RASKOLNIKOV
PRINTING
PRESS

1ra Edición

MECÁNICA CUÁNTICA I

APUNTES

Daniel Aguilar R.

Book

Daniel Aguilar

April 2017

Índice general

0.1. Introducción

La base de la matemática para formalizar la teoría cuántica es el análisis funcional, teoría de espacios de Hilbert, los operadores lineales...

- Formalismo de Heisenberg (matricial) TODO Bases discretas.
  Los estados cambian, los operadores no.
- Formalismo de TODO (ondulatorio) TODO Bases continuas.
  Los operadores cambian, los estados no.

Generalización del formalismo de TODO rescatando el significado físico de los sistemas mecánico cuántico independiente de las bases vectoriales.

Formalización de la teoría cuántica se mucho más general.

0.2. Espacios de Hilbert, Operadores, Notación de Dirac

0.2.1. Espacios de Hibert

Definicion 0.2.1. Espacio de Hilbert H: Son espacios normados completos y lineales que tienen definido un producto escalar (o interno) $(\cdot, \cdot)$.

Sea $\psi,\ \phi,\ \xi$ un conjunto de verctores y $a,\ b,\ c$ un conjunto de escalares. El producto interno de H cumple con 4 propiedades:

I. Se satisface que
$$(\psi, \phi) = (\phi, \psi)^*.$$

II. El producto escalar debe ser lineal con respecto a la segunda componente.
$$(\psi, a\phi_1 + b\phi_2) = a(\psi, \phi_2) + b(\psi, \phi_1)$$

III. El producto escalar debe ser antilineal con respecto a la primera componente.
$$(a\psi_1 + b\psi_2, \phi) = a^*(\psi_1, \phi) + b^*(\psi_2, \phi)$$

IV. $(\psi, \psi) = \|\psi\|^2 \geq 0$.

Recordar:

Ejemplo 0.2.1. .

0.2.2. Notación de Dirac

Propiedades de los bra-kets

a) $|\psi\rangle \to \langle\psi| = (|\psi\rangle)^*$.

b) $a\,|\psi\rangle + b\,|\phi\rangle \to a^*\,\langle\psi| + b^*\,\langle\phi| = (a\,|\psi\rangle + b\,|\phi\rangle)^*$.

c) $|a\psi\rangle = a\,|\psi\rangle \to \langle a\psi| = a^*\,\langle\psi|$.

d) El producto interno no conmuta $\langle\psi|\phi\rangle \neq \langle\phi|\psi\rangle \quad ; \quad \langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*$.

e) Distributiva $\langle\psi|a_1\psi_1 + a_2\psi_2\rangle = a_1\langle\psi|\psi_1\rangle + a_2\langle\psi|\psi_2\rangle$.

f) Distributiva $\langle a_1\psi_1 + a_2\psi_2|\psi\rangle = a_1{}^*\langle\psi_1|\psi\rangle + a_2{}^*\langle\psi_2|\psi\rangle$.

g) La norma es positiva $\|\psi\| = \langle\psi|\psi\rangle \geq 0$. Y si $|\psi\rangle = |0\rangle \to \|\psi\| = 0$.
Si $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ se dice que es un estado normalizado.

h) Desigualdad de Schwarz: Para $|\psi\rangle\,,\ \ |\phi\rangle \in \mathcal{H}$ se cumple

$$|\langle\psi|\phi\rangle|^2 \leq \langle\psi|\psi\rangle\langle\phi|\phi\rangle\,.$$

i) Desigualdad triangular:

$$\sqrt{\langle\psi+\phi|\psi+\phi\rangle} \leq \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} + \sqrt{\langle\phi|\phi\rangle}.$$

j) Ortonormalidad: Para $|\psi\rangle\,,\ \ |\phi\rangle \in \mathcal{H}$ se dice que son ortonormales si. $\langle\psi|\phi\rangle = 0$ y $\langle\psi|\psi\rangle = \langle\phi|\phi\rangle = 1$.

