t)\rangle\, dt$$

$$|\psi(t+dt)\rangle = \underbrace{\left[\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H(t)\, dt\right]}_{U(t+dt,\, t)} |\psi(t)\rangle$$

Operador evolución

$$\underbrace{|\psi(t+dt)\rangle = \left[\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H(t)\, dt\right]}_{U(t+dt,\,t)} |\psi(t)\rangle$$

Como H(t) es hermítico → U(t+dt,t) es unitario

Para evolución durante tiempo finito, $U(t,t_0)$ que es producto de U(t+dt,t) unitarios

→ $U(t,t_0)$ es unitario → $U^{\dagger}(t,t') = U^{-1}(t,t') = U(t',t)$

Conserva la norma de $|\psi(t)\rangle$ -- ya lo sabíamos.

Representaciones de Schrödinger y de Heisenberg

(Complemento G_{III})

Representaciones de Schrödinger y Heisenberg

Con la ESDT y las reglas de cuantización (para definir observables) introdujimos la "representación de Schrödinger".

Estado $|\psi(t)\rangle$ evoluciona y operadores $A(\vec{R},\vec{P})$ no.

Notación: $|\psi_S(t)\rangle$

Evolución Temporal en la representación de Schrödinger:

$$\left.\begin{array}{l} |\psi_s(t)\rangle = U(t,t_0)\,|\psi_s(t_0)\rangle \\ \text{como } U(t,t_0)^{-1} = U^{\dagger}(t,t_0) \end{array}\right\} \; |\psi_s(t_0)\rangle = U^{\dagger}(t,t_0)\,|\psi_s(t)\rangle$$

Representación de Heisenberg

Definimos: $|\psi_H\rangle = U^{\dagger}(t,t_0)\,|\psi_s(t)\rangle = |\psi_s(t_0)\rangle$

En la representación de Heisenberg el estado no evoluciona

Representaciones de Schrödinger y de Heisenberg

Para q las predicciones físicas no cambien debemos transformar los operadores.

Aplicamos la forma gral de transformaciones unitarias: $\left(|\tilde{\varphi}\rangle = \mathcal{U}|\varphi\rangle, \quad \tilde{A} = \mathcal{U} A \mathcal{U}^{+} \right)$

$$A_H(t) = U^{+}(t,t_0)\, A_S(t)\, U(t,t_0)$$

En la representación de Heisenberg evolucionan los operadores

Resumen de la Clase 10

En esta clase vimos:

- Estados estacionarios
- Constantes de movimiento
- Operadores unitarios
- Operador evolución
- Representaciones de Schrödinger y de Heisenberg