Clase 3

Manuel Garcia.

February 15, 2024

1 Fundamentos desde la perspectiva cuántica

Mecánica cuántica para una partícula sin grado de libertad interno . Sobre la particula pede estár actuando una fuerza $\vec{F}$, que se considera conservativa, por lo que está descrita en términos de una energía potencial o potencial V.

El sistema está descrito por el operador hamiltoniano de una particula $\hat{H}^{(1)}$, que se construye con $\vec{r}$ y $\vec{p}$. Operadores posicion $\hat{r} = \hat{\vec{r}}$ y momento $\hat{p} = \hat{\vec{p}}$. y satisfacen las ecuaciones de valore spropios

$$\hat{r}\,|\vec{r}\rangle = \vec{r}\,\big|\vec{t}\big\rangle$$
$$\hat{p}\,|\vec{p}\rangle = \vec{p}\,|\vec{p}\rangle$$

donde $|\vec{r}\rangle$ y $|\vec{p}\rangle$ representan los estod propios.

Completez

$$\int d\vec{r}\,|\vec{r}\rangle\,\langle\vec{r}| = \int d^3r\,|\vec{r}\rangle\,\langle\vec{r}| = \hat{1} \int d\vec{p}\,|\vec{p}\rangle\,\langle\vec{p}| = \int d^3p\,|\vec{p}\rangle\,\langle\vec{p}| = \hat{1}$$

Ortogonalidad

$$...$$

El hamiltoniano de una particula

$$\hat{H}^{(1)} = \hat{T}(\hat{p}) + \hat{V}(\hat{r})$$

Con

$$\hat{T}(\hat{p}) = \frac{\hat{p}}{2m}$$

Ecuacion de valores propios hamiltoniano

$$\hat{H}^{(1)}\,|\psi_i\rangle = \epsilon_i\,|\psi_i\rangle$$

Donde $|\psi_i\rangle$ representa los estados cuanticos del sistema de una partícula, los cuales son rotulados mediante el número cuántico i, mientras que ϵ_i representa el nuvel de energia del sistema de una partícula cuando se encuentra en el estado cuántico rotulado por i.

La ecuacion de valores propios se puede solucionar analíticamente y de forma exacta, por lo que se pueden conocer los estados propios $\{|\psi_i\rangle\}$ y los respectivos niveles de energia $\{\epsilon_i\}$. $\{|\psi_i\rangle\}$ forman una base completa ortonormal la cual es la base del espacio de hilbert asociado.

En representación de coordenadas, los estados $|\psi_i\rangle$ están descritor por funciones de onda de probabilidad $\psi_i(\vec{r})$,

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

La representación en coordenadas de la ecuacion de valores propios

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2_{\vec{r}} + V(\vec{r})\right]\psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i\psi_i(\vec{r})$$

los estados propios son ortogonales

$$\langle\psi_{i'}|\psi_i\rangle = \delta_{i'\ i}$$

Y su completez

$$\sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \hat{1}$$

$\left|\psi_i(\vec{t})\right|^2 d\vec{r}$ representa la probabilidad de que la partícula sea encontrada en el intervalo $(\vec{r}, \vec{r} + d\vec{r})$.

Para el caso cuando el sistema se encuentra en el estado rotulado por m se escribe como

$$<\epsilon>_m = \langle\psi_m|\hat{H}^{(1)}|\psi_m\rangle = \langle\psi_m|\epsilon_m|\psi_m\rangle = \epsilon\langle\psi_m|\psi_m\rangle = \epsilon_m$$

De igual forma

$$<\vec{r}>_m = \langle\psi_m|\hat{r}|\psi_m\rangle = \int \psi^*_m(\vec{r})\vec{r}\psi_m(\vec{r})d\vec{r}$$
$$<\vec{p}>_m = \langle\psi_m|\hat{p}|\psi_m\rangle = \int \psi^*_m(\vec{p})\vec{p}\psi_m(\vec{p})d\vec{p}$$

Particula libre en pozo infinito d epotencial lineal Entre 0 y a el potencial es $V(x) = 0$ con hamiltoniano

$$\hat{H}^{(1)} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m}$$

En los puntos 0 y a existen barreras infinitas de potencial. La ecuacion de valores propios es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_i(x)}{ddx^2} = \epsilon_i\psi_i(x)$$

Esta se puede solucionar analiticamente. El espectro de nergía queda determinado por

$$\epsilon_i = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \qquad \text{Con } i = 1, 2, 3, ...$$

Y los estados cuánticosnormalizados están representador por las funciones de onda de probabilidad

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

Pozo infinito d epotencial cuadrado La particula está retringida a moverse sobre el cuadrado entre $(0, a)$ en xy. La ecuacion de valores propios

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dy^2}\right]\psi_{i_x,i_y} = \epsilon_{i_x,i_y}(x, y)$$

Dentro de un cubo

$$\hat{H}^{(1)} = \hat{H}^{(1)}_x + \hat{H}^{(1)}_y + \hat{H}^{(1)}_z = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}$$

Con niveles de energia

$$\epsilon_{i_x,i_y,i_z} = \epsilon_{i_x} + \epsilon_{i_y} + \epsilon_{i_z} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}[i_x^2 + i_y^2 + i_z^2]$$

Oscilador armonico unidimensional Hamiltoniano

$$\hat{H}^{(1)} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2.$$

Donde k es la constante de leasticidad. Se define la frecuencia natural $\omega^2 = \frac{k}{m}$.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\psi_i(x) = \epsilon_i\psi_i(x)$$

Oscilador armónico isotrópico bidimensional Tenemos $V(x,y) = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}ky^2$ y $\omega_x^2 = \omega_y^2 = \omega^2 = \frac{k}{m}$. Con Hamiltoniano

$$\hat{H}^{(1)} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{y}^2$$

ec. de valores propios

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + ...\right] \text{...(ven en las notas del profesor xd)}$$