Ejemplo 0.2.2. Cómo entrenar a tu dragón..
No se
Ni mergas buey α^x

Propiedades no permitidas

Sean $|\psi\rangle$ y $|\phi\rangle$ elementos de $\mathcal{H}$, las operaciones como:

$$|\phi\rangle \quad \text{y} \quad \langle\psi|\langle\phi|$$

no están permitidas (no tienen sentido físico).
Se puede pensar en este tipo de operaciones si $|\psi\rangle$ y $|\phi\rangle$ pertenecen a diferentes espacios vectoriales.

Ejemplo 0.2.3. Operadores.
Dado

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 3i \\ 2+i \\ 4 \end{pmatrix}, \quad |\phi\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ -i \\ 2-3i \end{pmatrix}$$

Calcular:

a) $\langle\psi|$

b) $\langle\phi|\,|\psi\rangle$

c) $|\psi\rangle\,|\phi\rangle$ y $\langle\psi|\,\langle\phi|$

Solución:

a)

$$\begin{aligned}\langle\psi| &= (|\psi\rangle)^* \\ &= \begin{pmatrix} -3i & 2-i & 4 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

b)

$$\begin{aligned}\langle\phi|\,|\psi\rangle &= (|\psi\rangle)^* \\ &= \begin{pmatrix} 2 & +i & 2+3i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3i \\ 2+i \\ 4 \end{pmatrix} \\ &= 8i + 7\end{aligned}$$

c) No es posible operar $|\psi\rangle\,|\phi\rangle$ ni $\langle\psi|\,\langle\phi|$ porque tienen dimensiones incompatibles.

Sentido físico del producto interno

$\langle\phi|\psi\rangle$ Representa la proyección del estado $|\psi\rangle$ sobre el estado $|\phi\rangle$. Otra interpretación es que representa la amplitud de probabilidad de que el sistema que se encuentra en el estado $|\psi\rangle$, después de una medición, pase al estado $|\phi\rangle$.

Ejemplo 0.2.4. Operadores.
Considere los estados $|\psi\rangle = 3i\,|\phi_1\rangle - 7i\,|\phi_2\rangle$ y $|\chi\rangle = -\,|\phi_1\rangle + 2\,|\phi_2\rangle$ donde $|\phi_1\rangle$ y $|\phi_2\rangle$ son ortonormales.

1. Calcular $\langle\phi|\chi\rangle$ y $\langle\chi|\psi\rangle$.

2. Demostrar que $|\psi\rangle$ y $|\chi\rangle$ satisface la desigualdad de Cauchy-Schwartz y la del triangulo.

ii. Postulado

A cada observable de un sistema físico se lo representa, en mecánica cuántica, mediante un operador lineal autoadjunto que actúa en el espacio de Hilbert $\mathcal{H}$ asociado al sistema.

Sea A un observable, y $\hat{\mathbf{A}}$ su operador hermítico asociado:

$$\hat{\mathbf{A}} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}\,|\psi\rangle \to \hat{\mathbf{A}}\,|\psi\rangle = |\psi'\rangle$$

$$|\psi\rangle\,,\quad |\psi'\rangle \in \mathcal{H}$$

Se sigue que

- $\hat{\mathbf{A}}$ debe ser lineal para cumplir con el principio de superpocisión:
  $\hat{\mathbf{A}}(|\psi\rangle + a\,|\phi\rangle) = \hat{\mathbf{A}}\,|\psi\rangle + a\hat{\mathbf{A}}\,|\phi\rangle$

- $\hat{\mathbf{A}}$ debe ser ortogonal:
  $\left\langle \psi \middle| \hat{\mathbf{A}}\phi \right\rangle = \left\langle \hat{\mathbf{A}}\psi \middle| \phi \right\rangle$ o analíticamente $\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}}^*$

$\hat{\mathbf{A}}$ debe ser lineal para cumplir con el principio de superposición:
$\hat{\mathbf{A}}(|\psi\rangle + a\,|\phi\rangle) = \hat{\mathbf{A}}\,|\psi\rangle + a\hat{\mathbf{A}}\,|\phi\rangle$

