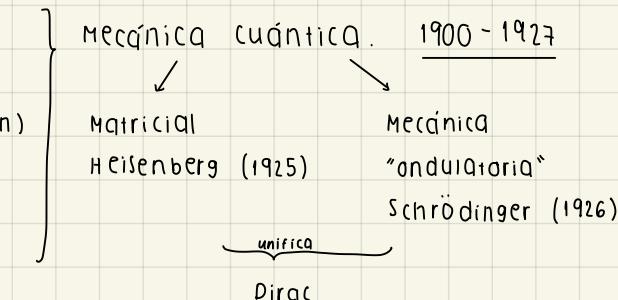


Problemas en la física

→ Relatividad → Mundo microscópico.

Incapacidad de explicar

- └ Radiación de cuerpo negro (espectros de emisión)
- └ Efecto fotoeléctrico
- └ Estabilidad atómica
- └ Espectros observados de diversos elementos.



* EN 25 o 27 se desarrolla la mayoría de la teoría.

Radiación de cuerpo negro

cualquier cuerpo a una dada temp.

radia ondas electromagnéticas → distrib. en

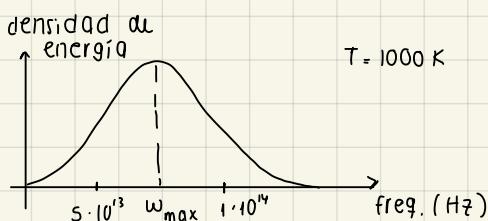
↓ intensidad y frecuencia

El caso más simple es el de un cuerpo idealizado que es un absorbente perfecto y por lo tanto, un emisor perfecto (en base a argumentos termodinámicos). Tal cuerpo se llama "cuerpo negro".

¿Cómo construirlo?

Kirchoff (1859): Caja grande con un pequeño hueco.

↓
1890



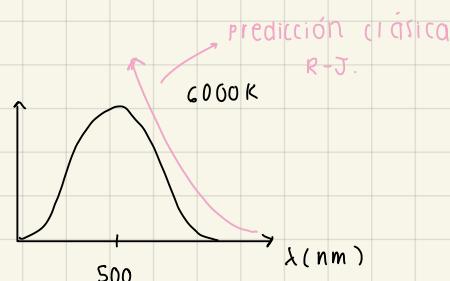
→ Wien & Lummer, Berlin, 1895.

→ Ley de Wien

$$\nu_{\max}(2T) = 2\nu_{\max}(T)$$

$$\nu_{\max} \propto T$$

$$\lambda_{\max} = \frac{2897 \text{ nm}}{T}$$



catastrofe ultravioleta:

· Divergencia entre lo experimental y la predicción para long. de onda pequeña.

Rayleigh - Jeans

$$J = \frac{c}{8\pi} \rho(\omega, T)$$

radiancia. ↓ densidad total de energía.

Intensidad de
energía por unidad
de ángulo sólido.

↓
para calcular $\rho(\omega, T)$

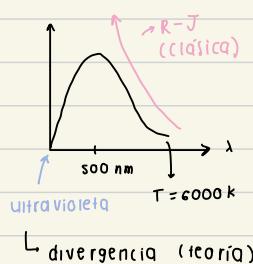
usamos la densidad de modos e-m.

y multiplicado por la energía de cada modo.

→ que de acuerdo a la mecanística
o $\frac{1}{2} k_B T$ por ν grado de libertad.

↓
no mata la divergencia.

intensidad de radiación



Rayleigh - Jeans

$$J = \frac{c}{8\pi} \rho(\omega, T)$$

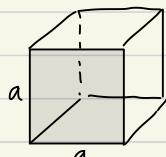
radiancia
(intensidad de energía emitida por unidad de ángulo sólido)

densidad de los modos e-m. \times energía de cada modo.
diverge cuando la longitud de onda es muy pequeña.
(depende de la frecuencia).

$$\frac{1}{2} k_B T \text{ por grado de libertad.}$$

Potencial vector.

cubo de lado $a \leftarrow$



$$\vec{A}(\vec{r}, t)$$

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \vec{A} = 0 \rightarrow \text{obedece eqs. de Maxwell.}$$

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}(\vec{r}) e^{i\omega t}$$

$$\left(\nabla^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \right) \vec{A}(\vec{r}) = (\nabla^2 + k^2) \vec{A}(\vec{r}) = 0$$

$$k = \frac{\omega}{c} \quad \text{Gauge de coulomb} \rightarrow \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$$

$$\vec{A}(\vec{r}) = \vec{A} \sin(\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad o \quad \vec{A}(\vec{r}) = \vec{A} \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}).$$

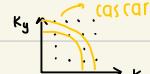
$$\text{con } \vec{A} \cdot \vec{k} = 0$$

onda transversal.

k tales que la onda se anule en la cara correspondiente.

$$k_x = \frac{n_x \pi}{a}$$

$$n_x = 1, 2, 3$$



casco esférico. → cuento cuantos puntos (modos) hay dentro.

$$k_y = \frac{n_y \pi}{a}$$

$$k_z = \frac{n_z \pi}{a}$$

densidad de modos en la cavidad

de modos por unidad de frecuencia

divergencia $\propto \frac{1}{\omega} \quad \omega \rightarrow \infty (\lambda \rightarrow 0)$

$$\frac{dN}{dw}$$

$\propto \omega$ no están equiespaciados, en cambio sí lo están en k

$$\frac{1}{8} \frac{(4\pi k^2 dk) \cdot 2}{\left(\frac{\pi}{a}\right)^3} = \frac{2 \frac{a^3}{2\pi^2} k^2 dk}{\frac{V}{c^2}} = \frac{2 \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{c^2} dw}{\frac{V}{c^3}} = \frac{2 \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{c^3} dw}{dw}$$

otros octantes no son L.

polarización (ω es un vector)

volumen que ocupa 1 modo (ω es una red cúbica)

$$\frac{dN}{dw} = \frac{V}{\pi^2} \frac{\omega^2}{c^3}$$

$\rho_{RL}(\omega, T) = \frac{V\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{1}{2} k_B T$ real: $(n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$.

R-J
 $E = k_B T$ energía media por modo.

Planck
 $E_n = n\hbar\omega$, $n = 0, 1, 2, \dots$ → supongamos espectro discreto.

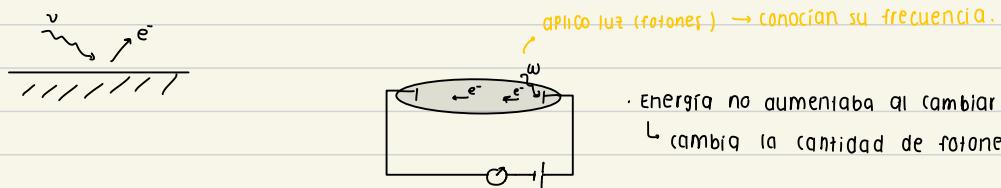
$\bar{E} = \frac{\sum_n E_n e^{-E_n/k_B T}}{\sum_n e^{-E_n/k_B T}}$ es un promedio ponderado.

$= \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}$
si ω es grande, la exp domina (ya no hay divergencia)

Fórmula de Planck (o unifica comportamiento correcto en ambos límites)
 $\rho(\omega, T) = \frac{1}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega^3}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}$ Planck.

$\rho(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \exp(-\hbar\omega/k_B T)$ Ley de Wien. → límite ω grande

Efecto fotoeléctrico:



· Energía no aumentaba al cambiar la intensidad
 ↳ cambia la cantidad de fotones.

Efecto compton:

→ se usaba la conservación de momento.

Wave aspect of particles

Both in the photoelectric effect and in the Compton effect, radiation shows particle-like features.

↓
which also
has a
wave-nature

de Broglie took this further in 1923 suggesting that wave-particle duality must be universal

"all material particles should also display a dual wave-particle behavior"

de Broglie's hypothesis

The wave-particle duality observed for light must also exist for particles.

↓ (for a photon $\lambda = h\nu/c = h/\lambda$)

"Each material particle of momentum \vec{p} behaves as a group of waves (matter waves) whose wavelength λ and wavevector \vec{k} are related by analogy"

de Broglie relation

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{\vec{p}} ; \quad \vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}} \quad (\hbar = \frac{h}{2\pi})$$

↓ connects the momentum with the wavelength of a particle

Experimental confirmation of de Broglie's hypothesis



In 1927 Davisson & Germer
confirmed de Broglie's idea.

(reflection of electrons off a
crystal surface)

Later on, Thomson also confirmed this
↓
diffraction experiment

Since then diffraction patterns have been obtained
for larger and larger objects.



like C₆₀ molecules

Arrott et al. Nature 401, 680 (1999)

Repasso algebra: Kunze & Hoffmann.

$$\int \mathbb{O} dt \underset{\text{definición}}{\equiv} \eta(t)$$

Def 1:

Un espacio vectorial \mathbb{V} es una colección de objetos $|v\rangle, |z\rangle, \dots |w\rangle, \dots |u\rangle$ llamados vectores para los que existe:

- ① Una regla de suma de vectores denotada $|v\rangle + |w\rangle$
- ② La multiplicación por escalares a, b, \dots denotada por $a|v\rangle$ con las sgtes. caract.:

Axiomas ←

- la suma y multiplicación por escalares es otro elemento del espacio (clausura)
- $|v\rangle + |w\rangle \in \mathbb{V}$
- $a|v\rangle \in \mathbb{V}$
- $a(|v\rangle + |w\rangle) = a|v\rangle + a|w\rangle$
- $(a+b)|v\rangle = a|v\rangle + b|v\rangle$
- $a(b|v\rangle) = ab|v\rangle$
- $|v\rangle + |w\rangle = |w\rangle + |v\rangle$
- $|v\rangle + (|w\rangle + |z\rangle) = (|v\rangle + |w\rangle) + |z\rangle$
- $\exists |0\rangle \in \mathbb{V} / |v\rangle + |0\rangle = |v\rangle \quad \forall |v\rangle \in \mathbb{V}$
vector nulo
- $\forall |v\rangle \in \mathbb{V} \exists | -v \rangle / |v\rangle + | -v \rangle = |0\rangle$
inverso aditivo

Def

Los números a, b, \dots se denominan el cuerpo sobre el cual se define el espacio vectorial.

Ejemplos: los reales

los complejos.

Como resultado de los axiomas anteriores:

- * $|0\rangle$ es único.
- * $a|v\rangle = |0\rangle$
- * $| -v \rangle = -|v\rangle$
- * $| -v \rangle$ es el único inverso aditivo de $|v\rangle$.

*(es nota)
-|v\rangle \neq | -v \rangle
por ahora
es único*

<p>a_i escalares.</p> <p>dimension: n° máximo de vectores l.i.</p> <p>* Base no es única ↳ Base no necesariamente ortogonal.</p>	<p><u>Def</u></p> <p>El conjunto de vectores $\{ \mathbf{i}\rangle, \mathbf{j}\rangle, \dots, \mathbf{n}\rangle\}$ se dice l.i. si:</p> $\sum_{i=1}^n a_i \mathbf{i}\rangle = \mathbf{0}\rangle \Leftrightarrow a_i = 0 \quad \forall i$ <p style="color: green;">combinación lineal.</p> <p>Si el conjunto no es l.i. se dice que es l.d.</p> <p><u>Def</u></p> <p>Un espacio vectorial V tiene dimensión n si puede acomodar un máximo de n vectores l.i.</p> $(\dim V = n)$ <p><u>Teorema</u></p> <p>Cualquier vector $\mathbf{v}\rangle$ en un espacio de dimensión n se puede escribir como combinación lineal de n vectores l.i.</p> <p><u>Def</u></p> <p>Un conjunto de n vectores l.i. $\{ \mathbf{i}\rangle\}$ de un espacio vectorial de dimensión n se denomina una base.</p> $(\mathbf{v}\rangle = \sum_{i=1}^n v_i \mathbf{i}\rangle) \quad \textcircled{1}$ <p style="color: green;">escalares.</p> <p><u>Def</u></p> <p>Los coeficientes de la expansión de un vector en una base se denominan <u>componentes</u> del vector en esa base. (o coordenadas)</p> <p><u>Teorema</u></p> <p>Los coef. de la expansión $\textcircled{1}$ son únicos.</p>
---	--

Producto interno

$$\hookrightarrow |v\rangle \rightarrow \langle v|w\rangle$$

$$\hookrightarrow |w\rangle \downarrow \text{que satisface:}$$

$$\cdot \langle v|w\rangle = \langle w|v\rangle^*$$

$$\cdot \langle v|v\rangle \geq 0, \quad 0 \text{ si } |v\rangle = |0\rangle$$

$$\cdot \langle v| (a|w\rangle + b|z\rangle) \equiv \langle v|aw + bz\rangle$$

$= a\langle v|w\rangle + b\langle v|z\rangle$ bilinealidad en el "kei".

nota! (no demostrable)

implica $\langle v|v\rangle$ es real

permite definir la $\sqrt{\langle v|v\rangle}$

longitud del vector.

$$\langle aw + bz|v\rangle = \langle v|aw + bz\rangle^*$$

$$= (a\langle v|w\rangle + b\langle v|z\rangle)^*$$

$$= a^* \langle v|w\rangle^* + b^* \langle v|z\rangle^*$$

$$= a^* \langle w|v\rangle + b^* \langle z|v\rangle$$

antilinealidad del "bra".

(coef. salen conjugados
(no es lineal) en el bra

Def $|v\rangle$ y $|w\rangle$ son ortogonales si $\langle v|w\rangle = 0$

Def $\sqrt{\langle v|v\rangle} \equiv |v|$ es la norma o longitud del vector.

Def

una base ortonormal es una base de vectores de norma uno y que son ortogonales de 2 pares.

$$|v\rangle = \sum_i v_i |i\rangle, \quad \{ |i\rangle \} \text{ base de } \mathbb{V}$$

$$|w\rangle = \sum_j w_j |j\rangle$$

$$\langle v|w\rangle = \sum_i \sum_j v_i^* w_j \underbrace{\langle i|j\rangle}_{\delta_{ij}}$$

trasponer
y conjugar.

revisar! \star
(sale de antilinealidad
y linealidad)

Desarrollo de vectores en una base ortonormal

$\{|i\rangle\}$ base ortonormal.

$$|v\rangle = \sum_i v_i |i\rangle$$

$$\langle j|v\rangle = \sum_i \langle j|v_i|i\rangle = \sum_i v_i \underbrace{\langle j|i\rangle}_{\delta_{ij}} = v_j$$

la componente j -ésima de un vector es el producto interno con el j -ésimo vector unitario.

Operación de autoadjunto

Si $|v\rangle$ es un ket con coordenadas $\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_N \end{bmatrix}$ en una base ortonormal, el "bra"

correspondiente $\langle v|$ tendrá coords. $[v_1^*, v_2^*, \dots v_N^*]$ en la base correspondiente.

Por otra parte:

$$a|v\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} a v_1 \\ a v_2 \\ \vdots \\ a v_N \end{bmatrix}$$

↓

$$[a^* v_1^*, a^* v_2^*, \dots a^* v_N^*] \rightarrow \langle v|a^*$$

relaq 1 q1. ←

Es usual escribir $a|v\rangle$ como $|av\rangle$ y el bra correspondiente (como $\langle av|$)

Notación.

$$\text{Luego } \langle av| = \langle v|a^*$$

$$\text{En general } a|v\rangle = b|w\rangle + c|z\rangle + \dots$$

$$\langle v|a^* = \langle w|b^* + \langle z|c^* + \dots$$

para tomar el adjunto de una ec. lineal basta con reemplazar cada ket por su bra y conjugar los coef.

Clase 14/08

→ Continuación repaso álgebra lineal

Ya empezamos con notación de Dirac

↳ Bra aparecen al momento de definir el producto interno.

Supongamos que tenemos un vector $|v\rangle$ y sea $\{v_i\}$ una base del espacio vectorial

$$|v\rangle = \sum_i v_i |i\rangle$$

¿Qué son v_i ? : la proyección de $|v\rangle$ sobre $|i\rangle$

$$v_i = \langle i | v \rangle = \langle i | \sum_i v_i |i\rangle = v_i \rightarrow \text{Coordenadas o componentes}$$

→ las coordenadas cambian con la base

↳ Esto es una \neq fundamental entre el vector y sus coordenadas

↳ El qto. de coordenadas no define al vector. → por ejemplo, no puede ser $|v\rangle = \sum_i v_i |i\rangle$

↳ No es una igualdad, sino una relación:

$$|v\rangle \longrightarrow \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}$$

Sub-espacio vectorial

Def 1: Dado un espacio vectorial V , un sub-espacio de V es cualquier subconjunto de

demás de V que forman en sí mismos un espacio vectorial.

Libro: vectores y tensores

→ explica diferencia entre vectores y sus componentes

Operadores lineales (objetos que si se ponen delante de un vector, actúan)

Un operador O es una instrucción para transformar un vector $|v\rangle$ en otro.

(creo que en todo lo que

sigue suponemos una base orthonormal)

$$|Ov\rangle = |v'\rangle$$

Si uno se como actúa un vector sobre una base, ya se como actúa para

→ Un operador lineal satisface:

$$O(\alpha |v\rangle) = \alpha O(|v\rangle)$$

$$O(\alpha |v_i\rangle + \beta |v_j\rangle) = \alpha O(|v_i\rangle) + \beta O(|v_j\rangle)$$

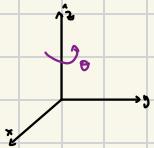
cuálquier vector: $O(|v\rangle) = O\left(\sum_i v_i |i\rangle\right) = \sum_i v_i O(|i\rangle)$

→ Ejemplo: operador identidad

- Es reversible

$$\langle \alpha | = \langle \alpha | I = \langle \alpha | \quad I | \alpha \rangle = \langle \alpha |$$

(*) Rotación en θ alrededor de \hat{z}



$$R_z |\alpha\rangle = \cos(\theta) |\alpha\rangle + (-\sin(\theta)) |\beta\rangle$$

$$R_z |\beta\rangle = \sin(\theta) |\alpha\rangle + \cos(\theta) |\beta\rangle$$

$$R_z |\beta\rangle = |\beta\rangle$$

Encontrar la base canónica de un operador

Lo ideal sería encontrar

una base donde

$$O(v) = v |i\rangle$$

$$O \sum_i v_i |i\rangle = \sum_i v_i O |i\rangle$$

Hecho crucial: Un operador queda totalmente determinado por su acción sobre los elementos de una base.

O podemos definir el producto de estos operadores:

$$O_1 O_2 |v\rangle = O_1 (O_2 |v\rangle) \equiv O_1 |O_2 v\rangle$$

Notación para el ket $O_2 v\rangle$

comutación

• El orden es importante porque en general $O_1 O_2 \neq O_2 O_1$, o, en otros términos, $[O_1, O_2] = O_1 O_2 - O_2 O_1 \neq 0$

• Identidades útiles:

$$[O_1, \lambda O_2] = \lambda [O_1, O_2] + [\lambda, O_2] O_1$$

$$[\lambda O_1, O_2] = \lambda [O_1, O_2] + [\lambda, O_2] O_1$$

• El inverso de un operador O se denota O^{-1} → no todos los operadores tienen inverso → solo los que su efecto es reversible (por ejemplo, la acción de borrar cosas es irreversible).
↳ cuando existe, es único.

$$O \cdot O^{-1} = O^{-1} \cdot O = I$$

• operador identidad

Si $|i\rangle$ son una base y conocemos: $J_i |i\rangle = |i'\rangle$ entonces,

$$J_i v = J_i \sum_i v_i |i\rangle = \sum_i J_i v_i |i\rangle = \sum_i v_i |i'\rangle$$

No todos los operadores tienen una matriz asociada
→ los que tienen dimensión ∞ no cumplen esto.

