Capítulo 4

Formalismo

En este apartado no solo nos basamos en el *Griffths*, si no también en el *Sakarui y Napolitano (Cambridge)* y el *Binney, Skinner (Oxford)*. Hasta ahora sólo hemos visto la descripción ondulatoria de la función de onda de *Schrödinger*. Ahora vamos a ver el enfoque algebraico de *Heisemberg*, que aunque resulta más abstracto, a veces proporciona soluciones más simples.

4.1 Introducción

Definición 4.1.1: Notación de Dirac

Llamamos ket a $|\alpha\rangle$, que representa un estado físico mediante a un vector de un espacio vectorial complejo, el *Espacio de Hilbert*.

Teorema 4.1.1 Propiedades de un Ket

1. Suma: $|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle$
2. Producto por un escalar (complejo): $c|\alpha\rangle = |\beta\rangle$
3. Conmutatividad de la suma: $|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle$
4. Asociatividad de la suma: $(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) + |\gamma\rangle = |\alpha\rangle + (|\beta\rangle + |\gamma\rangle)$
5. Distributividad: $c\,(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) = c|\alpha\rangle + c|\beta\rangle$
   $(c+d)\,|\alpha\rangle = c|\alpha\rangle + d|\alpha\rangle$

Definición 4.1.2: Producto interno

El producto interno es el equivalente al producto escalar en nuestro espacio dual. Se define como:

$$\langle \alpha \,|\, \beta \rangle = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \dots \tag{4.1}$$

Notando que el resultado será un escalar complejo.

Teorema 4.1.2 Propiedades del producto interno

1. $\langle \beta \mid \alpha \rangle = \langle \alpha \mid \beta \rangle^*$
2. $\langle \alpha \mid \alpha \rangle = \langle \alpha \mid \alpha \rangle^* \Longleftrightarrow \langle \alpha \mid \alpha \rangle = \|\alpha\|^2 \in \mathbb{R} \Longleftrightarrow \langle \alpha \mid \alpha \rangle \geqslant 0$
3. $\langle \alpha \mid \beta \rangle = 0 \Longleftrightarrow |\alpha\rangle$ y $\langle \beta|$ son ortogonales.
4. Normalización de un estado: $|\tilde{\alpha}\rangle = \frac{1}{\|\alpha\|}|\alpha\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{\langle \alpha \mid \alpha \rangle}}\right)|\alpha\rangle$
5. $|\alpha\rangle = \sum_i c_i |q_i\rangle$
6. $\langle \alpha| = \sum_i c_i^* \langle q_i|$
7. Si $\{|q_i\rangle\}$ es una base $\Longleftrightarrow |q_i\rangle$ son vectores ortonormales por lo que $\langle q_j \mid q_i \rangle = \delta_{ij}$:
   - Si $j = i \longrightarrow \langle q_i \mid q_j \rangle = 1$
   - Si $j \neq i \longrightarrow \langle q_i \mid q_j \rangle = 0$

   $\langle \alpha \mid \alpha \rangle = \sum_j c_j^* \langle q_j| \cdot \sum_i c_i |q_i\rangle = \sum_j \sum_i c_j^* c_i \langle q_j \mid q_i \rangle = \sum_j \sum_i c_j^* c_i \delta_{ij} = \sum_i c_i^* c_i = \sum_i |c_i|^2 = 1$
   Lo cual tiene una interpretación probabilística, decir que $\sum_i |c_i|^2 = 1$ es un postulado de la cuántica.
   Vemos que: $\langle q_n \mid \alpha \rangle = \langle q_n \mid \sum_i c_i |q_i\rangle\rangle = \sum_i c_i \langle q_n \mid q_i \rangle = c_n$

4.2 Operadores y observables

4.2.1. Autovectores y autovalores

Vamos a definir un operador *hermítico* asociado a un observable: $\hat{Q}$

Definición 4.2.1: Autoestados (autovectores) y autovalores

Cuando aplicamos el operador $\hat{Q}$ a un estado y el resultado es que un escalar multiplica al estado, llamamos al escalar autovalor y al estado autoestado.

$$\hat{Q}|q\rangle = q'|q\rangle \tag{4.2}$$

Donde $|q\rangle$ son los autovectores y q' los autovalores.