Teorema 1. *Sea A un observable, $\hat{\mathbf{A}}$ es un operador autoadjunto al observable A. Los valores propios de $\hat{\mathbf{A}}$ son reales y los vectores propios correspondientes a los valores propios distintos ortogonales. Matemáticamente es:*

$$A \to \hat{\mathbf{A}}$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}} &: \mathcal{H} \to \mathcal{H} \\ &|\psi\rangle \to \hat{\mathbf{A}} \end{aligned}$$

En caso de cumplirse

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}\,|\phi\rangle &= \lambda\,|\phi\rangle \\ |\phi\rangle \quad &\textit{Son los vectores propios de} \quad \hat{\mathbf{A}}. \\ \lambda \quad &\textit{Son los valores propios de} \quad \hat{\mathbf{A}}. \end{aligned}$$

Demostración. Por demostrar □

En mecánica cuántica, el resultado de las mediciones de los observables son los *valores propios* (valores reales) de los operadores hermíticos asociados.

$$\hat{\mathbf{A}}\,|\phi_i\rangle = \lambda_i\,|\phi_i\rangle$$

$|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, ..., |\psi_n\rangle$ son vectores propios de $\hat{\mathbf{A}}$ también construimos una base generadora.

$$\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, ..., |\psi_n\rangle\}$$

$$\mathcal{H} \to \{|e_i\rangle\}$$

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H} \to |\psi\rangle = \sum_i^n \alpha_i |e_i\rangle$$

$$\begin{aligned} \langle e_i|\rangle &= \sum_i^n \alpha_i \langle e_j|e_i\rangle \\ &= \sum_i^n \alpha_i \delta_{ij} \end{aligned}$$

$$\langle e_j|\psi\rangle = \alpha_j$$

$$|\psi\rangle = \sum_i^n |e_i\rangle\langle e_i| \, |\psi\rangle$$

$$\hat{\mathbf{I}} = \sum_i^n |e_i\rangle\langle e_i|, \qquad \text{Llamada la propiedad de clausura}$$

Se tiene las siguientes propiedades

a) $|\psi\rangle = \sum_i |e_i\rangle \langle e_i|\psi\rangle$ Como $\langle\psi| = |\psi\rangle^* = (\sum_i |e_i\rangle \langle e_i|\psi\rangle)^*$

b) $\langle\psi| = \sum_i \langle\psi|e_i\rangle \langle e_i|$

El mismo razonamiento se aplica para obtener una base para los bra en $\mathcal{H}^*$.

Ejemplo 0.2.5. .
Calcular en la base $\{|e_i\rangle\}$, $\langle\psi|\psi\rangle$.
Solución:

$$\begin{aligned} \langle\psi|\psi\rangle &= \left[\sum_i^n \langle\psi|e_i\rangle \langle e_i|\right]\left[\sum_j^n |e_j\rangle \langle e_j|\psi\rangle\right] \\ &= \sum_{ij}^n \langle\psi|e_i\rangle \langle e_i|e_j\rangle \langle e_j|\psi\rangle \\ &= \sum_{ij}^n \langle\psi|e_i\rangle \delta_{ij} \langle e_j|\psi\rangle \\ &= \sum_i^n \langle\psi|e_i\rangle \langle e_i|\psi\rangle \\ &= \sum_i^n \langle\psi|e_i\rangle \langle\psi|e_i\rangle^* \\ &= \sum_i^n \|\langle\psi|e_i\rangle\|^2 \end{aligned}$$

Ejemplo 0.2.6. Deber.
Calcular $|\psi\rangle\langle\psi|$ en $\{|e_i\rangle\}$.
Solución:
Por responder

Ejemplo 0.2.7. Deber.
Sea $\hat{\mathbf{A}}$ un operador hermítico asociado con el observable A. Calcular $\hat{\mathbf{A}}\,|\psi\rangle$ en la base propia.
Solución:
Por responder

Valor medio de los observables

Definicion 0.2.2. Ensemble: Un conjunto de estados idénticos que sirven para analizar los posibles resultados en un sondeo.

