# Postulados de la Mecánica Cuántica

August 29, 2017

# Postulado I

El estado de un sistema mecanocúantico de un sistema de N particulas está completamente especificado por una función de onda $\Psi(q_1, q_2, \dots q_N, t)$. La probabilidad de que una partícula se encuentre al tiempo $t_0$ en un intervalo epacial anchura dq centrada en $\mathrm{q}_0$ esta dada por:

$$|\Psi(q, t_0)|^2 dq.$$

# Requisitos para $\Psi$

La función de onda debe cumplir con los siguientes requisitos:

- Tiene que ser continua
- deber ser unievaluada
- debe ser cuadrado integrable
- debe tender a cero para $\pm\infty$

# Normalización

Condición de normalización:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \, d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 d\tau = 1 \tag{1}$$

# Postulado II

*A todo observable físico le corresponde un operador mecano cuántico lineal y hermítico. El operador puede ser encontrado al hacer los siguientes reemplazos:*

- *Cada coordenada cartesiana $q$ es reemplazada por el operador que multiplica por $q$*
- *Cada componente cartesiano del momento lineal es reemplazado por* $-i\hbar\frac{\partial}{\partial q}$

# Operador energía

- Podemos transformar el Hamiltoniano clásico a un operador mecánico cuántico:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q) \qquad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \hat{V}(x)$$

# Postulado III

¿ Como se relacionan los operadores mecánico cuánticos con las respectivas propiedades del sistema?

*Cada operador mecano cuántico B tiene su propio set de funciones propias* $g_i$ *y valores propios* $b_i$ *tal que:*

$$\hat{B}f_i = b_i f_i \tag{2}$$

Los únicos posibles resultados de la medición de la propiedad B es uno de los valores propios $b_i$

# Postulado IV

*Si $\hat{B}$ es un operador Hermítico lineal que representa un observable físico, entonces las funciones propias de $g_i$ de $\hat{B}$ forman un conjunto completo*

Es posible expandir la función de onda como una superposición de funciones propias ortonormales de cualquier operador mecano-cuántico.

$$\Psi = \sum_i c_i g_i \tag{3}$$

# Postulado V

Si el sistema esta en un estado descrito por la función de onda $\Psi(x)$, y se mide el valor del observable B una vez en cada uno de los sistemas preparados idénticamente, el valor medio (valor esperado) de todas esas medidas viene dado por:

$$< B >= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x)\hat{B}\Psi(x)}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x)\Psi(x)} \tag{4}$$

# Postulado VI

*Podemos encontrar una función de estado mecano-cuántica al resolver la ecuación de la onda:*

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(x,t) \tag{5}$$

Cuando el Hamiltoniano es independiente del tiempo, podemos encontrar estados de energía definida al solucionar:

$$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x) \tag{6}$$

# Momento Angular en la física clásica

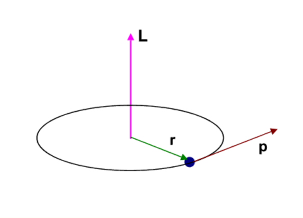
$$\mathbf{r} = (x, y, z)$$

$$\mathbf{v} = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial z})$$

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times m \times \mathbf{v}$$

$$\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z)$$

$$\begin{aligned} L_x &= yp_z - zp_y \\ L_y &= zp_x - xp_z \\ L_z &= xp_y - yp_x \end{aligned}$$



# Momento Angular en la física clásica

Mecánica clásica

$$\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z)$$

$$\begin{aligned} L_x =& y p_z - z p_y \\ L_y =& z p_x - x p_z \\ L_z =& x p_y - y p_x \end{aligned}$$

Mecánica cuántica

$$\begin{aligned} \hat{L_x} =& -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) \\ \hat{L_y} =& -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) \\ \hat{L_z} =& -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \end{aligned}$$

$$\hat{L}^2 = |L|^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \qquad (7)$$

# Comutador de operadores

Se puede demostrar que si dos operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$ conmutan, poseen un set de funciones propias $\psi_n$ tal que:

$$\hat{A}\psi_n = \hat{a}\psi_n$$
$$\hat{B}\psi_n = \hat{b}\psi_n$$

Si es posible encontrar $\psi$, se puede determinar la propiedad física (observable) asociada a $\hat{A}$ y $\hat{B}$ con EXACTITUD.

# Conmutadores del momento angular

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$$
$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y$$
$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x$$

No conumtan :( ...Pero ...

$$[L^2, L_y] = 0$$
$$[L^2, L_x] = 0$$
$$[L^2, L_z] = 0$$

Yay!! :)

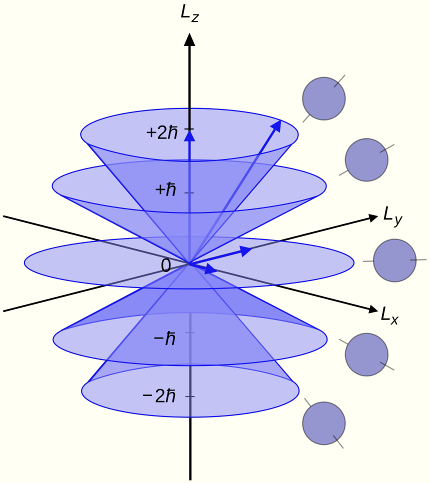
# Momento angular en MC

Es posible encontrar un set de funciones propias para $\hat{L}^2$ y $\hat{L}_z$, y determinar su valor de manera exacta!!