Como estamos en un espacio dual, sabemos que cada Ket va a tener un estado conjugado que llamaremos Bra. De esta forma, $\langle \alpha|\hat{Q}|\alpha\rangle$ es un Bra-Ket, que representa un valor esperado. Análogamente, si tenemos $c|\alpha\rangle$ y queremos hacer su conjugado, obtenemos $c^*\langle \alpha|$.

Podemos escribir un estado en términos de una base, en términos de q_i ya que si pensamos en $|\alpha\rangle$ como en un vector columna $\vec{A} = a_1\vec{i} + a_2\vec{j}$ se mantiene la ortonormalidad y nos damos cuenta de que podemos escribir $\vec{A} = (a_1, a_2)$ y por tanto $|\alpha\rangle = (a_1, a_2, \ldots)$. Análogamente $\langle \alpha| = (a_1^*, a_2^*, \ldots)$

Definición 4.2.2: Espectro de energías

Cuando tenemos varios autovectores (y autovalores asociados), llamamos *Espectro* al conjunto de todos los autovectores:

$$\{q_1, q_2, \ldots, q_N\} = \{q_i\} \tag{4.3}$$

Estos autovectores deben ser **ortonormales**, es decir, su norma debe ser uno, y deben ser ortogonales entre si. Cualquier estado $|\alpha\rangle$ se puede escribir como combinación lineal de $\{|q_i\rangle\}$ formando una base:

$$|\alpha\rangle = \sum_i^n C_i |q_i\rangle \tag{4.4}$$

4.2.2. Operadores

Definición 4.2.3: Construcción de un operador

Cuando multiplicamos un Ket con un Bra obtenemos un operador:

$$\hat{X} = |\alpha\rangle\langle\beta| \tag{4.5}$$

Podemos comprobar que $\hat{X}$ es un operador aplicandolo a un estado $\hat{X}|\gamma\rangle = |\alpha\rangle\langle\beta\,|\,\gamma\rangle = c|\alpha\rangle$ con $c \in \mathbb{C}$

Definición 4.2.4: Operador hermítico

Si consideramos el operador conjugado al que hemos definido:

$$\hat{X}^\dagger = |\beta\rangle\langle\alpha|$$

Y en general, $\hat{X} \neq \hat{X}^\dagger$, excepto para los **operadores hermíticos**:

$$\hat{X} = \hat{X}^\dagger \tag{4.6}$$

Definición 4.2.5: Operadores

Operador Identidad

Tomando la base $\{|q_i\rangle\}$ definimos como operador identidad:

$$\hat{I} = \sum_i |q_i\rangle\langle q_i| \tag{4.7}$$

Si aplicamos el operador identidad a un estado $|\alpha\rangle$:

$$\hat{I}|\alpha\rangle = \sum_i |q_i\rangle\langle q_i\,|\,\alpha\rangle = \sum_i |q_i\rangle c_i = \sum_i c_i|q_i\rangle = |\alpha\rangle$$

Operador Hamiltoniano

Tomando la base $\{|E_i\rangle\}$ (cuyos autovalores asociados son $\{E_i\}$) definimos como operador hamiltoniano:

$$\hat{H} = \sum_i E_i |E_i\rangle\langle E_i| \tag{4.8}$$

Si aplicamos el operador hamiltoniano a un estado cuya energía está definida:

$$\hat{H}|E_i\rangle = E_i|E_i\rangle$$

Comentario:

Destacar que no podemos aplicar este operador a un estado cuya energía no está definida y sea una superposición de energías. Vamos a ver qué obtenemos cuando calculamos: $\langle\alpha|\hat{H}|\alpha\rangle$:

$$|\alpha\rangle\sum_i E_i|E_i\rangle\langle E_i\,|\,\alpha\rangle = |\alpha\rangle\sum_i E_i|E_i\rangle c_i = \sum_i\langle\alpha\,|\,E_i\rangle c_i = \sum_i c_i^* c_i = \sum_i E_i\cdot c_i^* c_i = \sum_i E_i\cdot|c_i|^2 = \sum_i E_i\cdot P_i = \langle E\rangle$$

4.2.3. Resultados en cuántica

Definición 4.2.6: Valor esperado

Por lo que podemos decir que el valor esperado del observable Q para el sistema en el estado $|\alpha\rangle$ es $\langle\alpha|\hat{Q}|\alpha\rangle = \langle Q\rangle$ y vemos que epara que sea real entonces $\langle\alpha|\hat{Q}|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hat{Q}|\alpha\rangle^* \Longleftrightarrow \hat{Q} = \hat{Q}^\dagger$