Sea un observable $A \to \hat{\mathbf{A}}$ hermítico asociado. Sea, además, que nuestro sistema está en el estado $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. El conjunto

Replicado n veces en un *ensemble* de n elementos se procede a definir al valor medio de un observable.

Definicion 0.2.3. Valor medio del observable A:

$$\langle A \rangle_{|\psi\rangle} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} A_i$$

Ejemplo 0.2.8. Identidad del valor medio.
Muestre que:

$$\langle A \rangle_{|\psi\rangle} = \frac{\langle \psi|\hat{\mathbf{A}}|\psi\rangle}{\langle \psi|\psi\rangle}$$

Ejemplo 0.2.9. Valor medio en la base generadora.
Expresar $\langle A \rangle_{|\psi\rangle}$ en la base generadora $\{|e_i\rangle\}$. Haga la supocisión de que $\langle|\rangle = 1$.
Solución

$$\begin{aligned}
\langle A \rangle_{|\psi\rangle} &= \langle \psi|\hat{\mathbf{A}}|\psi\rangle \\
&= \langle \psi|\hat{\mathbf{I}}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{I}}|\psi\rangle \\
&= \langle \psi| \left(\sum_i |e_i\rangle\langle e_i|\right) \hat{\mathbf{A}} \left(\sum_j |e_j\rangle\langle e_j|\right) |\psi\rangle \\
&= \sum_{ij} \langle \psi|_i\rangle \langle e_i|\,\hat{\mathbf{A}}\,|e_j\rangle \langle e_j|\psi\rangle
\end{aligned}$$

Se puede entonces interpretar de la siguiente manera

$$\langle A \rangle_{|\psi\rangle} = \sum_{ij} \langle \psi|_i\rangle\, A_{ij}\, \langle e_j|\psi\rangle$$

Donde $A_{ij} = \langle e_i|\,\hat{\mathbf{A}}\,|e_j\rangle$.

$$A_{ij} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} \end{pmatrix}$$

que es la representación matricial del operador $\hat{\mathbf{A}}$ en la base generadora $\{|e_i\rangle\}$.

Representación matricial de un estado $|\psi\rangle$

Sea $|\psi\rangle \in$ con una base $\{|e_i\rangle\}$. Entonces

$$\forall\, |\psi\rangle \in \mathcal{H} : |\psi\rangle = \sum_{i}^{n} \alpha_i\, |a_i\rangle \quad \text{con} \quad \alpha_i = \langle a_i|\psi\rangle$$

Así los α_i son los elementos matriciales de $|\psi\rangle$.

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix}$$

Definicion 0.2.4. Desviación media estándar (dispersión): La dispersión i desviación cuadrática media de un observable A para un sistema en el estado $|\psi\rangle$ está dada por:

$$\Delta A_{|\psi\rangle} = \sqrt{\left\langle \psi \middle| \left(\hat{\mathbf{A}} - \langle A\rangle_{|\psi\rangle}\right)^2 \middle| \psi \right\rangle} \tag{1}$$

En forma reducida (ec.1) queda:

$$\Delta A_{|\psi\rangle} = \sqrt{\langle\psi|\hat{\mathbf{A}}^2|\psi\rangle - \langle\psi|A|\psi\rangle^2} \tag{2}$$

0.3. Representación en las bases discretas

Ejemplo 0.3.1. .

0.4. Representación en las bases discretas

0.5. Representación de Coordenadas, Momentos y Energía (Teoría de Representaciones)

Capítulo 1

$\langle \Psi |$ Postulados de la Mecánica Cuántica $| \Psi \rangle$

Capítulo 2

$\langle \Psi |$ Evolución Temporal de los Estados Cuánticos $| \Psi \rangle$

2.1. Operadores de evolución temporal

$$|\psi\rangle \to \hat{\mathbf{A}} |\psi\rangle = |\psi\rangle$$

Ahora, queremos ver cómo los estados evolucionan.

