Clase 9 - Martes 14/09/2021

La clase pasada vimos:

- Representaciones |**r**> y |**p**>

En esta clase veremos:

- 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

REPASO

$$\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \longleftrightarrow |\vec{r}_0\rangle$$

$$v_{\vec{p}_0}(\vec{r}) \longleftrightarrow |\vec{p}_0\rangle$$

$$\boxed{\langle \vec{r} | \psi \rangle = \psi(\vec{r})}$$

$$\boxed{\langle \vec{p} | \psi \rangle = \bar{\psi}(\vec{p})}$$

$$\langle \vec{r} | X | \psi \rangle = x \langle \vec{r} | \psi \rangle$$

$$\langle \vec{r} | Y | \psi \rangle = y \langle \vec{r} | \psi \rangle$$

$$\langle r | Z | \psi \rangle = z \langle \vec{r} | \psi \rangle$$

Se define $\vec{P}$ por su acción en la representación $\{|\vec{p}\rangle\}$:

$$\langle \vec{p} | P_x | \psi \rangle = p_x \langle \vec{p} | \psi \rangle = p_x \bar{\psi}(\vec{p})$$

$$\langle \vec{p} | P_y | \psi \rangle = p_y \langle \vec{p} | \psi \rangle = p_y \bar{\psi}(\vec{p})$$

$$\langle \vec{p} | P_z | \psi \rangle = p_z \langle \vec{p} | \psi \rangle = p_z \bar{\psi}(\vec{p})$$

O sea, en la representación $\{|\vec{r}\rangle\}$:

$$\vec{P} \longrightarrow \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$$

Elemento de matriz de $\hat{P}_x$ calculado usando $\{|\vec{r}\rangle\}$

$$\langle\varphi|P_x|\psi\rangle = \int d^3r \, \langle\varphi|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|P|\psi\rangle$$

$$= \int d^3r \, \varphi^*(\vec{r}) \, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \, \psi(\vec{r})$$

Relaciones Canónicas de conmutación:

$$[R_i, R_j] = 0$$

$$[P_i, P_j] = 0$$

$$[R_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij} \qquad i,j = 1,2,3$$

Hermiticidad de R_i y P_i

$$\langle\varphi|x|\psi\rangle = \int d^3r \, \varphi^*(\vec{r}) \, x \, \psi(\vec{r})$$

$$= \left[\int d^3r \, \psi^*(\vec{r}) \, x \, \varphi(\vec{r})\right]^*$$

$$= \langle\psi|x|\varphi\rangle^* \qquad ///$$

$\vec{R}$ y $\vec{P}$ son observables

$$\left.\begin{array}{l}\text{Como } \{|\vec{r}\rangle\} \text{ y } \{|\vec{p}\rangle\} \text{ son bases} \\ \vec{R} \text{ y } \vec{P} \text{ son hermíticos}\end{array}\right\} \Rightarrow \vec{R} \text{ y } \vec{P} \text{ son observabl}$$

$$\left.\begin{array}{l}\{X, Y, Z\} \\ \{P_x, P_y, P_z\}\end{array}\right\} \text{ son C.C.O.C. de } \mathcal{E}_{\vec{r}}$$

Habíamos introducido los espacios de estados:

$$\psi(x) \longrightarrow |\psi\rangle \in \mathcal{E}_x \qquad\qquad \psi(\mathbf{r}) \longrightarrow |\psi\rangle \in \mathcal{E}_{\mathbf{r}}$$

¿Qué relación hay entre ambos espacios?

$$\mathcal{E}_{\mathbf{r}} = \mathcal{E}_x \otimes \mathcal{E}_y \otimes \mathcal{E}_z$$

Producto tensorial o
producto de Kronecker

Más adelante trabajaremos con el espacio de estados:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\mathbf{r}} \otimes \mathcal{E}_s$$

Dos sistemas cuánticos que se juntan y forman uno:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$$

entanglement = entrelazamiento

Compatibilidad de observables

Compatibilidad de observables

Sean A, B, $[A, B] = 0$

$\Rightarrow$ existe una base de autoestados comunes $\{ |a_n, b_p, i\rangle \}$

$$A\,|a_n b_p i\rangle = a_n\,|a_n b_p i\rangle$$
$$B\,|a_n b_p i\rangle = b_p\,|a_n b_p i\rangle$$

Quiere decir que preparando el sistema en alguno de los estados $|a_n b_p i\rangle$ $(i = 1, \dots, g_{np})$ es posible medir A y B y obtener con certeza a_n y b_p.

En otras palabras, podemos preparar el estado del sistema de modo que tenga bien definidos A y B.

$\rightarrow$ A y B son observables compatibles.