En general,

$$\langle\alpha|\hat{Q}|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hat{Q}^\dagger|\alpha\rangle = \left\{\langle\beta|\hat{Q}^\dagger|\beta\rangle\right\}^* \Longleftrightarrow \begin{array}{l}\langle\alpha|\hat{Q}|\beta\rangle = \langle\beta|\hat{Q}^\dagger|\alpha\rangle^* \\ \langle\alpha|\hat{Q}|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hat{Q}^\dagger|\beta\rangle^*\end{array}$$

Y para que $\langle\alpha|\hat{Q}|\beta\rangle = \langle\alpha|\hat{Q}|\beta\rangle^*$ entonces hemos de imponer que $\hat{Q} = \hat{Q}^\dagger$, que el operador ha de ser hermítico.

Colapso de la función de onda

Si al medir un estado $|\alpha\rangle = \sum_i c_i|q_i\rangle$ obtengo q_i, entonces la función de onda colapsa y $|\alpha\rangle \longrightarrow |q_i\rangle$
El postulado fundamental de la mecánica cuántica es entonces:

$$\boxed{|c_i|^2 = |\langle q_i\,|\,\alpha\rangle|^2 \longrightarrow \text{ probabilidad si } \langle\alpha\,|\,\alpha\rangle = 1}$$

4.3 Representación matricial

Consideramos una base $\{|q_i\rangle\}$ ortonormales, escribimos $|\alpha\rangle$ en función de sus componentes en la base $\{|q_i\rangle\}$ de forma que $\langle\alpha\,|\,\beta\rangle = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \dots$

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\end{pmatrix} \qquad \langle\alpha| = \begin{pmatrix}a_1^* & a_2^* & \dots\end{pmatrix} \qquad |\alpha\rangle\langle\beta| = \begin{pmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}b_1^* & b_2^* & \dots\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a_1b_1^* & a_1b_2^* & \dots\\ a_2b_1^* & a_2b_2^* & \dots\\ \vdots & \vdots & \vdots\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}m_{11} & m_{12} & \dots\\ m_{21} & m_{22} & \dots\\ \vdots & \vdots & \vdots\end{pmatrix}$$

Ejemplo 4.3.1 (Supongamos una partícula con dos estados posibles $|0\rangle$ y $|1\rangle$)

De esta forma, cualquier otro estado se podrá escribir como combinación lineal de estos dos estados: $|\alpha\rangle = c_1|0\rangle + c_2|1\rangle$. Si queremos realizar la representación matricial hemos de usar los datos que conocemos:

- $\langle 0\,|\,0\rangle = \langle 1\,|\,1\rangle = 1$
- $\langle 0\,|\,1\rangle = \langle 1\,|\,0\rangle = 0$

Una posible representación será: $|0\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \quad |1\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

Y podemos comprobar que se mantiene la estructura $|\alpha\rangle = c_1|0\rangle + c_2|1\rangle$ y el operador identidad:

$$\langle 0\,|\,0\rangle = \begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = 1 \Longleftrightarrow \boxed{|\alpha\rangle = \begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix} = c_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + c_2\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}}$$

$$\hat{I} = \sum_i |q_i\rangle\langle q_i| = |1\rangle\langle 1| + |0\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} = I$$

$$\hat{I} = \begin{pmatrix}i_{11} & i_{12}\\ i_{21} & i_{22}\end{pmatrix} \Longleftrightarrow \begin{array}{l} i_{11} = \langle 0|\hat{I}|1\rangle \\ i_{12} = \langle 1|\hat{I}|0\rangle\end{array}$$

4.3.1. Conexión con la función de onda

$|\Psi\rangle$ nos da el estado de la partícula en general. Queremos escribir este vector en función de estados con energía definida (estados discretos con coeficientes asociados a la probabilidad).

Ahora los autovectores no serán estados de energía, sino estados de posición, que nos representarán el estado de la partícula en la posición x. Esto ya no es discreto (vs energías), sino que cambia de forma continua (la posición no presenta discontinuidades). En lugar de hacer una suma tendremos que hacer una integral.