Como $|i'\rangle$ son conocidos, entonces también conocemos:

$$\langle j | i' \rangle = \langle j | J_i | i \rangle = J_{i,j}$$

resumen la info de J sobre una base

ELEMENTOS DE MATRIZ de J

- Si $\langle \mathbf{v} | \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{v}' | \mathbf{v}' \rangle = \sum_i v_i' v_i$ → El transformado de \mathbf{v} es \mathbf{v}'

$$\langle \mathbf{v}_i | = \langle i | \mathbf{v}' \rangle = \langle i | \mathbf{U} \mathbf{v} \rangle = \langle i | \mathbf{U} \left(\sum_j U_{ij} | j \rangle \right) | \mathbf{v} \rangle = \sum_j \langle i | \mathbf{U} | j \rangle \cdot \underbrace{\langle j | \mathbf{v} \rangle}_{v_j}$$

relación de dualidad
II

El operador II no es necesariamente una matriz unitaria (depende de la base)

$$II | \mathbf{v} \rangle = | \mathbf{v} \rangle \rightarrow \text{pdq}$$

$$\text{sea } | \mathbf{v} \rangle = \sum_i v_i | i \rangle \Rightarrow \sum_j \langle j | \mathbf{v} \rangle \cdot \underbrace{\sum_i U_{ij} | i \rangle}_{II | i \rangle} = \sum_j \sum_i v_i \langle j | i \rangle = v_{ij} = v_i | i \rangle = | \mathbf{v} \rangle \checkmark$$

II | v >

$$\Rightarrow M_{ij}^I = \sum_j U_{ij} v_j$$

✓ forma de matriz de un operador con respecto a una base

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} & \dots & M_{1n} \\ M_{21} & M_{22} & \dots & M_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ M_{n1} & M_{n2} & \dots & M_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix}$$

Operador I:

Elementos de la
↑ matriz.

$$I_{ij} = \langle i | I | j \rangle = \langle i | j \rangle = \delta_{ij}$$

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

El operador no
es = a su
matriz asociada

Siempre tomar en
cuenta las formas
del cuadro ↑ y
derecho sean los
 $=$, ie:
 $\dots | \rangle = \dots | \rangle$
por ejemplo

→ El operador no cambia dr a su base, pero
la forma matricial si.

Operadores de proyección: proyectan sobre una dirección

Consideremos un vector arbitrario $| \mathbf{v} \rangle$

$$| \mathbf{v} \rangle = \left(\sum_{i=1}^n | i \rangle \langle i | \right) | \mathbf{v} \rangle = \left(\sum_{i=1}^n | i \rangle \langle i | \right) | \mathbf{v} \rangle$$

II

Lo pienso como
un operador
↓
Satisface la condición
del operador identidad

$$I = \sum_{i=1}^n |i\rangle \langle i| = \sum_{i=1}^n P_i$$

operador de proyección sobre cada una de las direcciones asociadas a los vectores de la base

$$\rightarrow P_i = |i\rangle \langle i|$$

$$P_i |v\rangle = |i\rangle \langle i| v = |i\rangle v_i \rightarrow \text{Operador lineal que proyecta sobre dirección}$$

$$P_i P_j = |i\rangle \langle i| |j\rangle \langle j| = |i\rangle \delta_{ij} \langle j| = \delta_{ij} P_j$$

$$\rightarrow \text{Si } i=j : P_i^2 = P_i \rightarrow \text{lo que se generaliza a: } P_i^n = P_i$$

¿Elementos de la matriz de P_i ?

$$\text{Forma 1: } P_i = |i\rangle \langle i|$$

$$|i\rangle \xrightarrow{\text{componentes}} \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow i\text{-ésimo}$$

$$\langle i| \rightarrow (0, \dots, 1, \dots)$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} (0, 0, \dots, 1, \dots, 0) \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & \cdots \\ 0 & \ddots & \cdots & \cdots \\ \vdots & & 1 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$

componente k, l

$$[P_i]_{kl} = \langle k| P_i |l\rangle = \langle k| \delta_{il} |l\rangle = \delta_{il} \langle k|l\rangle = \delta_{il} \delta_{kl}$$

$$P_i = |i\rangle \langle i|$$

$$P_i P_j = (|i\rangle \langle i|) (|j\rangle \langle j|)$$

Se puede demostrar que:

- $\sum_{i=1}^n P_i = I \rightsquigarrow \text{operador}$

- $\sum_{i=1}^n P_i^2 = I \rightsquigarrow \text{matriz}$

Matriz correspondiente a la multiplicación de operadores:

$$(\mathcal{A} \Lambda)_{ij} = \langle i | \mathcal{A} \Lambda | j \rangle = \langle i | \mathcal{A} \left(\sum_k \lambda_k | k \rangle \langle k | \right) \Lambda | j \rangle = \sum_k \lambda_k \langle i | \Lambda | j \rangle$$

Adjunto de un operador

Para un dado ket $\alpha|v\rangle \equiv |\alpha v\rangle$

el "bra" correspondiente es:

$$\langle \alpha v | = \langle v | \alpha^* \rightarrow (\text{y no } \langle v | \alpha)$$

De la misma manera, dado un ket.

$$\Omega|v\rangle \equiv |\Omega v\rangle$$

el "bra" corresponde

$$\langle \Omega v | = \langle v | \Omega^* \quad \text{que define el operador } \Omega^* \\ (\text{adjunto de } \Omega, \text{ ó omega daga})$$

→ Si Ω transforma $|v\rangle$ en $|\nu'\rangle$

Ω^* " " $\langle v |$ en $\langle \nu' |$

$$[\Omega^+]_{ij} = \langle i | \Omega^+ | j \rangle \\ = \langle \Omega_i | j \rangle = \langle j | \Omega_i \rangle^* \\ = \langle j | \Omega | i \rangle^*$$

$$\Rightarrow [\Omega^+]_{ij} = ([\Omega_{ji}])^*$$

Prop:

$$(\Omega \Lambda)^+ = \Lambda^+ \Omega^+$$

Op. Hermitianos, Unitarios, ...

mal def. para dim. → def: Un op. Ω es Hermitiano si $\Omega^+ = \Omega$. (autoadjunto)

Def. Un op. Ω es antihermitiano si $\Omega^+ = -\Omega$.

Sea Ω arbitrario:

$$\Omega = \frac{\Omega + \Omega^+}{2} + \frac{\Omega - \Omega^+}{2}$$

↓
es hermitiano

"descomposición de un op. arbitrario en una parte hermitiana y una antihermitiana".

* tomando + de $\frac{\Omega + \Omega^+}{2}$
da $\frac{\Omega + \Omega^+}{2}$

inversa está
siempre bien
definida.

Def un op. U es unitario si $UU^t = I$.
(U y U^t es inverso uno del otro).

Teorema

los operadores unitarios preservan el prod. interno entre los vectores sobre los que actúan.

Prueba:

$$\begin{aligned} \text{sea } |v_1'> &= U|v_1> \quad y \quad |v_2'> = U|v_2> \\ \Rightarrow \langle v_1' | v_2' \rangle &= \underbrace{\langle v_1 | U^t U | v_2 \rangle}_{I} = \langle v_1 | v_2 \rangle \end{aligned}$$

Teorema

* haciendo el prod.
interno entre
columnas da 0.
 \downarrow
están normalizadas
con el factor.

si uno traza las columnas de una matriz unitaria $n \times n$ las componentes de n vectores, estos vectores son ortonormales.

De la misma manera, las filas pueden interpretarse como n vectores ortonormales.

Ej. de matrices unitarias:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1+i & 1-i \\ 1-i & 1+i \end{pmatrix}$$

Transformaciones activas y pasivas:

se aplica U $|v_i> \rightarrow U|v_i>$ (transf. activa)

lo veo como que
los vectores quedan
igual y lo que
cambia es el operador.

$$\begin{aligned} \langle v_2 | \Omega | v_i \rangle &\rightarrow \langle v_2 | U^t \Omega U | v_i \rangle \\ &= \langle v_2 | \Omega | v_i \rangle \quad (\text{transf. pasiva}) \end{aligned}$$

$$\Omega \rightarrow U^t \Omega U$$

no dependen de la
base.

la traza de una matriz es un invariante ante un cambio de base.

El determinante " " " " "

$$x^n + a_1 x^{n-1} + \dots + a_n \rightarrow \text{Polinomio característico}$$

(coef. son invariantes)

Autoralores / Autovectores

En general, al aplicar un op. lineal Σ sobre un ket no nulo $|v\rangle$, tendremos un nuevo ket $|v'\rangle$ que en general no está rel. de manera directa con $|v\rangle$.

$$\Sigma|v\rangle = |v'\rangle.$$

a menos que Σ sea el op. identidad.

Cada op. tiene ciertos kets llamados "autokets" sobre los cuales su acción es simplemente **reescalarlo**.

la acción de Σ
es sólo reescalar el
ket.

$$\Sigma|v\rangle = w|v\rangle \quad \text{esta es la ecuación de autoralores y autovectores.}$$

$|v\rangle$ es un autoket de Σ con autovalor w .

Ej

Op. de proyección sobre la dirección $|v\rangle$

$$\begin{aligned} \textcircled{1} \quad P_v|\alpha v\rangle &= |v\rangle \langle v| \alpha |v\rangle \\ &= \alpha |v\rangle \underbrace{\langle v|v\rangle}_{|v|^2} \\ &= \alpha |v\rangle. \quad = 1 | \alpha v \rangle \rightarrow \text{Autoval 1.} \end{aligned}$$

\textcircled{2} si aplico P_v sobre cualquier vector $\perp |v\rangle$ da 0. \rightarrow Autoval. 0.

son los únicos
autoralores ya
que los demás
son comb. lineal
de ejes.

→ los vectores NO son lo mismo que sus componentes.

$$|v\rangle = \left(\sum_i |i\rangle \langle i| \right) |v\rangle = \sum_i \underbrace{\langle i|v\rangle}_{v_i} |i\rangle = \sum_i v_i |i\rangle$$

→ Si tenemos 2 autovectores, su combinación lineal no tiene q ser autovector.

$$H|\psi_1\rangle = \epsilon_1 |\psi_1\rangle \rightarrow H(c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle) = c_1 \epsilon_1 |\psi_1\rangle + c_2 \epsilon_2 |\psi_2\rangle \neq \square (c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle) \rightarrow q \text{ menos que } \epsilon_1 = \epsilon_2.$$

⇒ El estado estacionario se puede diferenciar de otros ϵ^* 's.

TCO

Los autovalores de un operador Hermitiano son reales.

Dem sea $\Omega|w\rangle = w|w\rangle \Rightarrow \langle w|\Omega|w\rangle = \langle w|w|w\rangle$

$$\Rightarrow \langle w|\Omega|w\rangle = w \langle w|w\rangle$$

Tomando autoadjunto:

$$\langle w|\Omega^\dagger|w\rangle = w^* \langle w|w\rangle$$

→ Como $\Omega = \Omega^\dagger$ por hipótesis:

$$\langle w|\Omega - \Omega^\dagger|w\rangle = (w - w^*) \langle w|w\rangle$$

$$\Rightarrow w = w^* \Rightarrow w \text{ es real}$$

teo

Para todo operador Hermitiano Ω existe una base compuesta por sus autovectores orthonormados.

→ En esta base, el operador es diagonal y sus elementos diagonales son sus autovalores.

Teorema

Si Ω y Λ son 2 operadores Hermitianos t.q. $[\Omega, \Lambda] = \Omega\Lambda - \Lambda\Omega = 0 \Rightarrow$ existe al menos 1 base de autovectores comunes que diagonalizan a ambas.

Tarea · probarlo! ←

Cómo se si le
pueden diagonalizar?

→ Para el caso no degenerado:

$$\Omega|w_i\rangle = w_i|w_i\rangle$$

$$\Lambda\Omega|w_i\rangle = w_i\Lambda|w_i\rangle$$

$$\text{Como } [\Omega, \Lambda] = 0 \Rightarrow \Omega(\Lambda|w_i\rangle) = w_i(\Lambda|w_i\rangle)$$

orden geo: dim. del subespacio generado por autovectores.

orden algebraico:

orden del polinomio característico.

→ Las matrices Hermitianas cumplen que orden lineal = orden algebraico.

Luego, λw_i es un autovector de Ω con autovalor w_i

funciones de operadores

De la misma forma en que definimos funciones de la forma $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$

podemos definir $f(\Omega) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \Omega^n$

↳ la convergencia de esto está garantizada

→ Esto puede verificarse para, por ejemplo, $e^\Omega = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Omega^n}{n!}$

↳ Para ver su convergencia, basta con escribir Ω en una base de autovectores que los diagonaliza.

↳ Esta convergencia está garantizada por la convergencia de los escalares.

→ Basta con comprobar si \exists una base que diagonalice Ω para comprobar que $e^\Omega = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Omega^n}{n!}$ converge. → Luego puedo trabajar en cualquier otra base.

↳ pq si M es diagonal $\Rightarrow M^n = \begin{pmatrix} m_1^n & & & \\ & m_2^n & & 0 \\ & & \ddots & \\ 0 & & & m_n^n \end{pmatrix}$

$$\Rightarrow \left[e^\Omega \right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \begin{pmatrix} w_1 & w_2 & 0 \\ 0 & \ddots & w_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum \frac{1}{n!} w_1^n & & \\ & \sum \frac{1}{n!} w_2^n & \\ & & \sum \frac{1}{n!} w_n^n \end{pmatrix}$$

↳ Convergencia siempre está garantizada para operadores hermitianos.

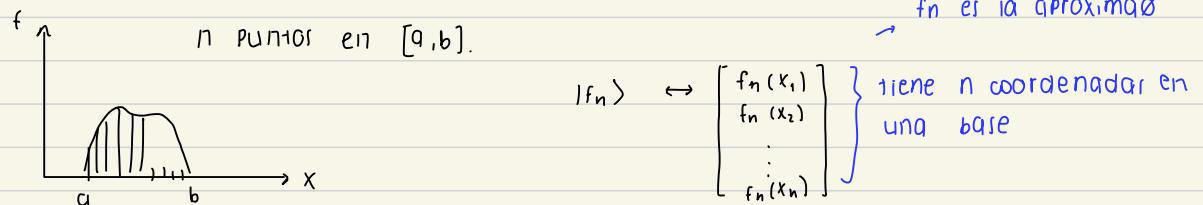
└ Hasta ahora consideramos cosas de dimensión finita.

ESPAZIO de funciones

Pensemos en las funciones definidas sobre un intervalo $[a, b]$.

Por ej. el desplazamiento de una cuerda el tiempo t dado por $f(x)$.

* en $n \infty$ debe tener igual información.



↓
una forma de aproximar este f_n ,
es dividir el intervalo $[a, b]$ en
subintervalos y dar el valor de
 f en el conjunto discreto de puntos.

coordenadas en el espacio vectorial.

Los vectores base en este espacio son:

$$|x_i\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \rightarrow i\text{-ésimo} \quad \rightarrow \text{la cuerda se desplaza en un solo punto.}$$

Satisfacen la ortogonalidad

$$\langle x_i | x_j \rangle = \delta_{ij}.$$

Ahora, la $f_n(x)$ se representa por $|f_n\rangle = \sum_{i=1}^n f_n(x_i) |x_i\rangle$

El prod. interno puede definirse como

$$\langle f_n | g_n \rangle = \sum_{i=1}^n f_n(x_i) g_n(x_i)$$

Dos funciones son ortogonales si su producto interno es cero.

Si pensamos en el caso límite

$$f_\infty(x) \equiv f(x)$$

↓

en ese caso tengo que redefinir el prod. interno
para que converja:

$$\langle f_n | f_n \rangle = \sum_{i=1}^n |f_n(x_i)|^2$$

La elección natural para ello

$$\langle f_n | g_n \rangle = \sum f_n(x_i) g_n(x_i) \Delta , \quad \Delta \approx \frac{b-a}{n+1}$$

$$\langle f | g \rangle = \int_a^b f(x) g(x) dx$$

↓

para el caso continuo,
la base posición es ←
la delta de dirac.
(en el discreto, es puras
ceros y un uno)

Generalizando para funciones complejas

$$\langle f | g \rangle = \int_a^b f^*(x) g(x) dx.$$

¿Cuáles son los vectores base en este espacio?

Para q punto del espacio tenemos $|x\rangle$.

$$\langle x | x' \rangle = 0 \quad \text{si } x \neq x'$$

¿Cómo normalizamos?

$$\langle x | x' \rangle = 1 \quad \text{no es una opción.}$$

↓ si no, no se cumple

Partimos de la relación de completitud:

$$\int_a^b |x'\rangle \langle x'| dx' = I \quad \text{esto no depende de la base.}$$

$$\int_a^b \langle x | x' \rangle \langle x' | f \rangle dx' = \underbrace{\langle x | f \rangle}_{\text{f(x')}}.$$

$$\int_a^b \langle x | x' \rangle \underbrace{\langle x' | f \rangle}_{f(x')} dx' = f(x)! \rightarrow \int_{x'-\epsilon}^{x'+\epsilon} \delta(x, x') = 1$$

proyecciones
= funciones de onda.

Delta de Dirac:

$$\delta(x - x') = 0 \quad \text{si} \quad x \neq x'$$

la función está
en este intervalo

$$\int_a^b \delta(x - x') dx' = 1 \quad a < x < b.$$

$$\langle x | x' \rangle = \delta(x - x')$$

Postulados de la mecánica cuántica

26. agosto.

	Mec. clásica	Mec. cuántica
Susceptible de tener una evolución temporal. * Clásicamente que sea observable no tiene mucha importancia.	I) El estado de una partícula en cualquier instante t está especificado por 2 variables $x(t)$ y $p(t)$, es decir, es un punto en el espacio de fases 2D.	I) El estado de una partícula está representado por un vector $ \psi(t)\rangle$ en un espacio de estados (Hilbert) ↳ La información.
observables. → Posición → Momento → Energía cinética ... completa a entrar → la dinámica.	II) Cualquier variable dinámica w es una función de x y p . $w = w(x, p)$	II) Las variables independientes x y p de la mecánica clásica son representadas por operadores Hermitianos \hat{x} y \hat{p} con los sig. elementos de matriz. $\langle x x' x' \rangle = x \delta(x - x')$ $\langle x p x' \rangle = -i\hbar \delta'(x - x')$ ↳ observables derivada. Los operadores correspondientes a variables dependientes $w(x, p)$ son op. hermitianos. $\hat{w}(x, p) = w(x \rightarrow \hat{x}, p \rightarrow \hat{p})$
* Parte interpretativa no debería dar un cambio en las predicciones.	III) Si la partícula está en algún estado dado por alguna posición x y algún momento p , la medida de la variable w dará como resultado un valor $w(x, p)$. El estado quedará tal cual	III) Si la partícula está en un estado $ \psi\rangle$, medir la variable w dará como resultado uno de los autovalores w de \hat{w} con prob.
estados de cuántica → superposición desaparecen III) Dinámica del medio IV) "en ausencia de mediación". ↳ genera superposiciones. ↳ nos dice "cómo cambia el estado cuando cambia la mediación".	↓ no es afectado por la medición.	Prop. a. $p(w) \propto \langle w \psi \rangle ^2$. Regla de Born El estado del sistema cambiará de $ \psi\rangle$ a $ w\rangle$ como resultado de la medida. ↳ autovector asociado al autovalor. ↳ El estado salta discontinuamente al autovector.
	IV) Las variables de estado cambian en el tiempo de acuerdo con: $\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}$ $\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}$	IV) El vector de estado $ \psi(t)\rangle$ obedece la ec. de Schrödinger $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t)\rangle = H \psi(t)\rangle$ ↳ pasa a ser un operador. donde $H = \mathcal{H}(x \rightarrow \hat{x}, p \rightarrow \hat{p})$ y \mathcal{H} es el Hamiltoniano.

* revisar normalizació!

Espacio de estados → contiene

vectores
normalizados
a 1 "vect.
propios"

no es no físico
los que no son
norm. a 1

vectores normalizables
a la delta de Dirac.
"vect. impropios"

ej:
→ Onda plana
(módulo 2 da 1: está en
todas partes).

espacio vectorial.



vale prop. de superposic.

incómodo para
partículas pero existe
en mec. clásica en
problemas ondulatorios.

$\alpha |\psi_1\rangle + \beta |\psi_2\rangle \rightarrow$ también está

* colapso ⇒ después de la medida yo sé el estado.

todos los experimentos comienzan del mismo queoestado.

$|\psi\rangle \rightarrow$ mido $\sigma \rightarrow$ si da w_i , siga → $|w_i\rangle$

↓
todos mis experimentos
inician desde $|w_i\rangle$.

• $|w_i\rangle$

↓ evoluciona un tiempo t
mido Δ .

estado
junto
antes de
la medida

→ me lo da el post. IV)

↓ $|\psi(t)\rangle$.

$\Delta \rightarrow \{\lambda_i, |\lambda_i\rangle\}$.

$$P_{\lambda_1} = \frac{N \lambda_1}{N} \quad P_{\lambda_2} = \frac{N \lambda_2}{N} \quad \left[\begin{array}{c} \lambda_1 \quad \lambda_2 \quad \dots \\ \text{experiments} \end{array} \right]$$

$$P_{\lambda_i} = \frac{|\langle \lambda_i | \psi(t) \rangle|^2}{\sum_j |\langle \lambda_j | \psi(t) \rangle|^2} \quad \left\{ \begin{array}{l} x q \text{ no} \\ \text{está} \\ \text{normalizada.} \end{array} \right.$$

↓ coinciden?