Medición de observables compatibles

Sea estado $|\psi\rangle$. ~~Es~~ Podemos escribir:

$$|\psi\rangle = \sum_{n,p,i} |a_n b_p i\rangle\langle a_n b_p i|\psi\rangle$$

$$= \sum_{npi} c_{npi} |a_n b_p i\rangle$$

Medir A e inmediatamente B

B " " A

El resultado es el mismo:

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

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

Midiendo primero A y después B

$$|\psi\rangle = \sum_{n,p,i} c_{n,p,i} \, | a_n, b_p, i \rangle$$

$$\mathscr{P}(a_n) = \sum_{p,i} |c_{n,p,i}|^2$$

$$|\psi'_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_{p,i} |c_{n,p,i}|^2}} \sum_{p,i} c_{n,p,i} \, | a_n, b_p, i \rangle$$

$$\mathscr{P}_{a_n}(b_p) = \frac{1}{\sum_{p,i} |c_{n,p,i}|^2} \sum_{i} |c_{n,p,i}|^2$$

$$\mathscr{P}(a_n, b_p) = \mathscr{P}(a_n) \times \mathscr{P}_{a_n}(b_p)$$

$$\mathscr{P}(a_n, b_p) = \sum_{i} |c_{n,p,i}|^2$$

$$|\psi''_{n,p}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_{i} |c_{n,p,i}|^2}} \sum_{i} c_{n,p,i} \, | a_n, b_p, i \rangle$$

Midiendo primero B y después A

$$\mathscr{P}(b_p, a_n) = \mathscr{P}(b_p) \times \mathscr{P}_{b_p}(a_n)$$

$$\mathscr{P}(b_p, a_n) = \sum_{i} |c_{n,p,i}|^2$$

Medición de observables compatibles

$\Rightarrow$ Podemos hablar de una medición simultánea de A y B (porque son compatibles $\Leftrightarrow$ conmutan).

$\rightarrow$ extensión o generalización de 4to y 5to postulados.

Cuidado! si $[A, B] \neq 0$

el orden de la medición importa: influye sobre las probabilidades y sobre el estado final.

Preparación de un estado

Si mido un CCOC y obtengo los autovalores

$a_n, b_p, c_r, \ldots$

entonces sé con certeza que el estado después de la medición es el ket

$$|a_n\, b_p\, c_r \ldots\rangle$$

Esto es análogo al uso de polarizadores en óptica.

La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo: dinámica cuántica

<u>Sexto postulado</u>: Evolución temporal $|\psi(t)\rangle$

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H(t)\,|\psi(t)\rangle$$ E.S.D.T.

donde $H(t)$ es el operador asociado a la energía total.

Tomando complejo conjugado: $\Rightarrow -i\hbar \frac{d}{dt}\langle\psi(t)| = \langle\psi(t)|\,H(t)$

- ESDT es lineal y homogénea $\rightarrow$ ppio. de superposición

si $|\psi_1(t)\rangle$ y $|\psi_2(t)\rangle$ son solución $\Rightarrow \lambda_1|\psi_1(t)\rangle + \lambda_2|\psi_2(t)\rangle$ también

Conservación de la norma del estado durante la evolución:

E.S.D.T. $\longrightarrow$ $$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 0$$

Demostración:

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \left[\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right]|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\left[\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle\right]$$

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)| = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|H^{\dagger}(t) = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|H(t)$$

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}H(t)|\psi(t)\rangle$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|H(t)|\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|H(t)|\psi(t)\rangle = 0$$

Conservación de la norma del estado durante la evolución:

E.S.D.T. $\longrightarrow$ $$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 0$$

$$\langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle = \int d^3r\,|\psi(\mathbf{r},t_0)|^2 = 1$$

$$\Longrightarrow \quad \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \int d^3r\,|\psi(\mathbf{r},t)|^2 = \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle = 1$$

Conservación de la densidad de probabilidad:

- Conservación de la densidad de probabilidad

$$\rho(\vec{r},t) = |\Psi(\vec{r},t)|^2 \qquad dP(\vec{r},t) = \rho(\vec{r},t)\, d^3r$$

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

con $\vec{J}(\vec{r},t) = \dfrac{\hbar}{2mi}\left(\Psi^*\vec{\nabla}\Psi - \Psi\nabla\Psi^*\right) = \dfrac{1}{m}\,\mathrm{Re}\left[\Psi^*\left(\dfrac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\Psi\right)\right]$

- Valor medio de un observable

$$\langle A \rangle (t) = \langle \psi(t) | A(t) | \psi(t) \rangle$$

$A(t)$ puede tener una dependencia temporal explícita
(p. ej. el Hamilt. con campos externos dep. de t)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \psi(t) | A(t) | \psi(t) \rangle = \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \psi(t) | \right] A(t) | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | A(t) \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} | \psi(t) \rangle \right] + \langle \psi(t) | \frac{\partial A}{\partial t} | \psi(t) \rangle$$