Definicion 2.1.1. Operador de evolución $\hat{\mathbf{U}}$:

$$\hat{\mathbf{U}} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$$

$$|\psi(t)\rangle \to \hat{\mathbf{U}} |\psi(t)\rangle = |\psi(t + \Delta t)\rangle$$

En la base generadora $\{|e_i\rangle\}$ se tiene

$$|\psi(t)\rangle = \sum_i \alpha_i(t) |e_i\rangle \tag{2.0}$$

$$|\psi(t + \Delta t)\rangle = \sum_i \alpha_i(t + \Delta t) |e_i\rangle \tag{2.0}$$

$$\begin{aligned} \alpha_i(t + \Delta t) &= \langle e_i | \psi(t + \Delta t)\rangle \\ &= \langle e_i | \hat{\mathbf{U}} | \psi(t)\rangle \end{aligned}$$

Usando 2.1

$$\alpha_i(t + \Delta t) = \sum_j \langle e_i | \hat{\mathbf{U}} | \psi(t)\rangle \, \alpha_j \tag{2.0}$$

$$= \sum_j U_{ij} \alpha_j(t) \tag{2.0}$$

$\hat{\mathbf{U}}$ en la base $\{|e_i\rangle\}$:

$$U_{ij} = \langle e_i | \hat{\mathbf{U}} | e_j \rangle$$

¿Qué forma tiene U_{ij}?
En el momento inicial $\Delta t = 0$
Con 2.1

$$\alpha_i(t) = \sum_j U_{ij} \alpha_j(t)$$

Entonces $U_{ij} = \delta_{ij}$
Ahora para un istante posterior $\Delta t \to 0$ y $\Delta \neq 0$

$$U_{ij} = \delta_{ij} + \Delta t K_{ij}$$

Tomo deliberadamente $K_{ij} = -\frac{\mathbf{i}}{\hbar} H_{ij}$.

$$U_{ij} = \delta_{ij} - \frac{\mathbf{i}}{\hbar}\Delta H_{ij} \tag{2.0}$$

Remplazo en 2.1

$$\begin{aligned}
\alpha_i(t+\Delta t) &= \sum_j \left(\delta_{ij} - \frac{\mathbf{i}}{\hbar}\Delta t H_{ij}\right)\alpha_j(t) \\
&= \sum_j \delta_{ij}\alpha_j(t) - \frac{\mathbf{i}}{\hbar}\Delta t \sum_j H_{ij}\alpha_j(t) \\
&= \alpha_i(t) - \frac{\mathbf{i}}{\hbar}\Delta t \sum_j H_{ij}\alpha_j(t) \\
\lim_{\Delta t \to 0}\left[\mathbf{i}\hbar\left(\frac{\alpha_i(t+\Delta t) - \alpha_i(t)}{\Delta t}\right)\right] &= \sum_j H_{ij}\alpha_j(t) \\
\mathbf{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\alpha_i(t) &=
\end{aligned}$$

$$\mathbf{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\alpha_i(t) = \sum_j H_{ij}\alpha_j(t) \tag{2.0}$$

Así se puede definir a 2.1 como la ecuación de evolución temporal de los coeficientes de un estado.
Del mismo modo $|\psi(t)\rangle = \sum_i \alpha_i(t)|e_i\rangle$ se define como la ecuación de evolución temporal de los estados.

$$\begin{aligned}
\mathbf{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\langle e_i|\psi(t)\rangle &= \sum_j \langle e_i|\hat{\mathbf{H}}|e_j\rangle\langle e_j|\psi(t)\rangle \\
&= \left\langle e_i\middle|\hat{\mathbf{H}}\middle|\psi(t)\right\rangle \quad \text{(Propiedad de clausura} \quad |e_j\rangle\langle e_j| = I) \\
\text{(Sólo} \quad |\psi(t)\rangle \quad \text{depende de t)} \quad \left\langle e_i\middle|\mathbf{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\middle|\psi(t)\right\rangle &=
\end{aligned}$$

$$\mathbf{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \hat{\mathbf{H}}|\psi(t)\rangle \quad \text{Ecuación de Schrödinger ket} \tag{2.0}$$

Considere que $\hat{\mathbf{H}}$ es un operador hermítico por lo cual $\hat{\mathbf{H}} = \hat{\mathbf{H}}^*$, entonces

$$-\mathbf{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)| = \hat{\mathbf{H}}\langle\psi(t)| \quad \text{Ecuación de Schrödinger bra} \tag{2.0}$$

Con relación a 2.1 y 2.1 se toma a consideración

a) La ecuación de Schrödinger nos da la evolución temporal de los *estados puros* del sistema.

b) Es una ecuación lineal, por lo cual se satisface el principio de superposición.

c) Durante la evolución del sistema la norma permanece constante.

d) Es la ecuación cuántica no relativista.

e) Describe partículas sin considerar el spín de la partícula.