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 Y_l^m(\theta,\phi) =& l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta,\phi) \qquad && l = 0, 1, 2, \dots \\ \hat{L}_z Y_l^m(\theta,\phi) =& m\hbar Y_l^m(\theta,\phi) \qquad && m = -l, -l+1, \dots 0, \dots l-1, l \end{aligned}$$

$$Y_l^m(\theta,\phi) = T_m(\phi) S_{l,m}(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} sen^{|m|}(\theta) \sum_{j=1,3,5..}^{l-|m|} a_j cos^j(\theta)$$

# Momento angular en MC



# Problema de fuerza central

Fuerza central $\longrightarrow$ Potencial esféricamente simétrico
El Hamiltioniano $\hat{H}$ en coordenadas esféricas es:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

$$\hat{H} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2\hbar}\hat{L}^2 + V(\mathbf{r})$$

¿ Conmuta con $\hat{L}^2$ y $\hat{L}_z$ ?

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$$

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$$

# Funciones propias de $\hat{\mathrm{H}}$

Existe un set de funciones propias que son SIMULTANEAMENTE funciones propias de $\hat{H}$, $\hat{L^2}$, $\hat{L_z}$

$$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta,\phi) \tag{8}$$

$$\hat{H}\psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi) = E\psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi) \tag{9}$$

$$-\frac{\hbar}{2m}(R'' + \frac{1}{r}R') + \frac{l(l+1)\hbar}{2mr^2}R + V(r)R = ER \tag{10}$$

# Funciones Radiales y Harmómicos esfé ricos

$$R_{10} = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-Zr/a_0}$$

$$R_{21} = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$$

$$R_{20} = 2\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$$

**l = 0**

$$Y_0^0(\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{\pi}}$$

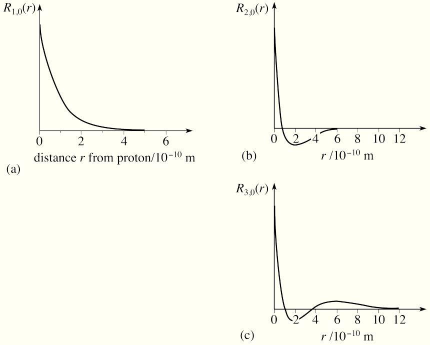
**l = 1**

$$Y_1^{-1}(\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\cdot e^{-i\varphi}\cdot\sin\theta = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\cdot\frac{(x-iy)}{r}$$

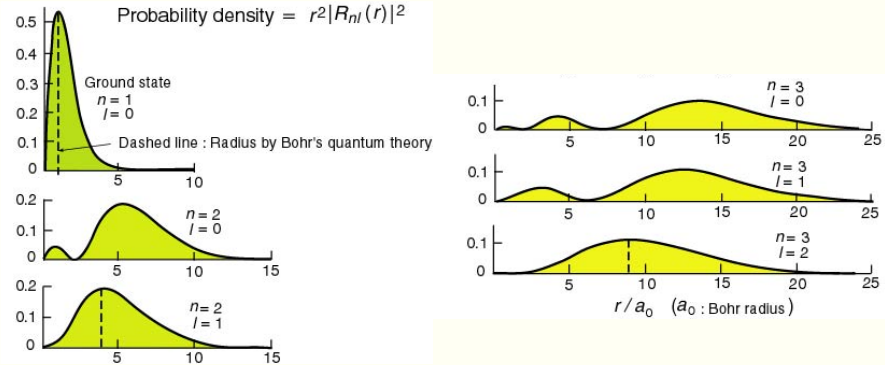
$$Y_1^{0}(\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cdot\cos\theta = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cdot\frac{z}{r}$$

$$Y_1^{1}(\theta,\varphi) = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\cdot e^{i\varphi}\cdot\sin\theta = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\cdot\frac{(x+iy)}{r}$$

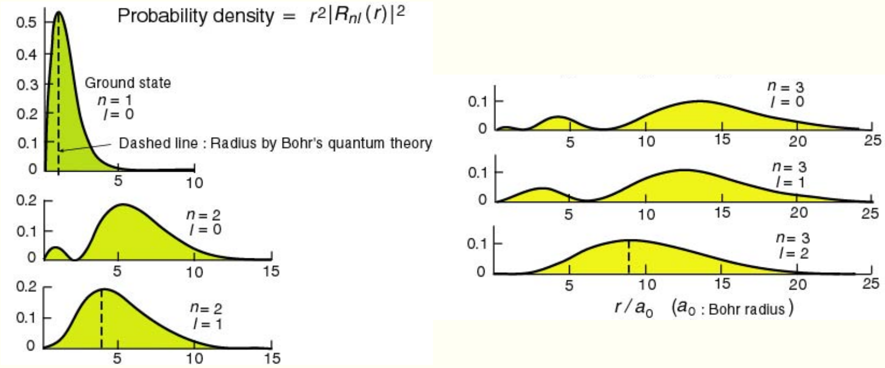
# Estados ligados



# Probilidad de distribución radial



# La cuspide electron-núcleo



# Espin electronico

- El electron tiene un momento angular intrínsico, aparte del momento angular debido a su movimiento alrededor del núcleo.
- En mecánica cuántica relativista el espín surge naturalmente, en mecánica cuántica no relativista, de debe introducir como una hipótesis.
- Como el espín no tiene análogo clásico no se puede construir usando el postulado III de la mecánica cuántica.
- Analogo a los operadores de momento angular $L^2$, $L_x$,$L_y$,$L_z$, se construyen operadores de momento angular de espín, $S^2$, $S_x$, $S_y$, $S_z$, linales y hermíticos.

# Agregando un electron: El átomo de Helio