Complicaciones al tratar de aplicar los postulados

<p>operadores no comutan</p> <p>si tengo una variable w que quiero medir.</p> <p>como Ω es Hermitiano, me asegura la base</p> <p>mult. alg. 2</p> <p>Tengo una raíz múltiple del polinomio caract.</p>	<p>COMPLICACIÓN 1:</p> <p>ambigüedad en la receta $\Omega = w (x \rightarrow X + p \rightarrow P)$</p> <p>Ej: si $w = xp$.</p> <p>$xp \rightarrow xp$</p> <p>$px \rightarrow px$</p> <p>alternativa → simetrizar</p> $\Omega = \frac{xp + px}{2}$ <p>→ para algún subconjunto de casos está bien (para 2 operadores)</p> <p>Sólo un experimento puede decidir la expresión correcta. (Sólo hay 1 correcta).</p> <p>COMPLICACIÓN 2:</p> <p>El op. Ω es degenerado.</p> <p>$w_1 = w_2 = w$ ¿cuánto vale $p(w)$?</p> <p>→ sobre un estado $\psi\rangle$, mido $\Omega \rightarrow p(w)$: prob. de obtener w.</p> <p>$\langle w \psi \rangle ^2$</p> <p>• Sea $w,1\rangle, w,2\rangle$ una base orthonormal para el autoespacio asociado al autovalor w.</p> <p>$p(w) = \langle w,1 \psi \rangle ^2 + \langle w,2 \psi \rangle ^2$</p> <p>que sean ortonormales me permite que ambos términos excluyentes.</p> <p>$P_w = w,1\rangle \langle w,1 + w,2\rangle \langle w,2$</p> <p>OP. PROYECCIÓN</p> <p>la dimensión es la de ψ.</p> <p>$\rightarrow p(w) = (\psi P_w \psi) = (\rho_w \psi P_w \psi)$</p> <p>En general, podríamos reemplazar el postulado por</p> <p>$p(w) \propto \langle \psi P_w \psi \rangle$.</p>
---	--

Esta der. satisface el requerimiento de que la prob. total sea 1.

$$\int P(w) dw = \int |\langle w | \psi \rangle|^2 dw = \int \langle \psi | w \rangle \langle w | \psi \rangle dw \\ = \langle \psi | I | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1$$

COMPLICACIÓN 3.

El espectro de Ω es continuo: w son los autovalores.

$|\psi\rangle$ en este caso puede expandirse como

$$|\psi\rangle = \int |w\rangle \underbrace{\langle w | \psi \rangle}_{\text{uno espera que esta cantidad varíe suavemente con } w.} dw.$$

$$\psi(w) \equiv \langle w | \psi \rangle$$

¿Podemos interpretar $|\langle w | \psi \rangle|^2$ como la prob. de encontrar la partícula con un valor w para Ω ?

No porque a cada w le corresponde una prob. infinitesimal.

$$P(w) = |\langle w | \psi \rangle|^2 \quad \text{se interpreta como la densidad de prob. para el valor } w.$$

$P(w)dw$ es la prob. de que dada una partícula en un estado $|\psi\rangle$, al medir la variable Ω resulte el valor w entre w y $w+dw$.

esta der. satisface: $\int P(w) dw = 1 \quad \text{si } \langle \psi | \psi \rangle = 1$

COMPLICACIÓN 4:

la variable Ω no tiene correlato clásico.

se puede q el op. \rightarrow
de base es Hermitiano.

Problemas con el \leftarrow
postulado 3!

· lo que no tiene correlato
clásico.

COLAPSO del vector de estado.

P III : Al medir una variable Ω , el vector de estado cambia.

EN general

$$|\psi\rangle = \sum_w |w\rangle \langle w|\psi\rangle$$

↑
superposición.
a un autoval.

Al medir Ω , colapsa a $|w\rangle$, el autoestado correspondiente al autovalor w obtenido en la medida.

→ Esto se llama colapso o reducción del estado.

$$|\psi\rangle \xrightarrow[\text{se mide } \Omega]{\quad} \frac{|P_w|\psi\rangle}{\langle P_w|\psi\rangle^{1/2}} \xrightarrow{\quad} \text{OP. de proyección sobre el autoespacio asociado a } |w\rangle.$$

se obtiene el valor w .
→ Proyección renormalizada.

Valor de expectación

* Si el op. es degenerado, el espacio de Hilbert tiene $+ \infty$ dimensiones, puede ser en un plano, etc.

Si repito el exp. muchas veces, tenemos un valor esperado

Dado un ensamble de N partículas en un estado $|\psi\rangle$.

↳ La teoría permite predecir que fracción dará el valor w al medir Ω .

$$\langle \Omega \rangle = \sum_i p(w_i) w_i = \sum_i |\langle w_i | \psi \rangle|^2 w_i$$

val. de expectación
autovalores

$$\begin{aligned} \langle \Omega \rangle &= \sum_i \langle \psi | w_i \rangle \langle w_i | \psi \rangle w_i = \sum_i \langle \psi | \Omega | \psi \rangle = \langle \psi | \Omega | \psi \rangle \\ &\quad \text{dificil de calcular} \\ &= \underbrace{\sum_i \langle \psi | w_i \rangle}_{\text{descomposicónpectral del operador}} \langle w_i | \psi \rangle w_i = \underbrace{\sum_i \langle \psi | \Omega | w_i \rangle}_{\text{I}} \langle w_i | \psi \rangle = \langle \psi | \Omega | \psi \rangle \end{aligned}$$

- Sólo basta aplicarle el operador a ambos lados.
- No hace falta diagonalizar Ω .

LQ incertezza

$$\Delta \Omega = \langle (\Omega - \langle \Omega \rangle)^2 \rangle^{1/2}$$

magnitud de las
diferencias

desviación cuadrática media.

2 · sept.

$$|\psi(t=0)\rangle = \sum_i c_i |\omega_i\rangle$$

Ω variable dinámica: ω_i $|\omega_i\rangle$

↳ Medimos sus autovalores.

$$|\psi\rangle \rightarrow \frac{P_\omega |\psi\rangle}{\langle P_\omega \psi | P_\omega \psi \rangle^{1/2}} \rightarrow \text{Tenerlo normalizado a 1.}$$

· Espacio de estado: ejes en una dirección.

Variabiles compatibles e incompatibles



Dos mediciones sucesivas Ω, Λ

Casos posibles:

a) Compatibles $[\Omega, \Lambda] = 0 \rightarrow$ Garantizado que \exists una base común.

b) Incompatibles $[\Omega, \Lambda] \neq 0$. con autovalor cero. \rightarrow además que ningún bloque sea 0.

(que no comparten ningún autovector)

$$\rightarrow \text{Ej: } [x, p] = i\hbar$$

↳ Ningún bloque es 0

(es la identidad).

c) Otros casos: En este caso hay algunos autoestados que son autoestados simultáneos de Ω y Λ .

Evolución temporal

Postulado IV

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

$$\mathcal{H}(x \rightarrow X, p \rightarrow P).$$

vector de estado satisface ←

H en general no es diagonal	<ul style="list-style-type: none"> • suponemos que H no depende explícitamente de t. <p style="text-align: center;">ev. temporal</p> $ \psi(t = t_0)\rangle \longrightarrow H(t)\rangle$ <p style="text-align: center;">$U(t, t_0)$</p> <p style="text-align: center;">↓ op. que traslada en el t.</p> <ul style="list-style-type: none"> • tiene que satisfacer una serie de <u>condiciones</u>
$\textcircled{1}$ q los op. unitarios conservan la norma.	<p style="text-align: center;">!</p> <ul style="list-style-type: none"> ① conservación de probabilidad. la normalización del estado <u>no</u> depende del tiempo. $U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) = \mathbb{1}$, U es unitario
$\textcircled{2}$ Mult. entre op.	<ul style="list-style-type: none"> ② prop. de composición: $U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1) U(t_1, t_0) \rightarrow t_2 > t_1 > t_0$ <p style="text-align: center;">↓</p> $i\hbar [\psi(t+dt)\rangle - \psi(t)\rangle] = H \psi(t)\rangle dt$ $ \psi(t+dt)\rangle = \left(I - \frac{iH}{\hbar} dt \right) \psi(t)\rangle$ <p>IMONGAMOS LA PROP. DE COMPOSICIÓN:</p> $U(t+dt, t_0) = U(t+dt, t) U(t, t_0)$ $= \left(I - \frac{iH dt}{\hbar} \right) U(t, t_0)$ $U(t+dt, t_0) - U(t, t_0) = -\frac{iH dt}{\hbar} U(t, t_0)$ $i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H U(t, t_0)$ <p>Si H es indep. de t:</p> $U(t, t_0) = \exp\left(-i \frac{H(t-t_0)}{\hbar}\right)$ <p>Lo cual se puede verificar reemplazando.</p>

Op. de evolus temporal.

<p>Def. de la exponencial ← * H diagonal para def. la exponencial fácil.</p> <p>Fenómenos de interferencia</p> <p>Momento es nulo si las fases relativas son 0. (partícula no se mueve).</p> <p>↳ la comb. lineal entre autoestados <u>no</u> es autoestado. Si lo fuera, trivializa lo anterior.</p>	<p>Otra forma:</p> $\lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{iH(t-t_0)}{\hbar N} \right)^N = \exp \left[-i \frac{H(t-t_0)}{\hbar} \right]$ <p>El op. evol. temporal es fácil de escribir en la base de autoestados de H ($H \psi_i\rangle = E_i \psi_i\rangle$)</p> $U(t,0) = \exp \left(-i \frac{Ht}{\hbar} \right) = \sum_n \psi_n\rangle \exp \left(-i \frac{E_n t}{\hbar} \right) \langle \psi_n $ <p style="text-align: center;">proyector</p> <p>• $\psi(t)\rangle = U(t,0) \psi(t=0)\rangle$ $= \sum_n \psi_n\rangle \langle \psi_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi(t=0)\rangle$.</p> <p>$= \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} \underbrace{\langle \psi_n \psi(t=0)\rangle}_{= c_n} \psi_n\rangle ; \psi(t_0)\rangle = \sum_n c_n \psi_n\rangle$.</p> <p>• Los valores absolutos de los coef. no cambian en el tiempo. • La fase relativa entre los coef. <u>sí</u> cambia. cociente entre 2º complejos y ver el ángulo entre ellos.</p> <p>• Pensemos en un obs. O <u>cualquier</u> indep. de t.</p> <p>¿Cómo cambia el valor de expectación de O en un estado $\psi(t)\rangle$. ① Si $\psi(t=0)\rangle$ es un autoestado de H ② Para un estado inicial arbitrario:</p>
---	---

E_n son los autovalores de H .

① $|\psi(t=0)\rangle = |\psi_n\rangle$ No se puede lo sgte. fuera + de uno (el estado está sobre una línea)
→ suponemos que el valor inicial es un autoestado. invariante).

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE_n t/\hbar} |\psi_n\rangle \rightarrow \text{Autoestado tiempo } t.$$

(operador).

* NO importa el observable,
sólo el estado.

$$\langle \psi(t) | O | \psi(t)\rangle = \langle \psi_n | e^{iE_n t/\hbar} O e^{-iE_n t/\hbar} | \psi_n\rangle$$

$$= \langle \psi_n | O | \psi_n\rangle$$

$$= \langle \psi(t=0) | O | \psi(t=0)\rangle.$$

Si el estado
es genérico sí va
a depender.

* Repasar evolución temporal
contraintuitiva.

② $\langle \psi(t) | O | \psi(t)\rangle = \langle \psi_0 | U^\dagger O U | \psi_0\rangle$
 $= \sum_{n,m} e^{i\epsilon_m t/\hbar} \underbrace{e^{-i\epsilon_n t/\hbar}}_{e^{-i(\epsilon_n - \epsilon_m)t/\hbar}} c_m^* c_n \langle \psi_n | O | \psi_n\rangle.$
frecs. de oscilación
dependen de las ≠ de Energía
de los estados.

TEOREMA de EHRENFEST

Evol. temporal de su valor →
de expectación.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \Omega \rangle &= \frac{d}{dt} \langle \psi | \Omega | \psi \rangle \\ &= \langle \dot{\psi} | \Omega | \psi \rangle + \langle \psi | \Omega | \psi \rangle + \langle \psi | \dot{\Omega} | \psi \rangle. \end{aligned}$$

Si Ω no depende explícitamente de t y usando la ec. de Schrödinger:

$$i\dot{\psi} = -\frac{i}{\hbar} H \psi$$

$$\langle \dot{\psi} | = \frac{i}{\hbar} \langle \psi | H$$

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle \Omega \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\Omega, H] \rangle}$$

Teorema de Ehrenfest.

cuantización canónica

$$\cdot \frac{d\omega}{dt} = \{\omega, H_0\}$$

Si $\omega = x$, Partíc. en 1D.

$$\langle \dot{x} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [x, H] \rangle$$

$$\text{Si } H = \frac{p^2}{2m} + U(x) \Rightarrow \langle \dot{x} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle \left[x, \frac{p^2}{2m} \right] \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m}$$

RELACIONES de INDETERMINACIÓN de HEISENBERG

4. septiembre

$$\langle \Omega \rangle = \langle \psi | \Omega | \psi \rangle \quad \text{valor de especieación}$$

LOS resultados posibles de una medición son autovalores y el estado va a parar al autoestado.

• Valor de especieación, no necesariamente es autovalor.

$$\Delta \Omega = [\langle \psi | (\Omega - \langle \Omega \rangle)^2 | \psi \rangle]^{1/2} \quad \text{incertidumbre / varianza.}$$

Cuando esto pasa, las variables son canónicas conjugadas.

Esto en la gura y las notas de clase



Hay estados para los cuales $\Delta \Omega = 0$, los autoestados de Ω .

→ anticomutador $[\tilde{\Omega}, \tilde{\Lambda}]_+ = \tilde{\Omega} \tilde{\Lambda} + \tilde{\Lambda} \tilde{\Omega}$

$$(\Delta \Omega)^2 (\Delta \Lambda)^2 \geq \frac{1}{4} \langle \psi | [\tilde{\Omega}, \tilde{\Lambda}]_+ | \psi \rangle^2 + \frac{1}{4} \langle \psi | I | \psi \rangle^2.$$

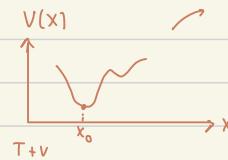
$$I \equiv [\tilde{\Omega}, \tilde{\Lambda}]$$

$$\tilde{\Omega} = \Omega - \langle \Omega \rangle, \quad \tilde{\Lambda} = \Lambda - \langle \Lambda \rangle$$

$$* I = \hbar \quad [x, p] = i\hbar$$

NO PUEDO DETERMINAR ambas cantidades si no comutan.

$$\hookrightarrow (\Delta \Omega)^2 (\Delta \Lambda)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}, \quad [\Omega, \Lambda] = i\hbar.$$



POZO DE POTENCIAL, el punto más bajo

RELACIONES de INDETERMINACIÓN de HEISENBERG ENERGÍA - TIEMPO.

Tengo pequeñas fluctuaciones si el sistema ha existido por un t finito

$\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$ → NO se sigue del razonamiento anterior.

↓ El t no es una var. dinámica

Tiempo durante el cuál ha existido el sistema.

se refiere a una situación donde tengo un sistema que ha existido por un tiempo Δt .

CUADROS de HEISENBERG y SCHRÖDINGER

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle$$

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

$$\text{si } H \text{ es indep. de } t \quad U(t, t_0) \rightarrow \exp \left(-i \frac{H(t-t_0)}{\hbar} \right)$$

$$|\alpha\rangle \rightarrow U |\alpha\rangle,$$

transf. activa (estado cambia).

→ Cuadro de Schrödinger

	$x \rightarrow U^\dagger x U$ con los keis que permanecen sin cambio transf. → cuadro de Heisenberg. Generalización a más grados de libertad. (hasta ahora 1 partícula en 1D). $\frac{dA^{(H)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [A^{(H)}, H]$ L A es un op. <u>Postulado II:</u> Asociado a qn de las N coord. cartesianas x_1, x_2, \dots, x_N que describen un sist. clásico. en la teoría cuántica \exists N ops. $ x_1, x_2, \dots, x_N\rangle$ de estos op. (llamada base coord.) y normalizados como: $\langle x_1, x_2, \dots, x_N x'_1, x'_2, \dots, x'_N \rangle = \delta(x_1 - x'_1) \delta(x_2 - x'_2) \dots \delta(x_N - x'_N)$. $\{ x_1, x_2, \dots, x_N\rangle \}$. tenemos la sig. correspondencia $ \psi\rangle \rightarrow \langle x_1, x_2, \dots, x_N \psi \rangle = \psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ $x_i \psi\rangle \rightarrow \langle x_1, \dots, x_N x_i \psi \rangle = x_i \psi(x_1, \dots, x_N)$ $p_i \psi\rangle \rightarrow \langle x_1, \dots, x_N p_i \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(x_1, \dots, x_N)$ op. momento asociado a x_i . las variables dinámicas dependientes $w(x_i, p_i)$ se representan mediante ops. $\Sigma = w(x_i \rightarrow x_i, p_i \rightarrow p_i)$. las otras quedan sin cambios esenciales.
--	--

PARTÍCULA LIBRE en 1D.

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

$$= \frac{p^2}{2m} |\psi\rangle$$

↪ Part. libre.

Los estados estacionarios son de la forma $|\psi\rangle = |\epsilon\rangle e^{-i\epsilon t/\hbar}$

$$H|\epsilon\rangle = \frac{p^2}{2m} |\epsilon\rangle = \epsilon |\epsilon\rangle$$

$\rightarrow p^2$ commuta c/ p .

Notar que los autovalores de p son también autovalores de p^2 .

$$\frac{p^2}{2m} |p\rangle = \epsilon |p\rangle$$

$$\left(\frac{p^2}{2m} - \epsilon \right) |p\rangle = 0$$

Como $|p\rangle$ es un vector no nulo, luego

$$p = \pm \sqrt{2m\epsilon} \quad \xrightarrow[p_+]{p_-}$$

Luego tenemos dos autoestados ortogonales asoc. a ϵ .

El op. evol. temporal es:

los autoestados de H son los autoestados de p .

$$U(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} |p\rangle \langle p| e^{-i\epsilon(p)t/\hbar} dp$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} |p\rangle \langle p| e^{-ip^2t/(2m\hbar)} dp$$

* Autoestados del momento:
ondas planas.

Elementos de
matriz del op. en la
base posición.