Demostración. Procedamos a demostrar el literal c).

$|\Psi(t)\rangle$ Evoluciona con el tiempo

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|\psi(t)\|^2 &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\langle\psi(t)|)|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(|\psi(t)\rangle) \\
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle &= \frac{1}{-\hbar}\langle\psi(t)|\hat{\mathbf{H}}|\psi(t)\rangle + \frac{1}{-\hbar}\langle\psi(t)|\hat{\mathbf{H}}|\psi(t)\rangle \\
&= 0 \to \|\psi(t)\| = \text{const}
\end{aligned}$$

□

Ejemplo 2.1.1. .
Se conoce de un sistema de partículas de spin 1/2 los valores medios de $\langle S_x \rangle$, $\langle S_y \rangle$ y $\langle S_z \rangle$. Con esta información determinar la matriz de densidad.
Solución
La matriz de densidad tiene la forma
$$\rho = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$
Conocemos que las matrices para los spines son:
$$S_x = \begin{pmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \begin{pmatrix} 0 & -i\hbar/2 \\ i\hbar/2 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_x = \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & \hbar/2 \end{pmatrix}$$
Se debe cumplir que
$$\langle S_x \rangle_{\hat{\rho}} = Traza(\rho S_x), \quad \langle S_y \rangle_{\hat{\rho}} = Traza(\rho S_z), \quad \langle S_z \rangle_{\hat{\rho}} = Traza(\rho S_z)$$

Ejemplo 2.1.2. Evolución temporal de un estado mezclado.
Sea un sistema físico $\hat{\rho} = \sum_i |\psi_i\rangle P_i \langle\psi_i|$ Calcular $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\rho}$.
Solución
$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\rho} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\sum_i |\psi_i\rangle P_i \langle\psi_i|\right] \\
&= \sum_i \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(|\psi_i\rangle)P_i \langle\psi_i| + |\psi_i\rangle P_i \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\langle\psi_i|)\right] \\
&= \sum_i \left[\frac{1}{i\hbar}|\psi_i\rangle P_i \langle\psi_i| + |\psi_i\rangle P_i \frac{1}{-i\hbar}\langle\psi_i|\right] \\
&= \frac{1}{i\hbar}\hat{\mathbf{H}}\hat{\rho} - \frac{1}{i\hbar}\hat{\rho}\hat{\mathbf{H}}
\end{aligned}$$
Entonces
$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\rho} = \left[\hat{\mathbf{H}}, \hat{\rho}\right]$$

Ejemplo 2.1.3. Evolución temporal de un valor medio.
Sea un $A(t)$ un observable físico asociado al operador hermítico $\hat{\mathbf{A}}(t)$. Considere cómo evoluciona con el tiempo el valor medio de $A(t)$, $\langle A \rangle$ dado el sistema $|\psi\rangle$.
Solución
$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A \rangle &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi|\hat{\mathbf{A}}|\psi\rangle \\
&= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\langle\psi(t)|)\hat{\mathbf{A}}|\psi(t)\rangle + \left[\langle\psi(t)|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\hat{\mathbf{A}}\right)|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\hat{\mathbf{A}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(|\psi(t)\rangle)\right] \\
&= \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{A}}|\psi\rangle + \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle + \frac{1}{-i\hbar}\langle\psi|\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{H}}|\psi\rangle \\
&= \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle\psi|\hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{A}} - \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{H}}|\psi\rangle \\
&= \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle + \frac{i}{\hbar}\left\langle\psi\middle|\left[\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{A}}\right]\middle|\psi\right\rangle
\end{aligned}$$

iii Postulado

En el continuo del tiempo entre dos medidas consecutivas los estados puros de un sistema físico siguen siendo puros y cualquier vector de estado $|\psi\rangle$ evoluciona de acuerdo a la ecuación de Schrödinger . ¿Un estado mezclado evoluciona en un estado mezclado?

