

# 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

## Medición de observables compatibles

El resultado es el mismo:

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

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

Conservación de la norma del estado durante la evolución:

E.S.D.T.  $\longrightarrow$

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 0$$

Evolución unitaria: se conserva la norma del estado

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

Evolución temporal del valor medio de un operador:

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

Teorema de Ehrenfest:

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

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

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

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

Evolución de un estado general:

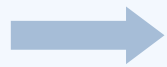
$$|\psi(t)\rangle = \sum_{ni} c_{ni}(t_0) e^{-i E_n (t-t_0)/\hbar} |\varphi_{ni}\rangle$$

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

Seguimos con sistemas conservativos

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

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



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


Estados estacionarios

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

$$\Rightarrow |\psi(t_0)\rangle = \sum_i c_{ni}(t_0) |\varphi_{ni}\rangle$$

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

Evolución de un estado estacionario:


$$|\psi(t)\rangle = \sum_i c_{ni}(t_0) e^{-i E_n(t-t_0)/\hbar} |\varphi_{ni}\rangle$$

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

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

El estado no varía en el tiempo

Constantes de movimientoSea obs.  $A$  tq:  $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$ 

$$[A, H] = 0$$

## Propiedades de las constantes de movimiento

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

$\forall \text{ estado}$



$$[A, H] = 0$$

$$\frac{\partial A}{\partial t} = 0$$

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

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

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

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

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

La probabilidad de medir  $a_p$  a tiempo  $t$  es:

$$\mathcal{P}(a_p, t) = \sum_{ni} |c_{npi}(t)|^2 = \sum_{ni} |c_{npi}(t_0)|^2 \quad //$$

indep. de  $t$

$$[A, H] = 0$$

$$\frac{\partial A}{\partial t} = 0$$

(3) Buen número cuántico

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

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

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.

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

Sea un obs.  $B$  cualquiera.

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

$$\langle \psi(t) | B | \psi(t) \rangle = \sum_{n_i} \sum_{m_j} c_{m_j}^*(t_0) c_{n_i}(t_0) \langle \varphi_{m_j} | B | \varphi_{n_i} \rangle e^{i(E_m - E_n)t/\hbar}$$

$$\omega_{mn} \equiv \frac{E_m - E_n}{\hbar} \quad \text{frecuencias de Bohr}$$

Notar:  $\omega_{mn}$  son independientes de  $B$ , solo dependen del Hamiltoniano.

$B$  aparece en los "pesos" dados por  $\langle \varphi_{m_j} | B | \varphi_{n_i} \rangle$ .

Regla de selección

Si  $\langle \varphi_{m_j} | B | \varphi_{n_i} \rangle = 0 \Rightarrow \omega_{mn}$  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  $U^{-1} = U^\dagger$

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

Teo:  $U$  conserva el producto escalar:

Sean  $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in E$ . 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:

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

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

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

$$= \sum_n \frac{(-iA)^n}{n!} = e^{-iA} \rightarrow T^\dagger T = e^{-iA} e^{iA} = \mathbb{1}$$
$$T T^\dagger = e^{iA} e^{-iA} = \mathbb{1}$$

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

(3)  $U$  es unitario  $\Leftrightarrow U$  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:

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

## Propiedades

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

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

$$\begin{aligned}\Rightarrow \langle \tilde{v}_i | \tilde{A} | \tilde{v}_j \rangle &= \langle v_i | U^\dagger U A U^\dagger U | v_j \rangle \\ &= \langle v_i | A | v_j \rangle\end{aligned}$$

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 /  $A|\alpha_n\rangle = \alpha_n|\alpha_n\rangle$

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

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

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

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

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

## Operador unitario infinitesimal

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

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

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-hermitico

Operador unitario infinitesimal

$$U(\epsilon) = \mathbf{1} + \epsilon G + \dots$$

$$\left. \begin{array}{l} G^\dagger = -G \\ \text{Definimos el operador: } F = iG \end{array} \right\} \longrightarrow F - F^\dagger = 0 \quad \text{F es hermítico}$$

$$\longrightarrow \boxed{U(\epsilon) = \mathbb{1} - i\epsilon F} \quad \text{con F hermítico}$$

# Operador de evolución

## Operador de evolución

Como ESDT es lineal, podremos escribir:

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

Propiedades

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

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

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

Caso conservativo  $H \neq H(t)$

La ecuación diferencial:

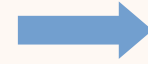
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H U(t, t_0)$$

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

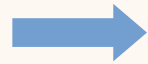
# Operador evolución

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

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



$$U(t, t'') = U(t, t') U(t', t'')$$

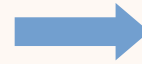


$$U(t_n, t_1) = U(t_n, t_{n-1}) \dots U(t_3, t_2) U(t_2, t_1)$$

Usando lo anterior:

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

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



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



# Operador evolución

## Operador evolución infinitesimal

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

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

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

$$\underbrace{\hspace{10em}}_{U(t+dt, t)}$$

# Operador evolución

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

$$\underbrace{\hspace{10em}}_{U(t+dt, t)}$$

Como  $H(t)$  es hermítico  $\longrightarrow$   $U(t+dt, t)$  es unitario

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

$\longrightarrow$   $U(t, t_0)$  es unitario

$$\longrightarrow U^\dagger(t, t') = U^{-1}(t, t') = U(t', t)$$

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

## Representaciones de Schrödinger y de Heisenberg

# Representaciones de Schrödinger y de Heisenberg

(Complemento G<sub>III</sub>)

Representaciones de Schrödinger y Heisenberg

Con la ESDT y las reglas de cuantización

(para definir observables) introducimos

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:

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

## 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

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

Aplicamos la forma gral de transformaciones unitarias:  $( |\tilde{\psi}\rangle = U|\psi\rangle, \tilde{A} = U A U^\dagger )$

$$A_H(t) = U^\dagger(t, t_0) A_S(t) U(t, t_0)$$

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