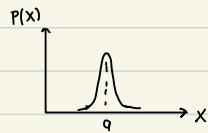
$$\begin{aligned} \langle x | U(t) | x' \rangle &= \langle x | \int_{-\infty}^{+\infty} |p\rangle \langle p| e^{-ip^2t/(2m\hbar)} dp | x' \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x | p \rangle \langle p | x' \rangle e^{-ip^2t/(2m\hbar)} dp \\ &\quad e^{ipx/\hbar} e^{-ipx'/\hbar}. \\ &= \sqrt{\frac{m}{\pi\hbar t}} e^{-im(x-x')^2/2\hbar t}. \end{aligned}$$

$$\psi(x, t) = \int U(x, t, x', t_0) \psi(x', t_0) dx'$$

<u>CONTROL</u>	<ul style="list-style-type: none"> · Entrar hasta problemas simples en 1-D · 3 problemas → 1 o 2 con cálculo · Subpreguntas breves. · Nivel de las guías (no tantos del Shankar). o del sakura: · Se puede traer una hoja con fórmulas tamaño A4 o menos.
	Fórmula integral en 1D:
	$\Psi(x,t) = \int_U(x,t; x',t_0) \psi(x',t_0) dx'$ <p style="text-align: center;">↓ interpretación de $U(x,t; x',t_0)$</p>
	<ul style="list-style-type: none"> · Supongamos que tengo un estado inicial localizado $x' = x_0$ $\psi(x',t_0) = \delta(x' - x_0)$
	<p>→ distribución rara: una δ.</p>
	<p>EN ESTE CASO</p> $\begin{aligned} \Psi(x,t) &= \int U(x,t; x',t_0) \delta(x' - x_0) dx' \\ &= U(x,t; x_0, t_0) \end{aligned}$ <p style="color: red;">→ Prob. de encontrar la partícula en x,t si inicialmente estaba en t_0, x_0.</p>
<p>* SOL. DEL PROB. CON inhomogeneidad tipo δ (func. de Green)</p>	<p>Es decir, el propagador en la base posición es la amplitud de prob. de encontrar la partícula en x al tiempo t dado que en t_0 estaba en x_0.</p>
Ejemplo:	<p><u>ket</u> $\Psi\rangle$</p> $ \Psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\rangle \underbrace{\langle x \psi}_{\Psi(x)} dx$ <p style="color: blue;">↳ amplitud de prob.</p> $= \int_{-\infty}^{+\infty} x\rangle \psi(x) dx$

Supongamos que

$$\psi(x) = \frac{1}{(\pi \Delta^2)^{1/4}} e^{-\frac{(x-a)^2}{2\Delta^2}}$$



$$\begin{aligned} P(x) dx &= |\psi(x)|^2 dx \\ &= \frac{1}{(\pi \Delta^2)^{1/2}} e^{-\frac{(x-a)^2}{\Delta^2}} dx \end{aligned}$$

$$\langle x \rangle = \langle \psi | x | \psi \rangle = a \rightarrow \text{valor de expectación.}$$

$$\begin{aligned} \Delta x &= \langle \psi | (x - \langle x \rangle)^2 | \psi \rangle^{1/2} \\ &= \frac{\Delta}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

Pensemos ahora en representación momento.

$$\langle p | \psi \rangle = ? \quad \psi(p).$$

① construir los autovals. y autokeris de P . $\rightarrow p, |p\rangle$

$$\begin{aligned} \text{es la transf. de Fourier de la onda} \\ \text{representación posición} \\ \text{y la transf. de una} \\ \text{gaussiana es una} \\ \text{gaussiana.} \end{aligned}$$

② calcular $\langle p | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle dx$
 $= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_p^*(x) \psi(x) dx$
son las ondas planas.
 $= \int \frac{e^{-ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{-\frac{(x-a)^2}{2\Delta^2}}}{\sqrt{\pi\Delta^2}} dx$
 $= \sqrt{\frac{\Delta^2}{\pi\hbar}} e^{-ipa/\hbar} e^{-p^2\Delta^2/2\hbar^2}.$

Cálculo aux:

$$p|p\rangle = p|p\rangle$$

$$\text{representación} \leftarrow \langle x | p | p \rangle = p \underbrace{\langle x | p \rangle}_{\text{posición.}}$$

postulado

$$\int \langle x | p | x' \rangle \underbrace{\langle x' | p \rangle}_{p|p\rangle} dx = p \psi_p(x)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_p(x) = p \psi_p(x)$$

$$\psi_p(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{ipx/\hbar}$$

$$\langle p \rangle = 0 \rightarrow (\text{si la función de onda vive solo en una línea en el Plano complejo})$$

$$\hookrightarrow \int \psi^* p \psi dx \rightarrow \text{la única opción para que sea real es que sea } 0.$$

$$\Delta p = \frac{\hbar}{m\Delta}$$



$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \rightarrow \text{paquete de incertidumbre mínimo (lo + cercano a una part. clásica), corra inferior de la indeterminación.}$$

Ahora, al paquete de onda a un t posterior aplicamos U .

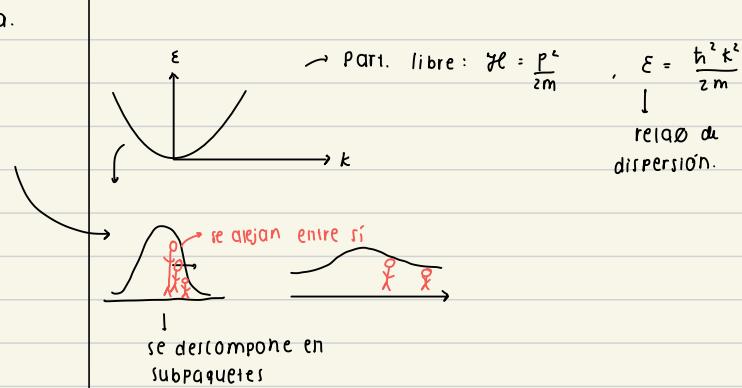
• Sale de Ehrenfest. $\leftarrow \langle x \rangle = a + \langle v \rangle t$.

• Paquete se desplaza.

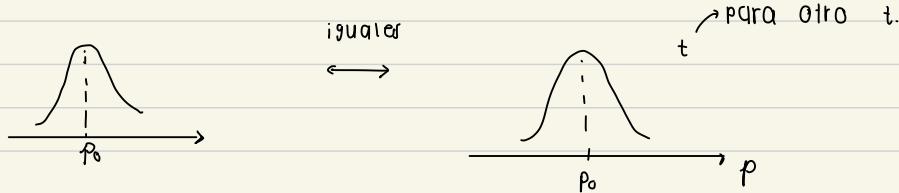
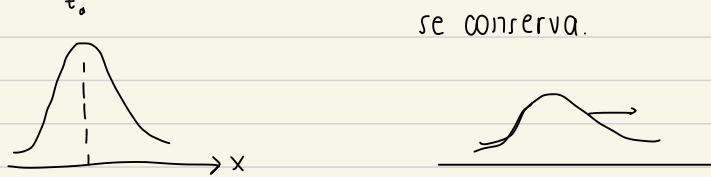
• Paquete se dispersa

Relación de dispersión
(ya no es lineal),

E del sistema
↓
autovalores



* El prod. de incertidumbres **no** necesariamente se conserva.



$$|\psi\rangle = \int |p\rangle \underbrace{\langle p| \psi\rangle}_{\Psi(p)} dp$$

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(t_0)\rangle = \int (e^{-i\epsilon_p t/\hbar} |p\rangle) \Psi(p) dp.$$

* Paquete se ensancha en posición pero queda igual en momentum.

* Hay rotación de la partícula en potencia).

Ec. de continuidad para la probabilidad.

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) = -\nabla \cdot \vec{j}$$

↓
dens. de corriente.

$$\rho \rightarrow \text{dens. de probabilidad} \quad |\psi(x)|^2 = \psi^* \psi$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V \psi. \quad \Delta$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V \psi^* \quad *$$

$$\rightarrow \psi^* \Delta - \psi * \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\underbrace{\psi^* \psi}_{\frac{\partial \rho}{\partial t}}) = -\frac{\hbar^2}{2m} [\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*]$$

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \right]}$$

→ cómo cambia la prob. en el tiempo
de un volumen.

\vec{j}
densidad de corriente de prob.

Generalidades

ESTADOS ESTACIONARIOS para PARTÍCULA en 1D CON POTENCIAL de a TROZOS

Cohen vol. I
* Tanuchi: complementario H1

ESTADOS ESTACIONARIOS

① Regiones de energía pot. da.

$$v(x) = V$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi(x) = 0$$

caso i) $E > V$

Las soluciones son: $\psi(x) = \underbrace{A e^{ikx} + A' e^{-ikx}}_{\in \mathbb{C}}$

$$E - V = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

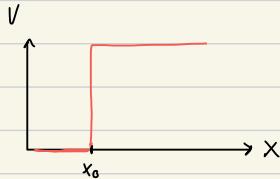
caso ii) $E < V$ (región clásicamente prohibida)

las soluciones: $\psi(x) = \underbrace{B e^{\beta x}}_{\in \mathbb{C}} + \underbrace{B' e^{-\beta x}}_{\beta \text{ positivo}}, \text{ se va si } x \rightarrow \infty$

caso iii) $E = V$

$\psi(x)$ es una función lineal de x .

⑥ Comportamiento de $\psi(x)$ en una discontinuidad del potencial.



* La función de onda no puede ser discontinua!

↳ Regla de Bohr: La densidad de probabilidad mantiene una unicidad. \Rightarrow habrían 2 valores si fuera discontinua. (Postulado III).

$$\int_{x_0-\eta}^{x_0+\eta} \psi''(x) dx = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0-\eta}^{x_0+\eta} (E - V(x)) \psi(x) dx.$$

$$\psi'(x_0+\eta) - \psi'(x_0-\eta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0-\eta}^{x_0+\eta} \underbrace{\qquad}_{\begin{array}{l} \text{una delta queda} \\ \text{fuera.} \end{array}}$$

si V esté acotado

$\eta \rightarrow 0$

• Si el pot. estq' acotado la derivada primera debe ser continua a lo largo del salto.

↳ ψ también es continua q es la integral de una func' continua.
La deriv. 2da no es continua.

(C) Esquema general

• EN cada regiÓN donde $V(x)$ es cte. escribo la sol. general .

i
ii
iii

EMPAJAR las sols.

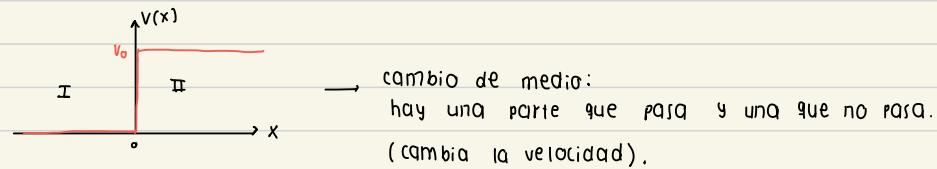
↳ continuidad para $\psi(x)$

↳ " para $\psi'(x)$ o salto en $\psi(x)$ si V no es acotado.

↳ hacer la integral de ②

(si es una g sale fácil).

ESCALÓN DE POTENCIAL



(A) $E > V_0$

$$\psi_I(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x}, \quad k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\psi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x}, \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$$

Viene de

continuidad de la

ec. de onda y su

derivada.

Las condiciones de empalme son:

$$\frac{A_1'}{A_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad \frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

coef. de reflexión.

$$R = \frac{|A_1'|^2}{|A_1|^2} = \left| \frac{(k_1 - k_2)}{(k_1 + k_2)} \right|^2$$

* cuando hay un cambio de medio se refleja.

* Podría no llegar a una base completa de autovectores si H es no hermitiano. Puede pasar si las condiciones de contorno no están bien dibujados.

* T. y R son efectos disjuntos (o se refleja o se transmite).

coef. de transmisión.

$$T = 1 - R = \frac{(k_1 + k_2)^2 - (k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

(B) Si $E \gg V_0$, la prob. de transmisión debe ser 1 ya es como si no hubiera cambio de medio.

$$T \approx 1$$

(C) Si $E < V_0$,

$$\Psi_{\text{II}}(x) = B_2 e^{k_2 x} + B_2' e^{-k_2 x}$$

es real. \sim $k_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$

$B_2 = 0$ para que la solu^o sea acotada.

cond. de empalme:

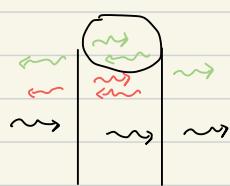
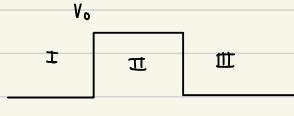
pasq del eje real al imaginario. \leftarrow $\frac{A_1'}{A_1} = \frac{k_2 - ik_2}{k_2 + ik_2}, \quad \frac{B_2'}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2}$

$$R = \left| \frac{A_1'}{A_1} \right|^2 = \left| \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} \right|^2 = 1 \rightarrow \text{indep. de la energía.}$$

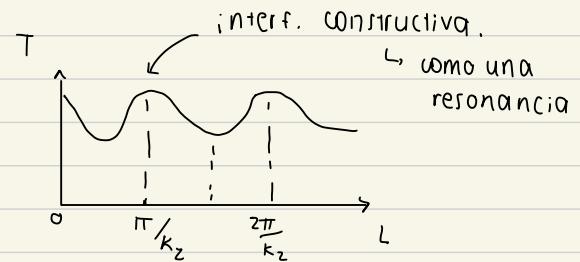
→ la onda no escapa, solo decrece (no puede haber transmisión).

→ Hay un pedazo de la onda que entra a II pero no de manera propagativa (no de manera asintótica) pero entra a II y eso se desvía de la mec. clásica en el límite en que $x \rightarrow \infty$, tengo o (no una onda plana).

Barrera de Potencial



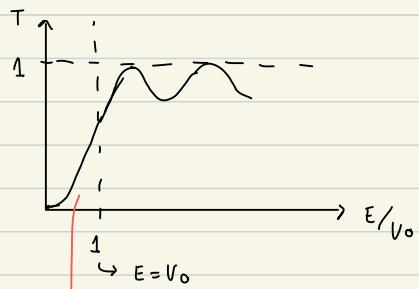
[A] Caso $E > V_0$



$k_z \cdot 2L = n \cdot 2\pi$ Interf. constructiva

$k_z \cdot 2L - \pi = 0 \bmod 2\pi$ interf. destructiva.

[B] Caso $E < V_0$



prob. de transmisión
es pequeño pero es no nulo.

$T \propto e^{-2k_z L}$ → depende del
ancho de la barrera
(efecto túnel).

Paso. variacional

23. sept.

→ Método aproximado

es un promedio ponderado

El punto de partida es la desigualdad:

$$E[\psi] \equiv \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0$$

valor de
esperación de
la energía en
el estado $|\psi\rangle$

$\langle \psi | \psi \rangle$

↓
Energía del estado fundamental.

Derivación

Desarrollemos $|\psi\rangle$ en la base de H (digamos $\{|\psi_n\rangle\}$)

$$|\psi\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \psi \rangle$$

coef. de la expansión (H es hermitiano)

pues $E_0 \leq E_n$ (estado fundamental es el de más baja energía).

$$E[\psi] = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\sum_n E_n |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2}{\sum_n |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2} \geq \frac{\sum_n E_0 |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2}{\sum_n |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2} = E_0.$$

ESTA desigualdad permite estimar la energía del estado fundamental.

↓

TOMAR UN SUBCONJUNTO DE VECTORES PARAMETRIZADO POR VARIABLES α, β, \dots que tienen las características esperadas del estado fundamental.

(ajustar)

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^m a_j |j\rangle \quad \text{para } \alpha, \beta, \dots$$

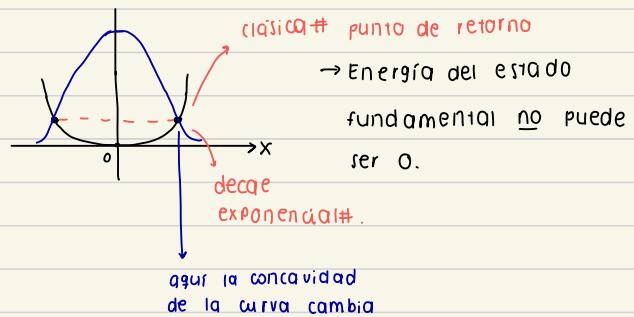
Luego encontramos los valores de los parámetros α, β, \dots que minimizan $E[\psi]$ → cota para E_0 .

Idea del juego:

Encontrar la cota más baja posible para E_0 con el menor "trabajo".

Ejemplo $V(x) = \lambda x^4$

- * El máximo va a estar en un mínimo de potencial.
- * + nodos → + curvatura
↓
+ energía cinética



significa + energía ←

características esperadas

→ funciones con paridad definida

pues $V(x)$ es par.

→ sin nodos

→ Máximo alrededor de $x=0 \rightarrow$ de manera de minimizar $\langle V \rangle$.

→ $\xrightarrow{x \rightarrow 0} 0$ (decae).

cambio α , cambio ←
el ancho → cambio
la energía

Fun ϕ de prueba posible:

$$\psi(x, \alpha) = e^{-\alpha x^2/2} \rightarrow \text{gaussiana}$$

parámetro libre.

$$E(\alpha) = \frac{\langle \psi(\alpha) | H | \psi(\alpha) \rangle}{\langle \psi(\alpha) | \psi(\alpha) \rangle} = \frac{\left\{ \int e^{-\alpha x^2/2} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \lambda x^4 \right] e^{-\alpha x^2/2} dx \right\}}{\int e^{-\alpha x^2} dx}$$

parte cinética

$$= \frac{\frac{\hbar^2 \alpha}{4m} + \frac{3\lambda}{4\alpha^2}}{\text{parte potencial}}$$

→ calculo α que minimiza $E(\alpha)$ → derivo e igualo a 0.

$$\alpha_0 = \left(\frac{6m\lambda}{\hbar^2} \right)^{1/3}$$

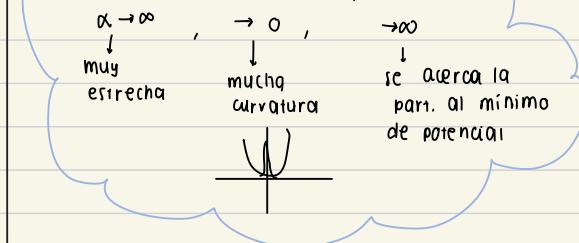
↳ la energía asociada es

$$E(\alpha) = \frac{3}{8} \left(\frac{6\hbar^4 \lambda}{m^2} \right)^{1/3}$$

pues H

es def. → $0 \leq E_0 \leq E(\alpha_0)$.

positiva



Derivación alternativa

$$H |\psi_0\rangle = E_0 |\psi_0\rangle$$

$$E_0 = \frac{\langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle}, \quad |\psi_0\rangle \text{ estado fundamental}$$

Para cualquier estado de prueba $|\psi\rangle$.

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

Ahora, lo que queremos mostrar es que el error en E_0 (esto es, $E - E_0$) es de orden 2 en $\delta\gamma$, esto es

$$\frac{\partial E}{\partial \gamma} = 0$$

en las autoenergías
del sistema.

para ello consideramos $|\psi_0 + \alpha\phi\rangle$

$$E = \frac{\langle \psi_0 + \alpha\phi | H | \psi_0 + \alpha\phi \rangle}{\langle \psi_0 + \alpha\phi | \psi_0 + \alpha\phi \rangle}$$

$$\begin{aligned} \frac{dE}{d\gamma} \Big|_{\alpha=0} &= \frac{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle (\langle \phi | H | \psi_0 \rangle + \underbrace{\langle \gamma_0 | H | \phi \rangle}_{E/\langle \psi_0 \rangle}) - \underbrace{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle}_{E \langle \psi_0 \rangle} (\langle \phi | \psi_0 \rangle + \langle \gamma_0 | \phi \rangle)}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle^2} \\ &= E \langle \phi | \psi_0 \rangle + E \langle \psi_0 | \phi \rangle - E \langle \phi | \psi_0 \rangle - E \langle \psi_0 | \phi \rangle \\ &= 0. \end{aligned}$$

E es estacionario en
el autoestado del sistema.

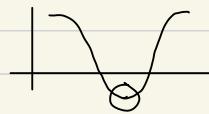
*En $\alpha=0$, estoy en
el estado fundamental.

Luego E es estacionario en el autoestado del sistema.

Oscilador armónico

Simplificar factorizándolo

$$\mathcal{H} = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2$$



Dirac Definimos:

$$q = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} P$$

$$q^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} P$$

$$[q, q^\dagger] = 1$$

aparece Xq no comunitan.

$$a^\dagger a = \frac{m\omega}{2\hbar} X^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar} P^2 + \frac{i}{2\hbar} [X, P].$$

$$= \frac{\mathcal{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow \mathcal{H} = \hbar\omega (a^\dagger a + \frac{1}{2})$$

Para quedarse adimensional

$$\tilde{\mathcal{H}} = \frac{\mathcal{H}}{\hbar\omega} = a^\dagger a + \frac{1}{2} \quad \text{adimensional}$$

$$\tilde{\mathcal{H}} |\epsilon\rangle = \epsilon |\epsilon\rangle$$

* Segunda (tiene simetría)

relaciones

$$\cdot [q, \tilde{\mathcal{H}}] = [q, a^\dagger a + \frac{1}{2}] = \overbrace{[q^\dagger a]}^1 q + a^\dagger \underbrace{[a, a]}_0$$

$$[q, \tilde{\mathcal{H}}] = q$$

$$\cdot [q^\dagger, \tilde{\mathcal{H}}] = [q^\dagger, a^\dagger a + \frac{1}{2}] = [q^\dagger a^\dagger] q + q^\dagger [a^\dagger, a].$$

$$[q^\dagger, \tilde{\mathcal{H}}] = -q^\dagger$$

$$\tilde{\mathcal{H}} |q|\epsilon\rangle = \{ q \tilde{\mathcal{H}} - \underbrace{[q, \tilde{\mathcal{H}}]}_0 \} |\epsilon\rangle$$

$$= [q \tilde{\mathcal{H}} - q] |\epsilon\rangle$$

$$= q [\tilde{\mathcal{H}} - 1] |\epsilon\rangle$$

$$= q [\epsilon - 1] |\epsilon\rangle = \underbrace{[\epsilon - 1]}_{\text{a genera otros autoestados con autovalor una unidad más bajo.}} |q|\epsilon\rangle$$

Luego $a|\varepsilon\rangle$ es también un autoestado de \tilde{H} con autovalor $\varepsilon - 1$.
Esto es:

$$a|\varepsilon\rangle = \frac{\varepsilon}{\varepsilon} |\varepsilon - 1\rangle$$

\hookrightarrow constante

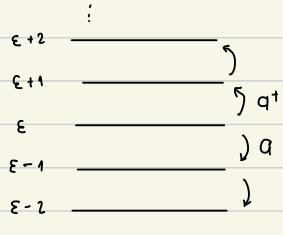
$\Rightarrow a$: OPERADOR de
BAJADA

De manera similar,

$$\begin{aligned}\tilde{H}a^+|\varepsilon\rangle &= \{a^+, \tilde{H} - [a^+, \tilde{H}]\} |\varepsilon\rangle \\ &= \{a^+\tilde{H} + a^+\} |\varepsilon\rangle \\ &= (\varepsilon + 1) |\varepsilon + 1\rangle\end{aligned}$$

$$\Rightarrow a^+ = \frac{\varepsilon}{\varepsilon + 1} |\varepsilon + 1\rangle$$

$\Rightarrow a^+$: OPERADOR de
SUBIDA.