2.2. La ecuación de Schrödinger

2.3. Conservación de la probabilidad

2.3.1. Estados estacionarios

Definicion 2.3.1. Estado estacionario: Si un estado $|\phi\rangle$ es un estado propio de energía d un sistema (i.e $\hat{\mathbf{H}} = E\,|\phi\rangle$) entonces se dice que $|\phi\rangle$ es un estado estacionario.

$$\hat{\mathbf{H}}\,|\phi\rangle = E\,|\phi\rangle$$

$$\hat{\mathbf{H}} = i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}, \quad |\phi\rangle = \phi(\boldsymbol{r}, t)$$

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\phi = E\phi \to \phi = \mathrm{const}e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

Es llamada la solución estacionaria.

iv) Postulado:

El único posible resultado de la medición de una cantidad física A es uno de los valores propios del correspondiente operador hermítico $\hat{\mathbf{A}}$ asociado.

De resultado se pueden hacer algunas acotaciones:

I) La medida de A debe ser un número real, lo cual está garantizado por la hermiticidad del operador.

II) Si el espectro del operador $\hat{\mathbf{A}}$ es discreto, los resultados que se pueden obtener está cuantizados.

Considere, ahora, un sistema de estado $|\psi\rangle$ normalizado ($\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Determinaos el resultado de medir el observable A y la probabilidad de obtener esa medición.

Procedo a discriminar el espectro del operador $\hat{\mathbf{A}}$ por casos:

a) Discreto

$$A \to \hat{\mathbf{A}}$$

$$\hat{\mathbf{A}}\,|a_i\rangle = a_i\,|a_i\rangle$$

Donde $|a_i\rangle$ son los vectores propios y a_i son los valores propios asociados al vector propio i-ésimo.

Se tiene dos casos, uno con degeneración y sin degeneración.

- **Sin degeneración:** A cada valor propio a_i le corresponde un único vector propio $|a_i\rangle$ en la base propia $\{|a\rangle\}$.

$$\forall\,|\psi\rangle \in \mathcal{H} : |\psi\rangle = \sum_i^n \alpha_i\,|a_i\rangle \quad \text{con} \quad \alpha_i = \langle a_i|\psi\rangle$$

  Sabemos que el sistema está en un estado normalizado. Entonces la suma de todas probabilidades de que se haga una medición i-ésima es la unidad.

$$\sum_i^n \mathcal{P}_i = \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

$$\sum_{i}^{n} \mathcal{P}_i = \langle\psi|\psi\rangle$$
$$= \sum_i \langle\psi|a_i\rangle \langle a_i|\psi\rangle$$

De aquí, definiendo a $\mathcal{P}_i = \mathcal{P}(a_i)$, se deduce que

$$\mathcal{P}(a_i) = \langle\psi|a_i\rangle \langle a_i|\psi\rangle$$
$$= \langle a_i|\psi\rangle^* \langle a_i|\psi\rangle$$
$$= \alpha_i^* \alpha_i$$

en donde se comprueba que $\sum_i^n \mathcal{P}_i = 1$.

- **Con degeneración:** Sea g el grado de degeneración.

$$\hat{\mathbf{A}} \left|a_j^i\right\rangle = a_i \left|a_j^i\right\rangle, \quad i = 1, 2, ..g_j$$

La base propia es $\left\{\left|a_j^i\right\rangle\right\}$.

$$\forall \left|\psi\right\rangle \in \mathcal{H} : \left|\psi\right\rangle = \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{g_j} \alpha_j^i \left|a_j^i\right\rangle, \quad \alpha_j^i = \langle a_j|\psi\rangle$$