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

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

Teorema de Ehrenfest

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

Si $A = \vec{R}$ y $\vec{P}$ ⇒ teorema de Ehrenfest ⇒ análogo cuántico de la ley de Newton $\frac{d\langle \vec{R} \rangle}{dt} = \frac{1}{m}\langle \vec{P} \rangle$, $\frac{d}{dt}\langle \vec{P} \rangle = -\langle \vec{\nabla} V(\vec{R}) \rangle$

Teorema de Ehrenfest

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

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R})$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \mathbf{R} \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\mathbf{R}, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle \left[\mathbf{R}, \frac{\mathbf{P}^2}{2m}\right] \rangle$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \mathbf{P} \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\mathbf{P}, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\mathbf{P}, V(\mathbf{R})] \rangle$$

$$[R_i, R_j] = [P_i, P_j] = 0$$
$$[R_i, P_j] = i\hbar\,\delta_{ij}$$

$$[P, G(X)] = -\,i\hbar\,G'(X)$$

Complement B_{II}

REVIEW OF SOME USEFUL PROPERTIES OF LINEAR OPERATORS

$$\left[\mathbf{R}, \frac{\mathbf{P}^2}{2m}\right] = \frac{i\hbar}{m}\mathbf{P}$$

$$[\mathbf{P}, V(\mathbf{R})] = -\,i\hbar\,\nabla V(\mathbf{R})$$

Teorema de Ehrenfest

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \mathbf{R} \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\mathbf{R}, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle \left[\mathbf{R}, \frac{\mathbf{P}^2}{2m}\right] \right\rangle$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \mathbf{P} \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\mathbf{P}, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\mathbf{P}, V(\mathbf{R})] \rangle$$

$$\left[\mathbf{R}, \frac{\mathbf{P}^2}{2m}\right] = \frac{i\hbar}{m}\mathbf{P}$$

$$[\mathbf{P}, V(\mathbf{R})] = -i\hbar\nabla V(\mathbf{R})$$

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

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

Sistemas conservativos

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

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

Autoestados y autovalores de H

Evolución de un estado general

Expandimos para todo tiempo el estado del sistema en la base de autoestados de H:

$$|\psi(t)\rangle = \left(\sum_{ni} |\varphi_{ni}\rangle\langle\varphi_{ni}|\right)|\psi(t)\rangle$$

$$= \sum_{ni} |\varphi_{ni}\rangle\langle\varphi_{ni}|\psi(t)\rangle \quad = \sum_{ni} c_{ni}(t)\,|\varphi_{ni}\rangle$$

$$\hookrightarrow \langle\varphi_{ni}|\psi(t)\rangle$$

Evolución de un estado general

La evolución del estado está dada por: ESDT : $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle$

Proyectar sobre $\langle \varphi_{ni}|$: $i\hbar \frac{d}{dt} \langle \varphi_{ni}|\psi(t)\rangle = \underbrace{\langle \varphi_{ni}| H}_{E_n \langle \varphi_{ni}|} |\psi(t)\rangle$

$$\Rightarrow \; i\hbar \frac{d}{dt} C_{ni}(t) = E_n \, C_{ni}(t)$$

$$\Rightarrow \; C_{ni}(t) = C_{ni}(t_0) \, e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}$$

$$\Rightarrow \boxed{\left[\; |\psi(t)\rangle = \sum_{ni} C_{ni}(t_0) \, e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \, |\varphi_{ni}\rangle \; \right]}$$

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

Ejemplo

Sea un **oscilador armónico** con Hamiltoniano: $H = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \dfrac{1}{2}m\omega^2 x^2$

Las autoenergías de H son: $E_n = \hbar\omega\left(n + \dfrac{1}{2}\right)$

En este caso no hay degeneración, así que el estado evoluciona como: $(t_0 = 0)$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(0)\, e^{-iE_n t/\hbar}\, |\varphi_n\rangle = e^{-i\omega t/2} \sum_n c_n(0)\, e^{-in\omega t}\, |\varphi_n\rangle$$

Supongamos que a t=0 el estado está dado por:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n(0)\, |\varphi_n\rangle = c_0\, |\varphi_0\rangle + c_2\, |\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_2\rangle \qquad (|c_0|^2 + |c_2|^2 = 1)$$

$$\Rightarrow \quad |\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\varphi_0\rangle + e^{-2i\omega t}|\varphi_2\rangle\right)$$

Ejemplo

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\varphi_0\rangle + e^{-2i\omega t}|\varphi_2\rangle\right)$$

Supongamos que se mide la energía al tiempo t.

¿Cuál es la probabilidad de obtener E_0 ?

¿Cuál es la probabilidad de obtener E_2 ?

¿Cuál es la probabilidad de obtener E_3 ?

Resumen de la Clase 9

En esta clase 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