\rightarrow Autovalores deben ser definidos positivos así que al $-\infty$ es un resultado no físico.

Vemos que en algún momento la serie se debe cortar pues los autovalores no pueden ser negativos.

$$a|\varepsilon_0\rangle = 0$$

\hookrightarrow el autoestado con energía ε_0 más baja positiva,

$$a^+a|\varepsilon_0\rangle = 0 \Rightarrow \tilde{H}|\varepsilon_0\rangle = \frac{1}{2}|\varepsilon_0\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\varepsilon_0 = \frac{1}{2}}$$

(podemos subir de)
 a si los estados..)

$$\varepsilon_n = n + 1/2$$

$n = 0, 1, 2, \dots$

estados igualmente
espaciados.

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

La pregunta que queda ahora es si existen otras "familias" de escaleras. Pensemos que existe otra familia con energía fundamental ϵ'_0 .

$$a|\epsilon'_0\rangle = 0$$

$$a^\dagger a |\epsilon'_0\rangle = 0$$

$$\tilde{H} |\epsilon'_0\rangle = \frac{1}{2} \epsilon'_0$$

Teorema en 1D:

Los estados ligados son no degenerados.

Demostración →

Luego $|\epsilon'_0\rangle$ es degenerado con $|\epsilon_0\rangle$

pero por teo. ambos estados no pueden ser diferentes.

Determinemos ξ_ϵ y $\xi_{\epsilon+1}$

$$\rightarrow \epsilon = n+1$$

$$\rightarrow a|n\rangle = \xi_n |n-1\rangle$$

$$\rightarrow \langle n | a^\dagger = \xi_n^* \langle n-1 |$$

$$\langle n | a^\dagger a | n \rangle = |\xi_n|^2 \underbrace{\langle n-1 | n-1 \rangle}_1$$

$$\langle n | \tilde{H} - \frac{1}{2} | n \rangle = |\xi_n|^2$$

$$a^\dagger |n\rangle = \xi_{n+1} |n+1\rangle$$

$$\langle n | a = \xi_{n+1}^* \langle n+1 |$$

$$\langle n | a^\dagger a | n \rangle = |\xi_{n+1}|^2$$

$$\langle n | \tilde{H} + \frac{1}{2} | n \rangle = |\xi_{n+1}|^2$$

* $\tilde{H} |n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right) |n\rangle$

$$\xi_n = \sqrt{n}$$

$$n = |\xi_n|^2$$

$$|\xi_{n+1}|^2 = n+1$$

Suben y bajan los estados.
crean y destruyen fotones.

$$a = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ \vdots & & & \end{bmatrix}$$

$$P = i \sqrt{\frac{m\omega h}{2}} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 0 & \dots \end{bmatrix}$$

$$a^\dagger = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{3} & \dots \end{bmatrix}$$

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger)$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & \dots \end{bmatrix}$$

* Operadores en la base de autoestados.

pasaje de la base energía a la base posición

<p>OP. de bajada y subida.</p> 	<p>↑ estado de energía + baja $q 0\rangle = 0$</p> <p>↳ proyección sobre la base posición</p> <p>$0\rangle \rightarrow \langle x 0\rangle \equiv \psi_0(x)$</p> <p>$\hat{q} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{p}$, $\hat{q}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{p}$</p> <p>- $i\hbar \frac{d}{dx}$</p> <p>Definimos $y = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}$; $q = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y + \frac{d}{dy} \right)$, $q^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y - \frac{d}{dy} \right)$</p> <p>$\left(y + \frac{d}{dy} \right) \psi_0(y) = 0$</p> <p>$\frac{d\psi_0}{dy}(y) = -y \psi_0(y)$</p> <p>$\frac{d\psi_0}{dy} = -y dy \rightarrow \psi_0(y) = A e^{-y^2/2}$ Vuelvo a la var. original. $\psi_0(x) = A_0 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$</p> <p>Normalizamos:</p> <p>$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$</p> <p>$n\rangle = \frac{(q^\dagger)^n 0\rangle}{\sqrt{n!}}$</p> <p>$\langle x n\rangle = \psi_n(x) = \psi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(y - \frac{d}{dy} \right) \right]^n \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-y^2/2}$</p> <p>$\cdot H_n(y) = e^{y^2/2} \left(y - \frac{d}{dy} \right)^n e^{-y^2/2}$ (*) Hermite polynomials!</p>
--	--

Principales características de las soluciones

→ En el límite de ∞ soluciones, las energías podrían estar muy cerca.

* No van a haber muchas soluciones a esto en la base momento.

① La energía está cuantizada

no depende de la base

La solución algebraica viene de la existencia de un estado fundamental y por el proc. para generar el resto de los estados con una energía natural $\hbar\omega$ en contraste, → q la sol. analítica, viene de referir $\Psi(x) \rightarrow \infty$ $\rightarrow 0$
depende de la base

② Los niveles están espaciados uniformemente

→ Permite pensar en partículas ficticias "cuantos" con energía $\hbar\omega$.

③ La energía más baja es $\hbar\omega_1$ (no 0).

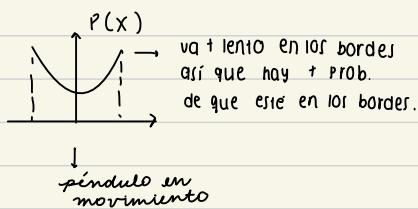
↓

viene de $[x, p] \neq 0$

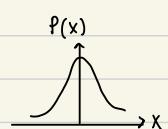
④ Las sols. en repr. coord. contienen potencias x que pueden ser pares o impares
↳ depende de si n es par o impar.

⑤ La función de onda no se anula más allá de los puntos de retorno de la trayectoria clásica.

⑥ La distrib. de prob. es muy diferente de la "clásica".

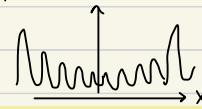


≠ Para el estado fundamental:



Estado muy excitado:

↓
la prob. más alta no necesariamente
es en un min de potencial. depende
del estado.



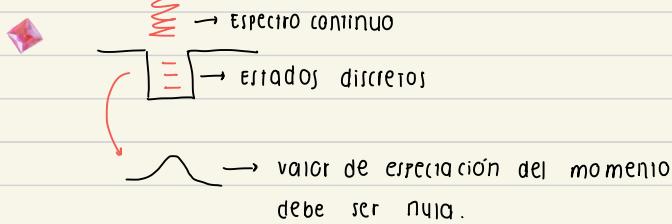
CONTROL

- ✿ La combinación lineal de autoestados no necesariamente es autoestado.
- ① La suma de vectores es una op. que devuelve otro el. del espacio. \rightarrow Comb. lineal vive en el espacio.
- ② $H|\psi_1\rangle = E_1|\psi_1\rangle$
 $H|\psi_2\rangle = E_2|\psi_2\rangle$

$$\hookrightarrow H(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1 E_1 |\psi_1\rangle + c_2 E_2 |\psi_2\rangle$$

$\neq \text{de} \cdot (c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle)$

\hookrightarrow en general.



Simetrías

<p>* Notebook : IA ↓ Hacer preguntas del paper. → Podcast.</p> <p>Contenidos :</p> <ul style="list-style-type: none"> * Simetrías * Rotaciones y momento angular. <p>dinámica del estado no cambia momento no cambia. ←</p>	<p>Invariancia de traslación espacial</p> <p>Intuición: en la mec. cuántica los <u>valores de expectación</u> deberían jugar el rol de las variables clásicas.</p>	
	<div style="border: 1px solid black; padding: 2px; margin-bottom: 5px;">Mec. clásica</div> <p>traslación $x \rightarrow x + \varepsilon$ $p \rightarrow p$</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 2px; margin-bottom: 5px;">INVIARIANCIA</div> <p>de traslación $\mathcal{H}_0 \rightarrow \mathcal{H}_0$</p> <p>Ley de conservación $\dot{p} = 0$</p>	<div style="border: 1px solid black; padding: 2px; margin-bottom: 5px;">Mec. cuántica</div> <p>$\langle x \rangle \rightarrow \langle x \rangle + \varepsilon$ → dos puntos de vista $\langle p \rangle \rightarrow \langle p \rangle$</p> <p>$\langle H \rangle \rightarrow \langle H \rangle$</p> <p>$\langle p \rangle = 0 \rightarrow$ la derivada del val. de expectación de p.</p>
		<p>① Esquema activo:</p> <p>Infinitesimal $\psi\rangle \rightarrow \psi_\varepsilon\rangle$</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; margin-bottom: 10px;"> $\langle \psi_\varepsilon x \psi_\varepsilon \rangle = \langle \psi x \psi \rangle + \varepsilon$ ★ $\langle \psi_\varepsilon p \psi_\varepsilon \rangle = \langle \psi p \psi \rangle$ </div> <p>Definimos:</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; margin-bottom: 10px;"> $T(\varepsilon) \psi\rangle = \psi_\varepsilon\rangle$ $\langle \psi T^\dagger(\varepsilon) x T(\varepsilon) \psi \rangle = \langle \psi x \psi \rangle + \varepsilon$ *</div> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; margin-bottom: 10px;"> $\langle \psi T^\dagger(\varepsilon) p T(\varepsilon) \psi \rangle = \langle \psi p \psi \rangle.$ </div>
<p>Trasla de la mesa y el lab. está quieto.</p> <p>Trasla de el lab. y la mesa se queda quieta.</p>	<p>② Esquema pasivo:</p> <div style="display: flex; justify-content: space-between;"> <div style="width: 45%;"> $x \rightarrow T^\dagger(\varepsilon) x T(\varepsilon)$ $p \rightarrow T^\dagger(\varepsilon) p T(\varepsilon)$ </div> <div style="width: 45%;"> <p>de manera que</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; margin-bottom: 5px;"> $T^\dagger(\varepsilon) x T(\varepsilon) = x + \varepsilon I$ </div> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; margin-bottom: 5px;"> $T^\dagger(\varepsilon) p T(\varepsilon) = p.$ </div> </div> </div>	
<p>OP. de similitudad</p> <p>$U \rightarrow C^\dagger U C$</p> <p>Si C es unitaria</p> <p>$C^\dagger U C$</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; margin-bottom: 5px;"> <p>si x es Hermitiano, T^\dagger preserva la Hermitidad</p> </div> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; margin-bottom: 5px;"> <p>sólo Hermitianos</p> </div>	<p>★★ → * es directo.</p> <p>* → ★★</p> <p>reescribir *</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; margin-bottom: 5px;"> $\langle \psi T^\dagger(\varepsilon) x T(\varepsilon) - x - \varepsilon I \psi \rangle = 0 \rightarrow$ si $\psi\rangle$ es arbitrario </div> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; margin-bottom: 5px;"> $\langle \psi T^\dagger(\varepsilon) p T(\varepsilon) - p \psi \rangle = 0$ </div>	

Luego, dado que $|y\rangle$ es arbitrario:

$$T^\dagger(\epsilon) \times T(\epsilon) - x - \epsilon I = 0$$

Luego * y $\star\star$ son equivalentes.

• T op. de traslació →
↓ en la base políp.

$T(\epsilon)$ en el esquema activo

$$T(\epsilon)|x\rangle = e^{ig(x)\epsilon/\hbar}|x+\epsilon\rangle$$

↓ Fase

$$\cdot \epsilon \rightarrow 0, T(\epsilon)|x\rangle \rightarrow |x\rangle$$

$T(\epsilon)$ es unitaria

$$\langle x \rangle \rightarrow \langle x \rangle + \epsilon$$

$$\langle p \rangle \rightarrow \langle p \rangle + \epsilon \underbrace{\langle g'(x) \rangle}_{\text{debe ser } 0.}$$

· Exigiendo que $\langle p \rangle \rightarrow \langle p \rangle$

· vemos que $g(x)$ debe ser a lo más una constante que en particular podemos elegir igual a cero.

Ahora que sabemos cómo actúa en una base, sabemos cómo opera sobre cualquier $|y\rangle$.

$$|\gamma_\epsilon\rangle = T(\epsilon)|y\rangle = T(\epsilon) \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle \langle x| y \rangle dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} |x+\epsilon\rangle \langle x| y \rangle dx$$

$$T(\epsilon)|y\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |x'\rangle \underbrace{\langle x - \epsilon| y \rangle}_{\gamma(x'-\epsilon)} dx'$$

$$\Rightarrow \langle x | T(\epsilon) | y \rangle = \gamma(x - \epsilon)$$

Puede probarse que

$$\langle y | T^\dagger(\epsilon) P T(\epsilon) | y \rangle = \langle y | P | y \rangle$$

se satisface

$$T(\epsilon)|x\rangle = |x+\epsilon\rangle$$

Ahora que pudimos definir la op. de traslación podemos def. invariancia traslacional.
para ello pedimos,

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi_\epsilon | H | \psi_\epsilon \rangle$$

$$\text{desarrollamos } T(\epsilon), \quad T(\epsilon) = I - \frac{i\epsilon}{\hbar} G$$

↳ Generador de traslaciones.

ENCONTRAMOS G usando:

$$\langle x | T(\epsilon) | \psi \rangle = \psi(x - \epsilon)$$

↓ Desarrollo a 1º orden.

$$\langle x | \cancel{I} | \psi \rangle - \frac{i\epsilon}{\hbar} \langle x | G | \psi \rangle = \psi(x) - \frac{d\psi}{dx} \epsilon$$

$$\Rightarrow \langle x | G | \psi \rangle = -i\hbar \frac{d\psi}{dx}$$

G es el op. momento.

Luego,

$$T(\epsilon) = I - \frac{i\epsilon}{\hbar} P. \quad \rightarrow \text{vale para } \epsilon \text{ infinitesimal.}$$

La ley de conservación del momento sigue a la invariancia ante traslaciones

$$\begin{aligned} \langle \psi | H | \psi \rangle &= \langle \psi_\epsilon | H | \psi_\epsilon \rangle \\ &= \langle T(\epsilon) \psi | H | T(\epsilon) \psi \rangle \\ &= \langle \psi | T^\dagger(\epsilon) H T(\epsilon) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | (I - \frac{i\epsilon}{\hbar} P)^\dagger H (I - \frac{i\epsilon}{\hbar} P) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | H | \psi \rangle + \underbrace{\frac{i\epsilon}{\hbar} \langle \psi | [P, H] | \psi \rangle}_{\text{debe ser } 0} + O(\epsilon^2) \end{aligned}$$

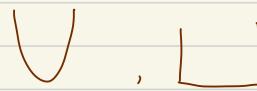
Luego, $\langle \psi | [P, H] | \psi \rangle = 0$

Del Teo. de Ehrenfest:

$$\langle [P, H] \rangle = 0$$

$$\Rightarrow \langle P \rangle = 0 \quad \therefore \text{El momento se conserva.}$$

Ej



→ No es invariante
ante traslaciones.

· Poi. periódicos:



→ simetría de traslación discreta → trasladar en múltiplos
(queda limitado) enteros del periodo

↓

· Part. libre: simetría de traslación.

Tiene menos simetrías
trasladar que el continuo

Traslaciones finitas

7 Oct 24

$$T(q) \xrightarrow[\text{finito}]{} \left\{ \begin{array}{l} N \text{ traslaciones de} \\ q/N. \end{array} \right.$$

Dividir en N subintervalos de tamaño $\frac{q}{N}$.

$$\cdot T(q) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[T\left(\frac{q}{N}\right) \right]^N = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(I - \frac{iqP}{\hbar N} \right)^N = e^{-iqa/\hbar}$$

lo que cambia es este operador.

Se puede probar
con lo anterior.

$$\text{Podemos ver que } T(a)T(b) = T(b)T(a) = T(a+b)$$

Teo. de Bloch (1D)



$$V(x) = V(x + a) \quad \text{pot. periódico}$$

Entonces existe un conjunto completo de sols. del problema $H\psi(x) = E\psi(x)$ de la forma

$$\psi_{n\vec{k}}(x) = e^{i\vec{k}x} u_{n\vec{k}}(x)$$

n : índice de banda

\vec{k} : vector de onda donde $u_{n\vec{k}}(x) = U_{n\vec{k}}(x+a)$

las sols. li pueden elegir con $-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$

Invariancia de paridad

· Clásicamente (en 1D), la op. de paridad corresponde

$$x \longrightarrow -x$$

paridad

$$p \rightarrow -p$$

En mec. cuántica, la acción del op. de paridad resulta más fácil en la representación coordenada.

$$\begin{aligned}\pi|x\rangle &= |-x\rangle \\ \pi|p\rangle &= |-p\rangle\end{aligned}$$

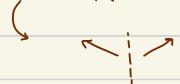
se como actua sobre
cualquier estado.

$\{ |x\rangle \}$ es base

$|\gamma\rangle$ arbitrario

$$\begin{aligned}\pi|\gamma\rangle &= \pi \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle \langle x | \gamma \rangle dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} |-x\rangle \langle x | \gamma \rangle dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} |x'\rangle \langle -x' | \gamma \rangle dx'\end{aligned}$$

la imagen especular
de $\gamma(x)$



$$\Rightarrow \langle x | \pi | \gamma \rangle = \gamma(-x)$$

Propiedades

$$\begin{aligned}① \quad \pi &= \pi^{-1} \rightarrow \pi^2 |x\rangle = \pi |\gamma\rangle = |x\rangle \\ &\Rightarrow \pi^2 = I \Rightarrow \pi = \pi^{-1}\end{aligned}$$

② Los autovalores de π son ± 1 . \rightarrow Los autovalores con ± 1 se dicen pares/impares.

③ π es Hermitiano y unitario



$$④ \quad \pi^{-1} = \pi^\dagger = \pi$$

En el esquema pasivo:

$$\pi^\dagger x \pi = -x$$

$$\pi^\dagger p \pi = -p$$

Un sistema con $H(x, p)$ se dice que es **invariante ante paridad** si:

$$\pi^\dagger H(x, p) \pi = H(-x, -p) = H(x, p)$$

En este caso $[\pi, H] = 0$

Luego, existe una base común de H y π .

$x \neq 0$ no hay degeneración

Invariancia de traslación temporal

Preparo un sistema en un estado $|y_0\rangle$ al tiempo t_1 y lo dejo evolucionar durante un intervalo δt (infinitesimal)

$$|\psi(t+\delta t)\rangle = \left[I - \frac{i\delta t}{\hbar} H(t_1) \right] |\psi_0\rangle$$

op. traslació temp. expandido

Si ahora repito el experimento preparando al tiempo t_2 el sistema en el mismo estado inicial y dejo evolucionar durante un tiempo δt .

de la expansión
del op. traslació
temp. :

$$e^{-itH/\hbar} = I - \frac{itH}{\hbar}$$

$$|\psi(t_2 + \delta t)\rangle = \left[I - \left[\frac{i\delta t}{\hbar} H(t_2) \right] \right] |\psi_0\rangle$$

dado que $|\psi_0\rangle$ es arbitrario, la homogeneidad del tiempo refiere $H(t_1) = H(t_2)$

Luego H es indep. de t

$$\frac{dH}{dt} = 0.$$

El Teo. de Ehrenfest para un op. S que no tiene una dependencia explícita en el tiempo dice que

$$i\hbar \langle \dot{S} \rangle = \langle [S, H] \rangle$$

con $S = H$, en un sistema con simetría de traslació temporal

$$\langle \dot{H} \rangle = 0$$

ley de conservació de la energía

SIMETRÍA de REVERSIÓN TEMPORAL

9-oct

caso sin spin

Wigner 1932

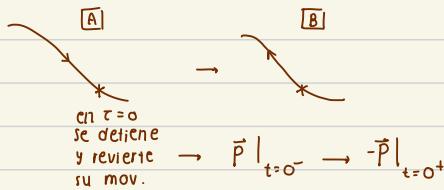
leer notas de simetría de reversión temporal!