De manera análoga se encuentra que

$$\mathcal{P}(a_k) = \sum_{i=1}^{g_k} \alpha_k^{i\,*} \alpha_k^i$$
$$= \sum_{i=1}^{g_k} \left|\alpha_k^i\right|^2$$
$$= \sum_{i=1}^{g_k} \left|\left\langle a_k^i|\psi\right\rangle\right|^2$$

Se comprueba que $\sum_k \mathcal{P}(a_k) = 1$.

a) Continuo: El espectro del operador $\hat{\mathbf{A}}$ asociado al observable A es un espectro continuo.

$$\hat{\mathbf{A}} \left|a_\alpha\right\rangle = \alpha \left|a_\alpha\right\rangle, \quad \{\left|a_\alpha\right\rangle\} \quad \text{es una base continua}$$

$$\forall \left|\psi\right\rangle \in \mathcal{H} : \left|\psi\right\rangle = \int C(\alpha) \left|a_\alpha\right\rangle \mathrm{d}\alpha, \quad C(\alpha) = \langle a_\alpha|\psi\rangle$$

La probabilidad de encontrar un valor entre α y $\alpha + \mathrm{d}$ es

$$\mathrm{d}\mathcal{P}(\alpha) = \rho(\alpha)\mathrm{d}\alpha, \qquad \text{con} \quad \rho = C^*(\alpha)C(\alpha) = \left|\langle a_\alpha|\psi\rangle\right|^2$$

$$\mathcal{P}(\alpha) = \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} \rho(\alpha)\mathrm{d}\alpha \quad \text{entre} \quad \alpha_1 \quad \text{y} \quad \alpha_2$$

Ejemplo 2.3.1. Energía de transición.
Considerar un sistema físico que tiene dos estados base ($\left|e_1\right\rangle$ y $\left|e_2\right\rangle$). Determinar la evolución temporal de un estado $\left|\psi\right\rangle$.
Solución:

Como

$$|\phi\rangle = \sum_{i=1}^{2} \alpha(t)_i \, |e_i\rangle$$

vasta con estudiar la evolución de los coeficientes α
Usando la relación 2.1

$$\mathbf{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\alpha_i(t) = \sum_j H_{ij}\alpha_j(t)$$

se tiene que

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\alpha_1(t) = H_{11}\alpha_1(t) + H_{12}\alpha_2(t)$$
$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\alpha_2(t) = H_{21}\alpha_1(t) + H_{22}\alpha_2(t)$$

, en donde

$$H_{11} = \langle e_1|\hat{\mathbf{H}}|e_1\rangle\,, \quad H_{21} = \langle e_2|\hat{\mathbf{H}}|e_1\rangle\,, \quad H_{12} = \langle e_1|\hat{\mathbf{H}}|e_2\rangle\,, \quad H_{22} = \langle e_2|\hat{\mathbf{H}}|e_2\rangle$$

Aquí tanto H_{11} como H_{22} representan los valores medios de energía en los niveles $|e_1\rangle$ y $|e_2\rangle$ respectivamente. H_{12} y H_{21} representa las energías de transición de estados $2 \to 1$ y $1 \to 2$ respectivamente.
Para simplificar el problema vamos a suponer que $H_{12} = H_{21} = H'$. Así

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\alpha_1(t) = H_{11}\alpha_1(t) + H'\alpha_2(t)$$
$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\alpha_2(t) = H'\alpha_1(t) + H_{22}\alpha_2(t)$$

y se resuelve en sistema de ecuaciones diferenciales.

v) Postulado:

Cuando la amplitud física A es medida sobre un sistema en un estado normalizado $|\psi\rangle$ ($\langle\psi|\psi\rangle$) la probabilidad $P(a_n)$ de obtener el valor propio no degenerado a_n del observable A es $|\langle a_n|\psi\rangle|^2$, donde $|a_n\rangle$ es el vector propio de $\hat{\mathbf{A}}$ asociado al valor propio a_n.

Para facilitar la

2.4. Operador de densidad

2.5. Evolución temporal en los valores medios

Capítulo 3

$\langle \Psi |$ Preface $| \Psi \rangle$