L aparece op. antiunitario

*SPIN se ve en cuántica 2.

Simetría discreta

Mecánica clásica



- Si $\vec{r}(t)$ es una solución de un $\ddot{\vec{r}} = -\nabla V(\vec{r})$

$\vec{r}(-t)$ también es una sol. (pensamos que la fuerza es no dissipativa).

↓ \vec{F} como ∇V

Es difícil saber o determinar cuál (A o B) es verdadera.

- Este no es el caso en presencia de un campo magnético B .

la fza. de lorentz $F = e[\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}]$

es invariante entre $t \rightarrow -t$ si

$$\vec{E} \rightarrow \vec{E} \quad \wedge \quad \vec{B} \rightarrow -\vec{B}$$

$$*\rho \rightarrow \rho$$

$$j \rightarrow -j$$

$$\vec{v} \rightarrow -\vec{v}$$

Mecánica cuántica

pensemos en una part. en 1D en un pot. dependiente del tiempo.

La ec. de Schrödinger en repr. coord. es:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = H \psi(x,t)$$

$\psi(x,-t)$ no es una sol.

$\psi^*(x,-t)$ sí es sol. \rightarrow cambia \vec{p} por $-\vec{p}$.

La reversión temporal está relacionada con conjugación.

$$H = H^*(x)$$

si H tiene simetría de reversión temporal es reqd.

time reversal invariance.

Hay interacciones que no satisfacen TRI a nivel fundamental \rightarrow campos magnéticos.

Puede mostrarse que el operador de reversión temporal (digamos Θ) es anti-unitario.

L, un op. anti-unitario puede escribirse como un producto de un op. unitario U y el op. de conjugación K

↳ tal que $K|c|\psi\rangle = c^* K|\psi\rangle$

↓

↳ lo hace antiunitario

$$\Theta(c_1|\gamma_1\rangle + c_2|\gamma_2\rangle) = U K c_1 |\gamma_1\rangle + U K c_2 |\gamma_2\rangle \\ = c_1^* U K |\gamma_1\rangle + c_2^* U K |\gamma_2\rangle = c_1^* \Theta |\gamma_1\rangle + c_2^* \Theta |\gamma_2\rangle$$

Puede verse también que

$$H\Theta = \Theta H \quad [H, \Theta] = 0$$

↓

Esta relación no da lugar a una ley de conservación dado que:

$$\Theta U(t, t_0) \neq U(t, t_0) \Theta \rightarrow \text{por la conjugación del exponente imaginario de la exponencial.}$$

Luego no hay un "número cuántico" acr. a la invarianza de reversión temporal.



Pero sí hay consecuencias



Degeneración de Kramers

"En un sistema compuesto por un nro impar de electrones en un campo eléctrico E cada nivel debe estar al menos doblemente degenerado".

Traslaciones en 2D.



usando los mismos argumentos que antes puede verse que el generador de traslaciones en

2D es

$$\vec{P} = P_x \hat{i} + P_y \hat{j}$$



Proyectar sobre la dirección de traslación.

$$[\vec{P} \cdot \hat{n}]$$

generador de traslación en la dirección \hat{n}

$$P_x \xrightarrow[\text{base coord.}]{\text{coord.}} -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$P_y \longrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$$

$$T(\vec{q}) = e^{-i\vec{q} \cdot \vec{P}/\hbar} = e^{-i\vec{q} \cdot \vec{P}/\hbar} = e^{-i\vec{q} \cdot \vec{P}/\hbar} \quad \left[\hat{q} \equiv \frac{\vec{q}}{q} \right]$$

Debe satisfacerse que

$$T(\vec{b}) T(\vec{a}) = T(\vec{a}) T(\vec{b})$$

$$\Rightarrow e^{-i\vec{b} \cdot \vec{P}/\hbar} e^{-i\vec{a} \cdot \vec{P}/\hbar} = e^{-i(\vec{a} + \vec{b}) \cdot \vec{P}/\hbar}$$

eso si ocurre ✓ ← para que esto valga, p_x y p_y deben commutuar

* similar en 3D.

Operador vectorial

· decimos que $\vec{V} = V_x \hat{i} + V_y \hat{j}$ es un op. vectorial si V_x y V_y transforman como las componentes de un vector ante una transformación pasiva generada por $U[R]$.

$$U^\dagger[R] \underbrace{V_i}_{\text{Transformación asociada}} U[R] = \sum_j R_{ij} V_j \quad \text{operadores}$$

Rotaciones en 2D

14 oct.

ángulo
↑ eje

· Clásicamente, el efecto de una rot. φ alrededor del eje es:

* Es un cambio de base

$$\underline{\text{coord}} \quad \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \tilde{x} \\ \tilde{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

$$\underline{\text{momento}} \quad \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \tilde{p}_x \\ \tilde{p}_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \end{bmatrix}$$

En mec. cuántica

cambio el estado \leftarrow

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi_R\rangle = U[R] |\psi\rangle$$

$U[R]$

$|\psi_R\rangle$ debe satisfacer

Ehrenfest (\leftarrow se tiene que cumplir la expectativa clásica para los val. de esperado)

$$\langle x \rangle_R = \langle x \rangle \cos \varphi - \langle y \rangle \sin \varphi$$

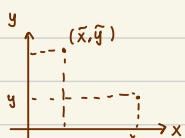
$$\langle y \rangle_R = \langle x \rangle \sin \varphi + \langle y \rangle \cos \varphi$$

$$\langle p_x \rangle_R = \langle p_x \rangle \cos \varphi - \langle p_y \rangle \sin \varphi$$

$$\langle p_y \rangle_R = \langle p_x \rangle \sin \varphi + \langle p_y \rangle \cos \varphi$$

↓

$U[R]$ implícito en estas ecuaciones.



$$U[R] |x, y\rangle = |x \cos \varphi - y \sin \varphi, x \sin \varphi + y \cos \varphi\rangle$$

autoestado de la pos. (x, y) en el plano

Forma explícita de $U[R]$

Pensemos en una rot en un ángulo infinitesimal ϵ_z alrededor de \hat{k} .

de dónde salía? *

se origina en

$$U[R(\epsilon_z \hat{k})] = I - \frac{i \epsilon_z}{\hbar} L_z$$

generador de rotaciones infinitesimales.

$$\rightarrow U[R(\epsilon_z \hat{k})] |x, y\rangle = |x - y \epsilon_z, x \epsilon_z + y\rangle$$

completitud

$$(I - \frac{i \epsilon_z L_z}{\hbar}) |\psi\rangle = \left(I - \frac{i \epsilon_z L_z}{\hbar} \right) \left[\iint |x, y\rangle \langle x, y| dx dy \right] |\psi\rangle.$$

$$= \iint \underbrace{|x - y \epsilon_z, x \epsilon_z + y\rangle}_{x' y'} \langle x, y| dx dy |\psi\rangle$$

$$\begin{aligned}
 &= \iint_{\mathbb{R}^2} (x', y') \langle x' + y' \varepsilon_z, y' - \varepsilon_z x' | dx' dy' |\psi \rangle \\
 \langle x, y | \left(I - \frac{i\varepsilon_z L_z}{\hbar} \right) |\psi \rangle &= \psi(x + y \varepsilon_z, y - \varepsilon_z x) \\
 \langle x, y | I |\psi \rangle - i \frac{\partial \psi}{\hbar} \langle x, y | L_z |\psi \rangle &= \psi(x, y) + \frac{\partial \psi}{\partial x} y \varepsilon_z + \frac{\partial \psi}{\partial y} (-\varepsilon_z x) \quad ; \text{ Taylor} \\
 \langle x, y | L_z |\psi \rangle &= \left[x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) - y \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \psi(x, y).
 \end{aligned}$$

Luego

$$L_z \xrightarrow{\substack{\text{en representación} \\ \text{coordenadas}}} x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) - y \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

Componente z del momento angular!

$$L_z = x p_y - y p_x$$

$$* e^{-p_0 \frac{\partial}{\partial \varphi}} = I + -p_0 \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{p_0^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^2$$

Para una rot. finita

$$\begin{aligned}
 U[R(\varphi_0 \hat{k})] &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(I - \frac{i\varphi_0}{\hbar N} L_z \right)^N \\
 &= \exp(-i\varphi_0 L_z / \hbar)
 \end{aligned}$$

$$\psi(x, y) = \psi(p, \varphi) \longrightarrow \psi(p, \varphi - \varepsilon_z) \rightarrow \text{rotación infinitesimal}$$

$$e^{-p_0 \frac{\partial}{\partial \varphi}} |\psi\rangle$$

$$\exp(-i\varphi_0 L_z / \hbar) \rightarrow \exp(-i\varphi_0 \frac{\partial}{\partial \varphi})$$

$$\exp(-i\varphi_0 \frac{\partial}{\partial \varphi}) \psi(p, \varphi) = \psi(p, \varphi - \varphi_0)$$

desarrollarlo
término a
término

$$\langle p, \varphi | \psi \rangle$$

Interpretación de L_z

L_z puede identificarse como la comp. z del momento angular pues:

- se obtiene de $L_z = x p_y - y p_x$ usando la sustitución del postulado II.
- Es el generador de rot. infinitesimales alrededor de z.

$$\Rightarrow \psi(p, \varphi - \varphi_0)$$

L_z es una cant. conservada en un problema con invarianza de rotación alrededor de z .

De hecho, si:

$$U^\dagger[R] H U[R] = H$$

se sigue que

$$[L_z, H] = 0.$$

La conservación de L_z implica que:

- 1) Un ψ y su versión rotada deben dar el mismo resultado.
- 2) Existe una base común de H y L_z .

Propiedades

$$[P_x, L_z] = -i\hbar P_y$$

$$[P_y, L_z] = i\hbar P_x$$

Problema de autovalores de L_z

$$L_z |\psi_z\rangle = l_z |\psi_z\rangle$$

en la base coord.

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi_{l_z}(p, \varphi) = l_z \psi_{l_z}(p, \varphi)$$

que tiene sols..

$$\psi_{l_z}(p, \varphi) = R(p) e^{il_z \varphi/\hbar}$$

función arbitraria y normalizable $\int_0^\infty |R(p)|^2 p dp$

para imponer alguna \leftarrow

condición general para l_z

impongo hermiticidad

$$\langle \psi_1 | L_z | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | L_z | \psi_1 \rangle^*$$

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \psi_1^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \psi_2 p d\varphi d\psi = \left[\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \psi_1^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \psi_2 p d\varphi d\psi \right]^* \quad \text{debe satisfacerse}$$

A ψ_1, ψ_2

es suficiente si ψ_1 y ψ_2 satisfacen:

$$\psi(p, 0) = \psi(p, 2\pi) \quad \rightarrow \quad 1 = e^{i l_z 2\pi/\hbar} \Rightarrow l_z = m\hbar \quad , \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

"nº cuántico magnético"

Introducimos:

$$\tilde{\Phi}_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad \text{autofunc. de } L^2$$

$$\int_0^{2\pi} \tilde{\Phi}_m^*(\varphi) \tilde{\Phi}_m(\varphi) d\varphi = \delta_{m,m}$$

Si ignoramos la coord. radial.

► Lunes: Rotación 2D & Escribirlo!

► Miércoles:

► Solución a problemas con invariancia de rotación 2D

$$\nabla(p, \theta) = V(p)$$

El problema de autovalores para H es:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\partial_{pp} + \frac{1}{p} \partial_p + \frac{1}{p^2} \partial_{\theta\theta}\right) + V(p)\right) \Psi_E(p, \theta) = E \Psi_E(p, \theta)$$

Dado que $[H, L_z] = 0$, buscamos soluciones simultáneas de H y L_z

La solución más general de L_z tiene la forma:

$$\Psi_m(p, \theta) = R(p) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\theta} = R(p) \Phi_m(\theta)$$

En nuestro caso, $R(p)$ queda determinado por el requerimiento de que:

$$\Psi_{E,m}(p, \theta) = R_{E,m}(p) \Phi_m(\theta)$$

es también solución del problema de autovalores.

↳ Reemplazando en la ecuación, obtengo:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\partial_{pp} + \frac{1}{p} \partial_p - \frac{m^2}{p^2}\right) + V(p)\right) R_{E,m} = E R_{E,m}$$

► Momento angular en 3D

► Ahora puede rotar en x e y también

$$L_x = Y P_z - Z P_y$$

$$L_y = Z P_x - X P_z \quad \rightarrow \text{Generadores de rotaciones infinitesimales}$$

$$L_z = X P_y - Y P_x$$

Uno puede verificar que

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \quad \vec{L} \times \vec{L} = i\hbar \vec{L}$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x \quad [\vec{L}_i, \vec{L}_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} L_k$$

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

$\therefore \vec{L} = (L_x, L_y, L_z) \rightarrow \text{Operador momento angular}$
 Tambien son operadores

Ahora definimos:

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

uno puede ver que

$$[L^z, L_i] = 0$$

$\theta \hat{\theta}$. para una rot. en un ángulo θ alrededor del eje $\hat{\theta}$ el generador es

$$\vec{L} \cdot \hat{\theta} = L_{\hat{\theta}} \quad \text{donde} \quad \hat{\theta} = \frac{\theta}{\hbar}$$

lo cual implica que

$$U[R(\theta)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(I - \frac{i}{\hbar} \frac{\theta \hat{\theta} \cdot \vec{L}}{N} \right)^N = e^{-i\theta \hat{\theta} \cdot \vec{L}/\hbar}$$

$$U[R(\theta)] = e^{-i\hat{\theta} \cdot \vec{L}/\hbar}$$

· Si H es invariante ante rotaciones:

$$U^\dagger [R] H U [R] = H$$

→ H con TRS (simetría de reversión temporal)

$$U^\dagger H U = H$$

↳ $\mathcal{H}(t)$ tiene TRS si $\exists t_0 / \mathcal{H}_0(t-t_0) = \mathcal{H}_0(t+t_0) \rightarrow$ Igual depende del tiempo.

↳ NO ocurre esto si son 2 funciones sinusoidales fuera de fase.

$$[H, L_i] = 0, \quad i = x, y, z \quad \rightarrow \text{Pero no puedo encontrar una base común}$$

$$[H, L^2] = 0 \quad \text{simultáneamente porque no comutan de a pares. } ([L_i, L_j] \neq 0)$$

Consideramos entonces una base común de H , L^2 y L_z .

Problema de autovalores de H , L^2 y L_z

$$L^2 |\alpha, \beta\rangle = \alpha |\alpha, \beta\rangle$$

$$L_z |\alpha, \beta\rangle = \beta |\alpha, \beta\rangle \quad \rightarrow \text{Hay que elegir solo 1}$$

Definimos:

$$L_{\pm} = L_x \pm i L_y$$

$$\text{que satisfacen } [L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm}$$

(como es L^2 , sus
autoval. no pueden
ser negativos)

(es un autoestado)

L^2 commuta con L_x y L_y y luego $[L^2, L_z] = 0$

$$\begin{aligned} L_z(L_+|\alpha, \beta\rangle) &= (L_+L_z + \hbar L_+) |\alpha, \beta\rangle = (\beta L_+ + \hbar L_+) |\alpha, \beta\rangle \\ &= (\beta + \hbar) L_+ |\alpha, \beta\rangle \end{aligned}$$

Luego

$L_+ |\alpha, \beta\rangle$ es un autovector
de L_z con autovalor $\beta + \hbar$.

De manera similar

$L_- |\alpha, \beta\rangle$ es un autovector de L_z con autovalor $\beta - \hbar$.
Por otro lado,

$$L^2 L_+ |\alpha, \beta\rangle = L_+ L^2 |\alpha, \beta\rangle = \alpha L_+ |\alpha, \beta\rangle$$

Luego, vemos que

$$L_+ |\alpha, \beta\rangle = C_+(\alpha, \beta) |\alpha, \beta + \hbar\rangle$$

$$L_- |\alpha, \beta\rangle = C_-(\alpha, \beta) |\alpha, \beta - \hbar\rangle.$$

Aplico L_+ ó L_- a $|\alpha, \beta\rangle$

$$|\alpha, \beta + 1\rangle \dots |\alpha, \beta + z\rangle \dots$$

$$|\alpha, \beta - 1\rangle \dots |\alpha, \beta - z\rangle \dots$$

Clásicamente $|L_z| \leq (L^2)^{1/2} \rightarrow$ el módulo de la proyección es menor al vector.

en mec. cuántica

$$\langle \alpha, \beta | L^2 - L_z^2 | \alpha, \beta \rangle$$

$$\Rightarrow \alpha - \beta^2 \geq 0.$$

$$\Rightarrow |\alpha| \geq |\beta|^2 \rightarrow \exists \text{ un } \beta \text{ máximo para un } \alpha$$

Luego, debe existir un estado $|\alpha, \beta_{\max}\rangle$ tal que no puede "subirse" más

$$L_+ |\alpha, \beta_{\max}\rangle = 0$$

$$(L^2 - L_z^2 - \hbar L_z) |\alpha, \beta_{\max}\rangle = 0$$

$$(\alpha - \beta_{\max}^2 - \hbar \beta_{\max}) |\alpha, \beta_{\max}\rangle = 0$$

$$\alpha = \beta_{\max} (\beta_{\max} + \hbar)$$

con L_- :

$$L_- |\alpha, \beta_{\min}\rangle = 0$$



$$\alpha = \beta_{\min} (\beta_{\min} - \hbar)$$

$$\beta_{\max} - \beta_{\min} = \hbar K = 2\beta_{\max}, \quad K=0,1,2\dots$$

$$\beta_{\max} = \frac{\hbar K}{2}$$

¿ $\hbar m$ o $\frac{\hbar m}{z}$?

21 Oct.

prob. autovalores
la proyección no
puede ser mayor, ...

Más general

Rotaciones en 2D.

$m\hbar$ → En base coordenada → resolución de ec. diferencial para L_z

$\frac{m\hbar}{z}$ → sin base específica.

Info de los comutadores.

→ Resolución para \vec{J} (momento angular generalizado).

$$\vec{J} \times \vec{J} = \hbar \vec{J}$$

L_z

$[\vec{r} \times \vec{p}]_z$ → Orbital
(mov. de la part. en el espacio)

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

momento
angular
orbital

momento
angular
intrínseco.

("spín") → cambia la paridad

↓
sin correlación clásico.

Teoría permite valores semienteros.

funciones de onda para cada proyección de spín.

Calculamos las comp.

de los autoestados L_+

y L_-

Autoestados / forma de matriz \vec{J}

$$J_{\pm} |j, m\rangle = C_{\pm}(j, m) |j, m \pm 1\rangle$$

a determinar

$$J_+ |j, m\rangle = C_+(j, m) |j, m+1\rangle$$

(adjunto)

$$\langle j, m | J_- = C_+^*(j, m) \langle j, m+1 |$$

$$\langle j, m | J_- J_+ | j, m \rangle = |C_+(j, m)|^2$$

$$= J^2 - J_z^2 - \hbar J_z$$

$$\rightarrow |C_+(j, m)|^2 = j(j+1)\hbar^2 - (m\hbar)^2 - \hbar^2 m$$

$$C_+(j, m) = \sqrt{\hbar^2(j-m)(j+m+1)}$$

$m\hbar \rightarrow \vec{L}$ (mom. angular orbital)

$\frac{m\hbar}{z} \rightarrow \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ (orbital + intrínseco)

Similarmente,

$$C_{-}(j, m) = \sqrt{\hbar^2(j+m)(j-m+1)}$$

$$\rightarrow J_{\pm} |j, m\rangle = \sqrt{\hbar^2(j \mp m)(j \pm m+1)} |j, m \pm 1\rangle$$

$|j, m\rangle$

$$J_x = \left(\begin{array}{ccc|c} |0,0\rangle & |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle & |\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle & \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \\ 0 & 0 & 0 & 0 0 0 \\ 0 & 0 & \hbar/2 & \\ 0 & \hbar/2 & 0 & \\ \hline & & & 0 \hbar/\sqrt{2} 0 \\ & & & \hbar/\sqrt{2} 0 \hbar/\sqrt{2} \\ & & & 0 \hbar/\sqrt{2} 0 \end{array} \right)$$

→ son diagonales
por bloques.

$$J_y = \left(\begin{array}{ccc|c} 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & \\ 0 & i\hbar/2 & 0 & \\ \hline 0 & i\hbar/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

Si fuera ≠, estaría
cambiando el momento
angular total.

xq J^2 commuta con J_x y J_y
↳ x eso es diagonal x bloques

Las relaciones de commutación como $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$
se satisfacen dentro de cada bloque.

$$[J_x^{(j)}, J_y^{(j)}] = i\hbar J_z^{(j)}, \quad j=0, \frac{1}{2}, 1, \dots$$

↓

bloque de dimensión

$$(2j+1) \times (2j+1).$$

★ Sin leer

Base $|j, m\rangle$
 $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$

$m = -j, -j+1, \dots, j$
con pasos de a 1.
(degeneración).

para $j=0, m=0$

" $j=\frac{1}{2}, m=-\frac{1}{2} \vee m=\frac{1}{2}$

" $j=1,$

$m=-1 \vee m=0 \vee m=+1$

$$J^2 = \left(\begin{array}{ccc|ccc|c} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & \frac{3}{4}\hbar^2 & 0 & 0 & & & \\ 0 & 0 & \frac{3}{4}\hbar^2 & 0 & & & \\ \hline 0 & & & 2\hbar^2 & 0 & 0 & \\ 0 & & & 0 & 2\hbar^2 & 0 & \\ 0 & & & 0 & 0 & 2\hbar^2 & \\ \hline & & & & & & \ddots \end{array} \right)$$

Autofunciones del momento angular en repr. coordenada

$$L_+(l, l) = 0$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) Y_l^l(r, \theta, \varphi) = 0$$

$$Y_l^l(r, \theta, \varphi) = U_l^l(r, \theta) e^{il\varphi}$$

$$\rightarrow \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - l \cot \theta \right) U_l^l = 0$$

$$\rightarrow \frac{dU_l^l}{U_l^l} = l \frac{d(\sin \theta)}{\sin \theta}$$

$$\rightarrow U_l^l(r, \theta) = R(r)(\sin \theta)^l$$

↓
f_n arbitraria normalizable

$$Y_l^l(\theta, \varphi) = (-1)^l \left[\frac{(2l+1)!}{4\pi} \right]^{1/2} \frac{1}{2^l l!} (\sin \theta)^l e^{il\varphi}$$

• $L_x \rightarrow i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$
base word.

$L_y \rightarrow i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$

$L_z \rightarrow \pm \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$

$$\cdot \int Y_l^m(\theta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi) d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l C_l^m(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

$$\cdot C_l^m(r) = \int Y_l^m(\theta, \varphi)^* \Psi(r, \theta, \varphi) d\Omega.$$

Solución a problemas con invariancia de rotación

4.nov.

Anotar fórmulas 2D y 3D.
→ polares y esféricas.

$$\vec{\mathcal{L}} = \vec{r} \times \vec{p} \rightarrow \hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \rightarrow \text{momento angular en cuántica.}$$

$$V(r, \theta, \varphi) = V(r)$$

Ec. de Schrodinger indep. del tiempo.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + V(r) \right] \Psi_E(r, \theta, \varphi) = E \Psi_E(r, \theta, \varphi).$$

$$[H, \vec{L}] = 0$$

$$\text{buscamos soluciones comunes a } H, L^2 \text{ y } L_z: \Psi_{E, l, m}(r, \theta, \varphi) = R_{E, l, m}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

Ec. parte radial

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] + V(r) \right\} R_{E, l, m}(r) = E R_{E, l, m}(r)$$

masa de la partícula.

↓ no aparece $m \rightarrow$ Dado un l , tengo $2l+1$ posibles valores para m (degeneración)

↓ degeneración $(2l+1)$ para los autovalores de H .

$$R_{E, l} \equiv \frac{U_{E, l}}{r}$$

El dominio de r es el acotado $r \in [0, \infty)$

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] \right\} U_{E, l} = 0$$

como una ec. de Schrödinger en 1D pero con término adicional

↓ condición de contorno

+

dominio de los r :

$$r \in [0, \infty)$$

. U satisface:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] U_{E, l} = D_l(r) U_{E, l} = E U_{E, l}$$

equivalente al Hamiltoniano.

Si U_1 y U_2 son dos soluciones, pedimos que D_l sea Hermitiano

$$\int_0^\infty U_1^* (D_l U_2) dr = \left[\int_0^\infty U_2^* (D_l U_1) dr \right]^* = \int_0^\infty (D_l U_1)^* U_2 dr$$

lo cual se reduce a la condición:

$$\left(U_1 \frac{dU_2}{dr} - U_2 \frac{dU_1^*}{dr} \right) \Big|_0^\infty = 0 \quad \text{chequearlo como ejercicio.} \quad (*)$$

diferencial
de val!

(Parte radial separada
de la angular ($\sin 4\pi$))

$$\text{Pedimos } \int_0^\infty |R_{E, l}|^2 r^2 dr = \int_0^\infty |U_{E, l}|^2 dr \text{ sea normalizable a 1 } \Rightarrow \text{la delta de Dirac.}$$

$$U_{E,l} \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{ } 0 \quad \text{Estados ligados}$$

$$U_{E,l} \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{ } e^{kr} \quad \text{Estados no ligados.}$$

En cualquiera de ambos casos puede probar que \star se cumple en el límite superior ($r \rightarrow \infty$) y la condición se transforma en:

$$\left[U_1^* \frac{dU_2}{dr} - U_2 \frac{dU_1^*}{dr} \right]_{r=0} = 0 \quad \rightarrow \text{se satisface si}$$

$$U \xrightarrow[r \rightarrow 0]{c} c$$

diverge en el origen.

$$\rightarrow \text{Si } c \neq 0 \text{ entonces } R \sim \frac{U}{r} = \frac{c}{r}$$

Pero

$$\psi \sim \frac{c}{r} Y_0^0 \quad \text{no satisface la ec. de Schrödinger en } r=0 \quad \text{dado que } \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) = -4\pi \delta^3(\vec{r})$$

Luego, a menos que $V(r)$ contenga una delta de Dirac con $r=0$, $c \neq 0$ no es una opción válida.

Luego, en general: $U_{E,l} \xrightarrow[r \rightarrow 0]{ } 0$

PROPS. generales de $U_{E,l}$

① Comportamiento en $r \rightarrow 0$:

Supongamos que $V(r)$ es menos singular que $1/r^2$. \rightarrow Ejemplo: V_r , cuando $r \rightarrow 0$, $\frac{1}{r}$ es menor a $\frac{1}{r^2}$.

↓
La ec. es dominada por el término centrífugo:

$$U_E^* \approx \frac{l(l+1)}{r^2} U_l \quad \rightarrow \text{El subíndice } E \text{ no importa}$$

Proponemos sojs. de la forma $U_l \sim r^\alpha$

$$\Rightarrow \alpha(\alpha-1) = l(l+1)$$

$$\Rightarrow \alpha = l+1 \quad v \quad \alpha = -l$$

$$U_l \sim \begin{cases} r^{l+1} & \rightarrow \text{regular} \\ \cancel{r^{-l}} & \rightarrow \text{irregular no obedece } U(0)=0. \end{cases}$$

② Comportamiento cuando $r \rightarrow \infty$

Si $V(r)$ no se anula cuando $r \rightarrow \infty$ entonces dominará el comportamiento.

* $\left[E - V - \frac{l(l+1)}{r^2} \right]$
 ↓
 no nos importan los factores, sólo la forma general.

* función con $\lambda \neq 0$.

$V(r) \rightarrow 0$ es el

pot. de Coulomb.

↓
Part. nunca se llega a liberar
del potencial.

Pensemos que $rV(r) \rightarrow 0$ $\underset{r \rightarrow \infty}{}$

En este caso,

$$\frac{d^2 U_E}{dr^2} = -\frac{2\mu E}{\hbar^2} U_E$$

Ⓐ $E > 0$

Ⓑ $E < 0 \rightarrow$ Estados ligados.

Ⓐ $U_E = A e^{ikr} + B e^{-ikr} ; k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$

$k = \sqrt{\frac{2\mu |E|}{\hbar^2}}$

↓ va al otro eje en el plano complejo.

Ⓑ $E < 0 : k \rightarrow ik$

$$U_E \rightarrow A e^{-kr} + B \cancel{e^{kr}}$$

↓ para que sea normalizable a 1.

Átomo de Hidrógeno

6.nov.

* revisar notas
part. libre

$+e$ $-e$
 $+M$ $-m$

$\frac{m}{M} \ll 1$

$\sim \frac{1}{2000}$

$\cdot V(r) = -e^2/r$

$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{r} - \frac{l(l+1)}{2mr^2} \hbar^2 \right] \right\} U_{E,L} = 0 \quad (\Delta)$

$$\Psi_{E,L,m}(r, \theta, \varphi) = R_{E,L}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{U_{E,L}(r)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi)$$

Estimación de la energía del estado fundamental.

$$\langle \psi_0 | V(r) | \psi_0 \rangle \sim -e^2/r_0 \quad \text{escala característica. Define un tamaño del átomo.}$$

más pequeño cuanto más pequeño es r_0 .

Si la part. está más localizada, el momento está más indeterminado.
 La energía será más grande cuanto más pequeño sea r_0 .

↓
 Energía cinética mínima (compatible con el ppr. de indet.) es
 $\frac{\hbar^2}{2mr_0^2} \rightarrow$ la energía total será al menos la suma de ambas cantidades por eso no tomamos E_0 ...

$$-\frac{e^2}{r_0} + \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} \rightarrow E_0 \approx -\frac{1}{2} \frac{me^4}{\hbar^2} \approx -13,5 \text{ eV.}$$

Minimizando se obtiene

$$r_0^{\text{estimado}} \approx \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0,52 \cdot 10^{-10} \text{ m.}$$

comp. asintótico en $r \rightarrow \infty$ y $r \rightarrow 0$

$r \rightarrow \infty$ despreciamos el término en $1/r^2$

$\hookrightarrow U_E = f(r) e^{\pm ikr}$ asintótico.

reemplazamos en la ecuación.

$$(f'' \pm (2ik)f' - \frac{2\mu_e V(r)}{\hbar^2} f = 0)$$

Suponiendo que f varía lentamente, despreciamos f'' .

$$\frac{df}{f} = \mp \frac{1}{k} \frac{\mu}{\hbar^2} V(r) dr$$

$$f(r) = f(r_0) \left[\mp \frac{i\mu}{k\hbar^2} \int_0^r V(r') dr' \right]$$

algunas de.

$$\rightarrow U_E \sim \exp \left[\pm i \left(kr + \frac{e^2 \mu}{k\hbar^2} \ln r \right) \right]$$

partícula nunca se libera en un potencial Coulombiano.
depende de r

$$U = e^{-\rho} \rho^l \sum_k c_k \rho^k$$

en ∞
en 0.

con
 $E < 0$.

sol. como serie de
potencias.

$$E < 0 \quad k \rightarrow ik, \quad K = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

$$U_E(r) \sim r^{\pm \mu e^2 / K + \epsilon} e^{\mp kr}$$

$$r \rightarrow 0 \quad \rho \equiv \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} r \quad \text{adimensional}$$

$$U_{EQ} \equiv e^{-\rho} U_{E,l} \rightarrow \frac{d^2 U}{d\rho^2} - 2 \frac{dU}{d\rho} + \left[\frac{e^2 \lambda}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] U = 0$$

$$\text{propongo sol. } U_{E,l} = \rho^l \sum_k c_k \rho^k$$

y obtenemos:

$$\frac{c_{k+1}}{c_k} = -e^2 \lambda + 2(k+l+1).$$

$$\text{luego } \frac{c_{k+1}}{c_k} \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \frac{2}{k} \quad \text{que va como}$$

$$e^{2\rho} \quad (\text{ver. cálculo aux}).$$

luego debemos pedir que la serie se cortie en algún punto.

cálculo aux.

$$e^{2\rho} = \sum_{k=0}^{\infty} d_k \rho^k, \quad d_k = \frac{2^k}{k!}$$

$$\frac{d_{k+1}}{d_k} = \frac{2^{k+1} / (k+1)!}{2^k / k!} = \frac{2}{k+1} \sim \frac{2}{K}$$

con K grande.

$$\Rightarrow e^2 \lambda = 2(k+l+1)$$

$$\rightarrow E = \frac{-me^4}{2\hbar^2(k+l+1)^2}, \quad k=0,1,\dots$$

$$l=0,1,\dots$$

defino $n \equiv k+l+1 \rightarrow$ tengo \neq sol. l: degeneración.

$$E_n = \frac{-me^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad n=1,2,\dots$$

↳ sol. sólo dependen de n .

para estados ligados
restricciones para k,l .

posibles valores de m para
cada m para cada l .

Para cada n , los valores posibles de l son.

$$l = n-1, n-2, \dots, 0$$

la degeneración para cada n es $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$

los estados con $l=0, 1, 2, \dots$ se refieren como

s, p, d, f, g, ...

$$\begin{cases} n=1, k=0, l=0 & 1s \\ n=2, l=0, 1 & 2s, 2p \\ & \begin{matrix} 1 \\ 3 \end{matrix} \rightarrow 4 \text{ valores} \\ & 2p \times 3 \end{cases}$$

$$\Psi_{1,0,0} = \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-r/a_0}$$

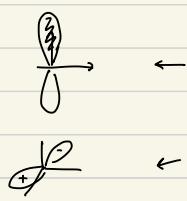
$$\Psi_{2,0,0} = \left(\frac{1}{32\pi a_0^3} \right)^{1/2} (z - \frac{r}{a_0}) e^{-r/2a_0}$$

tiene simetría
de rotación

$$\Psi_{2,1,0} = \left(\frac{1}{32\pi a_0^3} \right)^{1/2} \frac{l}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos\theta$$

No tiene simetría
de rotación.

$$\Psi_{2,1,\pm 1} = \tilde{f} \left(\frac{1}{64\pi a_0^3} \right)^{1/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin\theta e^{\pm i\varphi}$$



parte angular $\rightarrow Y_l^m(\theta, \varphi)$

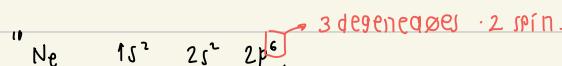
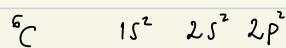
radial $\rightarrow R(r) \rightarrow$ proporcional pre factor de la parte asintótica y la serie.

Para obtener la cuantizac:

· pedímos estados ligados.

$$e^{-\alpha r} \sum_n C_n r^n \rightarrow \frac{C_{n+1}}{C_n} = \frac{\square}{\square} \xrightarrow{\text{numerador se anula para algún } n \text{ · condic. finca.}} \text{para desechar las condiciones no físicas.}$$

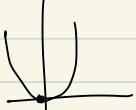
${}^3L_1 \quad 1s^2 \quad 2s^1$ tengo uno con spin $\frac{1}{2}$ y otro $-\frac{1}{2}$



· Átomo hidrogenoide \rightarrow se cambia el z

REPASO

Osc. armónico



↳ Energía no puede ser 0 xq sino $[x, p]$ sería 0 pero no pueden estar ambos definidos.

$$\cdot V \sim x^2$$

· H con forma cuadrática \Rightarrow H es el cuadrado de un op. (ero hacemos para una part. libre)

$$\downarrow$$

$$\text{lo escribimos: } H = \hbar \omega (a^\dagger a + \frac{1}{2})$$

$$\cdot a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \rightarrow \text{sol. li.}$$

$$a|0\rangle = 0 \quad \text{no siempre.}$$

$$\cdot \langle x | n \rangle = \psi_n(x)$$

$$\langle x | n \rangle = \psi_n(p) \rightarrow x q \text{ es simétrico para el H.}$$

Prio. variacional

Minimizamos

$\langle \mathcal{H} \rangle_{\psi_p}$ → hay un parámetro que cambia. ej: ancho de la gaussiana.
que hay que encontrar para que T y V tengan un balance.

$$\langle T \rangle_{\psi_p} \quad \langle V \rangle_{\psi_p}$$

Ej: localizo + la partícula, minimizo el ancho → minimizo V . pero la energía cinética se hace + grande ya que tengo que superponer + y + armónicos.

Fun^o de prueba: cumple propiedades del potencial.

simetrías

$$x \rightarrow x + a \quad \langle x \rangle \rightarrow \langle x \rangle + a$$

$$p \rightarrow p \quad \langle p \rangle \rightarrow \langle p \rangle$$

traslació infinitesimal: $T(x) = \langle x+a \rangle$

$$T(\epsilon) = I - \frac{i}{\hbar} p \cdot \epsilon$$

$$T(a) = T\left(\frac{N a}{N}\right) = \lim_{N \rightarrow \infty} T\left(\frac{a}{N}\right)^N = \exp(\dots)$$

Invariancia → se conserva p .

* Rev. temporal → consecuencia:

deg. de Kramers (aunque

no hay cant. conservada).

* Paridad → no hay cant. conservadas.

$$\hookrightarrow |\psi(0)\rangle = \sum_n c_n |n, p=+1\rangle.$$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} \sum_n c_n |n, p=+1\rangle$$

no lo puedes dar vuelta

↪ paridad se conserva.

$$\cdot e^{iH_0 t/\hbar} \sum_l c_l |q, l, m\rangle$$

↪ no puede cambiar el x_q sino
sería como cambiar el momento
angular. $x_q H$ commuta con L^2 .

Reparo: Tarea

- $|\psi(0)\rangle$ en la base de L^2 y L_z . $\ell=1$
- H es prop. a L_x .

$|\psi(0)\rangle$

① resultados posibles al medir $L_x \rightarrow m_h$.

② Prob. en $t=0$ de medir $h, 0$ y $-h$.

$$h \rightarrow |\langle m_x = +1 | \psi(0) \rangle|^2$$

$$0 \rightarrow |\langle m_x = 0 | \psi(0) \rangle|^2$$

$$-h \rightarrow |\langle m_x = -1 | \psi(0) \rangle|^2$$

en la base de
 L^2 y L_z .

windades
de \hbar

$$L_x = \begin{pmatrix} |0,0\rangle & |1,-1\rangle & |1,0\rangle & |1,+1\rangle \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & \hbar\sqrt{2} & 0 & 0 \\ \hbar\sqrt{2} & 0 & \hbar\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Si $L_x |l,m\rangle = |l',m'\rangle$
 L_x cambia el momento angular total.

en la base de L^2 y L_z

diagonalizo esta matriz \rightarrow resuelvo para ℓ dado x^1

$$|l=1, m_x = +1\rangle$$

$$|l=1, m_x = 0\rangle$$

$$|l=1, m_x = -1\rangle$$

↓

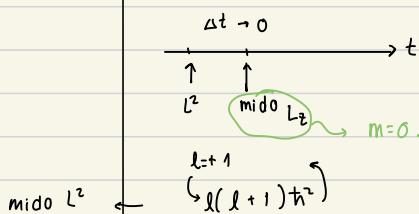
obtengo los autovectores!

REPASO

- Si comutan, la medición simultánea está bien definida.

$$|\psi(0)\rangle = c_{0,0} |0,0\rangle + \underbrace{c_{1,-1} |1,-1\rangle}_{\text{L}^m} + \underbrace{c_{1,0} |1,0\rangle}_{P_{L=+1} |\psi(0)\rangle} + c_{1,1} |1,1\rangle \rightarrow \text{colapso a este subespacio.}$$

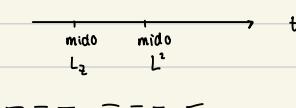
(renormalizado).



$$P_{L=+1} = |1,-1\rangle \langle 1,-1| + |1,0\rangle \langle 1,0| + |1,1\rangle \langle 1,1|$$

$$\frac{P_{L=+1} |\psi(0)\rangle}{\langle P_{L=+1} \psi(0) | P_{L=+1} \psi(0) \rangle^{1/2}}$$

Estado después de la medición



$$|\psi(0)\rangle = c_0 |\psi_0\rangle + c_1 |\psi_1\rangle$$

$\{|\psi_j\rangle\}$ autoestados de H con autoval. Ej.

$$|\psi(t)\rangle = c_0 e^{-iE_0 t/\hbar} |\psi_0\rangle + c_1 e^{-iE_1 t/\hbar} |\psi_1\rangle.$$

; si E_0 y E_1 fueran iguales los
podría sacar y quedaría en la
misma linea del espacio de Hilbert

↓
no pasa en gen.

- Compatibilidad de observables rara

L^2, L_z

$[L_z, L_x] \neq 0 \rightarrow$ El bloque $|0,0\rangle$ comuta con el otro $|0,0\rangle \rightarrow$ es un escalar y
los escalares comutan

$$\left(\begin{smallmatrix} 0 & & \\ & I & \\ & & I \end{smallmatrix} \right)$$

→ si el op. del comutador no tiene
ningún autovalor nulo, son incompatibles.

- + cant. conservadas → + degeneradas.

- Invarianza de rotación → autovalores no dependen de $m \rightarrow$ degeneración de $2m+1$

Indique cuáles son correctas

Estado cuántico arbitrario $|\psi\rangle$

- i) $H|\psi\rangle$ da el resultado de una medición de energía del estado $|\psi\rangle$
- ii) Inmediatamente después de medir la energía del sistema está en el estado $H|\psi\rangle$
- iii) Actuar sobre $|\psi\rangle$ con el Hamiltoniano es el equivalente matemático de medir la energía
- iv) Existe un valor definido de la energía E asociada con el estado $|\psi\rangle$ dado por el estado $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$.
- v) Ninguna de las anteriores.

i) El resultado debería ser un autovalor. \rightarrow debería dar energía.

ii) No necesariamente es un autoestado de H si $|\psi\rangle$ es arbitrario. Además, el autoestado no tiene unidades de energía.

iii) Igual que en i),

iv) Si $|\psi\rangle$ satisface la ec. de autovalores, $|\psi\rangle$ debe ser un autoestado pero es arbitrario.

Pozo infinito en 1D $\rightarrow |\psi_n\rangle$.

· Indique qué estado tendrá la variación más rápida en el tiempo de su densidad de prob. espacial.

i) $|\psi_5\rangle$ \times

ii) $|\psi_1\rangle + |\psi_3\rangle = |\psi(0)\rangle \rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{-iE_1 t/\hbar} |\psi_1\rangle + e^{-iE_3 t/\hbar} |\psi_3\rangle \rightarrow$ módulo cuadrado depende del t.

iii) $\frac{|\psi_1\rangle - |\psi_3\rangle}{\sqrt{2}}$

$$|\langle x|\psi(x)\rangle|^2 = \frac{1}{2} |\psi_1(x)|^2 + \frac{1}{2} |\psi_3(x)|^2 + \dots \cos\left(\frac{E_2 - E_3 t}{\hbar}\right)$$

dep. temporal con la ΔE .

iv) $\sqrt{\frac{1}{5}} |\psi_1\rangle + \sqrt{\frac{4}{5}} |\psi_3\rangle$

Dif. de energía mayor
↓
Frec. mayor.

· Estado depende del tiempo aunque esté en un autoestado del sistema.

$|\psi(x,t)|^2 \rightarrow$ Estados estacionarios no dependen del tiempo ($|\psi_s\rangle$) \rightarrow densidad de prob. no depende de t.

Teoría de perturbaciones

indep. del tiempo

18 nov.

$$H = H_0 + H_1 \rightarrow \text{toda la perturbación.}$$

↓
pequeño comparado con H_0

H_0 es tal que sabemos resolverlo

"Hamiltoniana no perturbada".

Suponemos

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \rightarrow |n\rangle = |n^{(0)}\rangle + |n^{(1)}\rangle + |n^{(2)}\rangle + \dots \quad \left. \begin{array}{l} \text{serie perturbativa} \\ \downarrow E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots \end{array} \right\}$$

Comenzamos por

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle$$

$$(H_0 + H_1)|n\rangle = E_n|n\rangle$$

$$(H_0 + H_1)\{|n^{(0)}\rangle + |n^{(1)}\rangle + \dots\} = \{E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + \dots\}\{|n^{(0)}\rangle + |n^{(1)}\rangle + \dots\}$$

Desarrollamos ambos miembros y separamos de acuerdo al grado en la perturbación.

Por ej: $H_0|n^{(0)}\rangle$ es de orden cero

$H_1|n^{(0)}\rangle$ " " " uno

$H_0|n^{(1)}\rangle$ " " " uno

orden cero

$$H_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle$$

↓
autovals. y autovect. de $H_0 \rightarrow$ conocidos.

$$\textcircled{1} \quad H_0|n^{(1)}\rangle + H_1|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|n^{(0)}\rangle / \langle n^0 |$$

$$\langle n^0 | H_0 | n^1 \rangle + \langle n^0 | H_1 | n^0 \rangle = E_n^0 \underbrace{\langle n^0 | n^1 \rangle}_{=1} + E_n^1 \underbrace{\langle n^0 | n^0 \rangle}_{=1}$$

No depende de $|n^1\rangle$

es proporcional a H_1 ,

$$\Rightarrow E_n^1 = \langle n^0 | H_1 | n^0 \rangle$$

La corrección de 1º orden a las autoenergías es el valor de expectación de la perturbación en el autoestado no perturbado.

$$|n^1\rangle = ?$$

Aplicando $\langle m^0 |$ $m \neq n$.

$$E_n^0 \underbrace{\langle m^0 | n^0 \rangle}_{=0}, m \neq n$$

$$\langle m^0 | H_0 | n^1 \rangle + \langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle = E_n^0 \langle m^0 | n^1 \rangle + 0$$

$$E_n^0 \langle m^0 | n^1 \rangle + \langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle = E_n^{(0)} \langle m^0 | n^1 \rangle$$

$$\langle m^0 | n^1 \rangle = \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_n^{(0)}}$$

paralelo al vector no perturbado.

$$|n^{(0)}\rangle = |n_{\parallel}^{(0)}\rangle + \underbrace{|n_{\perp}^{(0)}\rangle}_{\sum_{m \neq n} \langle m^{(0)} | n^{(0)} \rangle |m^0\rangle}$$

se determina exigiendo normalizació (a ese orden).

$$\begin{aligned} & \downarrow \quad \text{terminos de orden superior} \\ & \text{a ese orden.} \\ & |n\rangle = \left\{ \langle n^{(0)} | + \langle n_{\parallel}^{(1)} | + \langle n_{\perp}^{(1)} | \right\} \cdot \left\{ |n^0\rangle + |n'_{\parallel}\rangle + |n'_{\perp}\rangle + \dots \right\} \\ & = \langle n^0 | n^0 \rangle + \boxed{\langle n_{\parallel}^0 | n^0 \rangle + \langle n^0 | n'_{\parallel} \rangle} + \text{t.o. sup.} \end{aligned}$$

Luego, $\langle n^0 | n'_{\parallel} \rangle = i\alpha$, $\alpha \in \mathbb{R}$ \rightarrow tiene que ser imaginario puro porque $\langle n'_{\parallel} | n^0 \rangle$ es el conj.

Usando que $1+i\alpha = e^{i\alpha}$, $\alpha \in \mathbb{R}$

\downarrow
α de orden 1 en H.

tenemos \curvearrowright multiplicó por una fase global.

$$|n\rangle = |n^0\rangle \underbrace{e^{i\alpha}}_{1+i\alpha} + \sum_{m \neq n} |m^0\rangle \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \quad (**)$$

Dado que $|n\rangle$ tiene una fase global arbitraria, ahora la cambiamos en $e^{-i\alpha} \rightarrow$ multiplicamos \curvearrowright por $e^{-i\alpha}$

$$\begin{aligned} |n\rangle &= |n^0\rangle + \sum_{m \neq n} |m^0\rangle \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} e^{i\alpha} \\ &\quad \curvearrowright_1 \text{(para que sea de orden 1).} \\ &= |n^0\rangle + |n'\rangle. \end{aligned}$$

$$\Rightarrow |n'\rangle = \sum_{m \neq n} |m^0\rangle \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0}$$

\downarrow
veras que es ortogonal a $|n^0\rangle$.

$$E_n^2 = ?$$

$$H_0 |n^2\rangle + H_1 |n^1\rangle = E_n^0 |n^2\rangle + E_n^1 |n^1\rangle + \underline{E_n^2 |n^0\rangle} / \langle n^0 |$$

$$E_n^2 = \langle n^0 | H_1 | n^1 \rangle$$

H mezcla m con n , genera transiciones

$$E_n^{\text{c}} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle n^0 | H_1 | m^0 \rangle \langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n^0 | H_1 | m^0 \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

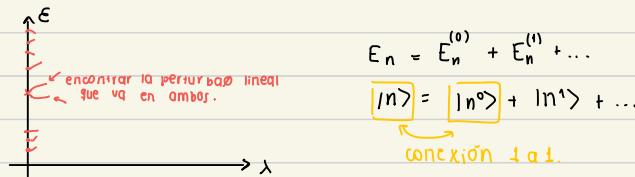
Perturbación pequeña

Una condición necesaria para ello es que

$$\left| \frac{\langle m^0 | H_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \right| \ll 1.$$

Si $E_n^0 - E_m^0 = 0$, hay degeneración.

Teoría de perturbaciones degenerada.



Diagonalizaremos de manera exacta en el subespacio degenerado y trataremos el resto como perturbación.

Ej: Pozo infinito en 2D \rightarrow a

$$E_{p,q}^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (p^2 + q^2) \quad p, q = 1, 2, 3, \dots$$

Estado fundamental: $p=q=1$.

deg. 2. ← " excitado: $p=1, q=2$ $p=2, q=1$

Autofunciones asociadas:

$$\psi_A^0 = \frac{z}{q} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right)$$

$p=1 \quad q=1$

$$\psi_B^0 = \frac{z}{q} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{\pi y}{a}\right)$$

$p=2 \quad q=1$

Introducimos:

$$V(x,y) = -kxy.$$

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \underbrace{\langle \psi_A^0 | H | \psi_A^0 \rangle}_{\Delta} & \langle \psi_B^0 | H | \psi_A^0 \rangle \\ \langle \psi_A^0 | H | \psi_B^0 \rangle & \underbrace{\langle \psi_B^0 | H | \psi_B^0 \rangle}_{E_B} \end{pmatrix} \quad ; \quad E_A = E_B = E_0$$

$$= \begin{pmatrix} E_0 & \Delta \\ \Delta & E_0 \end{pmatrix}$$

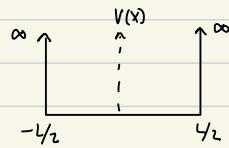
Niveles se repelen: Uno sube y otro baja cuando le aplico la perturbación.

$$E = E_0 \pm \Delta \rightarrow \text{proporcional a } k$$

$$\frac{\hbar^2}{2m\ell^2} (1+4)$$

Ejemplo:

pozo de + potencial
potencial linear

no perturbado → pozo infinito centrado en $x=0$.

$$E_n^{(0)} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}, n=1,2,3\dots$$

y las funciones de onda en base posición:

$$\psi_n^{(0)}(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{\pi n}{L} x\right) & n=1, 3, 5\dots \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right) \end{cases}$$

Añadimos una perturbación:

$$V = eEx \rightarrow \text{campo eléctrico.}$$

la energía a orden 1 del estado basal impar:

$$\begin{aligned} E_1^{(1)} &= \langle \psi_1^{(0)} | V | \psi_1^{(0)} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \psi_1^{(0)} | x \rangle \langle x | V | \psi_1^{(0)} \rangle dx \\ &= \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \cos^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) eEx dx = 0 \end{aligned}$$

A orden 2:

$$E_1^{(2)} = \sum \frac{V_{2R,1} * V_{2R,1}}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \quad k=1,2,3\dots$$

$$V_{1R} = \frac{2}{L} eE \int \sin\left(\frac{k\pi}{L} x\right) x \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx$$

$$\langle \psi_1^{(0)} | V | \psi_1^{(0)} \rangle$$



* gracias a que la perturbación los mezcla, va a hacer un efecto en los estados.

para por los H hermitianos ←

que repelen las soluciones.

↓
baja la degeneración

* conexión 1 a 1 entre
los estados perturbados
y no perturbados.

$$\langle n^{(0)} | H_1 | m^{(0)} \rangle \langle m^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle \rightarrow \sum \frac{|\langle n^{(0)} | H_1 | m^{(0)} \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

ESTADOS ENTRELAZADOS.

	<ul style="list-style-type: none"> Sakurai napolitano 3.10 para un par de partículas. <p>ESPAZO DE DOS PARTÍCULAS:</p> $\{ e_i\rangle \}$ base de V ; partícula 1 $\{ f_j\rangle \}$ " " W ; " 2
prod. tensorial	$\Rightarrow \{ e_i\rangle \otimes f_j\rangle \}$ base de $V \otimes W$ \uparrow prod. directo ("tensorial") <p style="text-align: right;">espacio de las 2 partículas.</p>
	<ul style="list-style-type: none"> Dado un estado $\psi\rangle$ de las dos partículas si podemos escribirlo como un único término $v_k\rangle \otimes w_k\rangle$ entonces podemos describir el estado de las partículas independientemente.
$ e\rangle \otimes f\rangle + e\rangle \otimes g\rangle$ $ e\rangle (f\rangle + g\rangle)$	<p>Entonces decimos que las partículas en el estado $\psi\rangle = v_k\rangle \otimes w_k\rangle$ <u>no</u> están entrelazadas.</p>
	<p>Por el contrario, si no existen tales estados $v_k\rangle$ y $w_k\rangle$ entonces decimos que en el estado $\psi\rangle$ las partículas están entrelazadas.</p> <p>↳ El estado es una prop. que no depende de la base.</p>
	<ul style="list-style-type: none"> 2 partículas de spin 1/2 $\{ e_1\rangle, e_2\rangle \}$ base de V $\{ f_1\rangle, f_2\rangle \}$ base de W El estado más gen. es: $ \psi_A\rangle = a_{11} e_1\rangle \otimes f_1\rangle + a_{12} e_1\rangle \otimes f_2\rangle + a_{21} e_2\rangle \otimes f_1\rangle + a_{22} e_2\rangle \otimes f_2\rangle$ $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$ <p>Si el estado $\psi_A\rangle$ es no entrelazado, entonces existen constantes a_1, a_2, b_1 y b_2 tales que</p> $= (a_1 e_1\rangle + a_2 e_2\rangle) \otimes (b_1 f_1\rangle + b_2 f_2\rangle)$

$$\Rightarrow \begin{cases} a_{11} = a_1 b_1 \\ a_{12} = a_1 b_2 \\ a_{21} = a_2 b_1 \\ a_{22} = a_2 b_2 \end{cases} \Rightarrow \det A = 0$$

• supongamos que $\det A = 0$ y veamos si esto lleva a que $|y_A\rangle$ es no entrelazado.

↳ supongamos que $a_{11} = 0$

$$\text{entonces } \det A = 0 \Rightarrow a_{12} a_{21} = 0$$

↳ Si $a_{12} = 0$

$$\Rightarrow |y_A\rangle = \dots \rightarrow |y_A\rangle \text{ es no entrelazado.}$$

↳ Si $a_{11} \neq 0 \dots$

↳ Si $a_{21} = 0 \dots$

∴ Si el $\det A = 0$, el estado es no entrelazado.

ESTADOS DE 2 PARTÍCULAS

$$\begin{array}{l} \textcircled{1} \quad \{ |v_i\rangle \} \text{ base de } \mathbb{V} \\ \textcircled{2} \quad \{ |w_k\rangle \} \text{ base de } \mathbb{W} \end{array} \left. \begin{array}{c} \{ |v_i\rangle \otimes |w_k\rangle \} \\ \mathbb{V} \otimes \mathbb{W} \end{array} \right\} \text{ base común de las partículas}$$

Para el estado $|v_i\rangle \otimes |w_k\rangle$ la partícula 1 está en $|v_i\rangle$

Pero el estado $C_{11}(|V_1\rangle \otimes |W_1\rangle) + C_{12}(|V_1\rangle \otimes |W_2\rangle)$ $\in V \otimes W$, osea tambi n describe a ambas part culas, pero no podemos decir que cada una est  en un estado fijo como el ejemplo anterior, esto es un estado entrelazado, y nos muestra que el estado de una afecta directamente el estado de otra.

En gen. para un estado de un sistema de 2 partículas tenemos:

$$|\Psi\rangle = C_{11}(|v_1\rangle \otimes |w_1\rangle) + C_{12}(|v_1\rangle \otimes |w_2\rangle) + C_{21}(|v_2\rangle \otimes |w_1\rangle) + C_{22}(|v_2\rangle \otimes |w_2\rangle)$$

Al escribir los wef. como elem. de matriz:

$$A = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{pmatrix}, \quad \text{vemos que:}$$

$\det A \neq 0 \rightarrow$ $|A|$ es entrelazado.

* El \det es invariante para cambios unitarios, es decir, esto es válido para toda base.

* + frecuente es estado entrelazado	$ \phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (+\rangle_1 \otimes +\rangle_2 - -\rangle_1 \otimes -\rangle_2)$
	$\{ +\rangle_1, -\rangle_1\}$
	$\{ +\rangle_2, -\rangle_2\}$
	$A = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad \det A \neq 0 \rightarrow$ luego $ \phi\rangle$ es entrelazado.
	<u>Base de estados de Bell</u>
estado entrelazado	$ \phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (+\rangle_1 \otimes +\rangle_2 + -\rangle_1 \otimes -\rangle_2) \rightarrow$ es entrelazado $\langle \phi_0 \phi_0 \rangle = 1$ $= \frac{1}{\sqrt{2}} (+\rangle_1 +\rangle_2 + -\rangle_1 -\rangle_2) \rightarrow$ notación abreviada ↓ quiero completar la base con estados entrelazados
queremos completar la base (conseguir 3 estados base más)	estado queda inalterado para la part. ④ y actualiza σ en la part. ②. $ \phi_i\rangle = (\mathbf{I} \otimes \sigma_i) \phi_0\rangle$ uno puede probar que $ \phi_i\rangle$ son entrelazados (son matrices de Pauli!)
	$ \phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (+\rangle_1 -\rangle_2 + -\rangle_1 +\rangle_2) \quad \left. \begin{array}{l} \text{proyección de spin nula.} \\ \text{...} \end{array} \right\}$ $ \phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (+\rangle_1 +\rangle_2 - -\rangle_1 -\rangle_2)$
	$ \phi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (+\rangle_1 +\rangle_2 - -\rangle_1 -\rangle_2)$
	$\{ \phi_i\rangle\}$ base de Bell : $\langle \phi_i \phi_j \rangle = \delta_{ij}$.
	¿qué significa tener estados entrelazados ?
	$\frac{1}{\sqrt{2}} (+\rangle_1 -\rangle_2 - -\rangle_1 +\rangle_2)$
	$P(\hat{a}, \hat{b})$ prob de que la part. 1 esté en $ \hat{a}, +\rangle$ y que 2 esté en $ \hat{b}, +\rangle$ ↑ Estado + en la dirección \hat{a} .
	$P(\hat{a}, \hat{b}) = \frac{1}{2} \cos^2 \left(\frac{i}{\hbar} (\pi - \theta_{qb}) \right)$ " $\propto (\hat{a}, \hat{b})$
	si $\hat{a} = -\hat{b} \Rightarrow \theta_{qb} = +\pi, P(\hat{a}, -\hat{a}) = \frac{1}{2} \checkmark$ ↳ máx. prob al colapsar er $\frac{1}{2}$

Einstein Rovelli (1935)

↓
una teoría física debe satisfacer realismo local

- ↓
① El resultado de una medida es un elemento de la realidad. Si una medida de un obs. da un valor, ese valor es una prop. del estado.
- ② El resultado de una medición en un punto, no puede depender de cualquier acción que tenga lugar en un punto lejano al mismo tiempo.

↓
Como la mecánica cuántica no cumple, la teoría no es completa.

1964 Bell

Supongamos que cada obs. puede medir a lo largo de \hat{a} , \hat{b} y \hat{c} y sup. que ① y ② son válidas.

Sup. implícita → indep. estadística → "free will hypothesis"

$$\rho(\vec{\lambda}, \vec{\eta}) = \rho(\vec{\lambda})$$

↑ ↗ var.
var. medidas
partíc.

$$P(\hat{a}, \hat{b}) \leq P(\hat{a}, \hat{c}) + P(\hat{c}, \hat{b})$$

desigualdad de Bell.