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |E_i\rangle \implies \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \psi(x)|x\rangle$$

La función de onda se escribe en esta notación como:

$$\psi(x) = \langle x \mid \psi \rangle \text{ y su conjugado } \psi^*(x) = \langle \psi \mid x \rangle \tag{4.9}$$

y vamos a imponer una ortonormalidad de igual forma que antes con q_i: $\langle q_i \mid q_j \rangle = \delta_{ij}$:

$$\langle x \mid x' \rangle = \delta(x, x') \tag{4.10}$$

Notamos como para la función de onda aseguramos la continuidad convirtiendo la *Delta de Kröneker* en una *Delta de Dirac*, que por definición es

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x')\ dx = 1$$

Vemos entonces la demostración de 4.9:

$$\langle x \mid \psi \rangle = \langle x| \int_{-\infty}^{\infty} dx'\ \psi(x')|x'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx'\ \psi(x')\langle x \mid x' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi(x)\delta(x - x') = \psi(x)$$

Damos ahora la expresión para el producto interno de dos estados de la función de onda:

$$\langle \phi \mid \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \phi^* \psi \tag{4.11}$$

Lo cual es consistente con que $\langle \psi \mid \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \psi^* \psi = 1$

Construcción de operadores

Vamos a construir los operadores en esta notación, tanto para el caso discreto como para el continuo:

- Operador Identidad $\hat{I} = \sum_i |q_i\rangle\langle q_i|$ $\qquad \hat{I} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ |x\rangle\langle x|$
- Operador Posición $\hat{x} = x$ $\qquad \hat{x} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ x|x\rangle\langle x|$

Se deja como ejercicio comprobar que $\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$

4.4 Oscilador Armónico

Vamos a usar esta nueva descripción a través del álgebra lineal para describir el caso del oscilador armónico en *mecánica cuántica*, introduciendo en el camino algunas propiedades trascenndentales, como la conmutación de operadores. Sabemos que las autofunciones serán proporcionales a los polinomios hermíticos $\psi_n \propto \mathcal{H}_n$ y que la energía está cuantizada de forma que $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$

Sabemos que:

$$U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \qquad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad \text{siempre que} \quad \Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)$$

Definición 4.4.1: Operador construcción y destrucción

Definimos los operadores:

$$\hat{a}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}\,(\mp i\hat{p} + m\omega\hat{x})} \tag{4.12}$$

Vamos a ver qué ocurre cuando realizamos el producto de los operadores, llevado cuidado con el orden a causa de la conmutatividad de los operadores:

$$\hat{a}_- \cdot \hat{a}_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega}(+i\hat{p} + m\omega\hat{x})(-i\hat{p} + m\omega\hat{x}) = \frac{1}{2\hbar m\omega}\left(\hat{p}^2 + im\omega\hat{p}\hat{\imath} - im\omega\hat{x}\hat{p} + m^2\omega^2\hat{x}^2\right) =$$

$$\frac{1}{2\hbar m\omega}\left(\hat{p}^2 + m^2\omega^2\hat{x}^2 + im\omega(\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p})\right)$$

Denotamos **conmutador x,p** al término:

$$[\hat{x},\hat{p}] = \hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} \tag{4.13}$$

Vamos a ver qué ocurre cuando aplicamos el conmutador a una función, pues al estar construido por operadores, no es más que otro operador en sí:

$$[\hat{x},\hat{p}]\,f(x) = (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\,f(x) = \hat{x}\hat{p}f(x) - \hat{p}\hat{x}f(x) = \left(-i\hbar x\frac{df}{dx} + i\hbar\frac{d}{dx}(xf(x))\right) = -i\hbar\left(x\frac{df}{dx} - x\frac{df}{dx} - f(x)\right) = i\hbar f(x)$$

Definición 4.4.2: Relación de conmutación canónica

Esta relación tiene que ver con el principio de incertidumbre: los observables que conmuten sí pueden ser denotados simultáneamente.

$$[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar \tag{4.14}$$

Vamos a tratar de reescribir el hamiltoniano en término del conmutador:

$$\hat{a}_- \cdot \hat{a}_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega}\left(\hat{p}^2 + m^2\omega^2\hat{x}^2 + im\omega\,[\hat{x},\hat{p}]\right) = \frac{1}{2\hbar m\omega}\left(\hat{p}^2 + m^2\omega^2\hat{x}^2 + \hbar m\omega\right) = \frac{1}{2\hbar\omega}\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)$$

$$\Longleftrightarrow \hat{a}_- \cdot \hat{a}_+ = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}$$

Y despejando el hamiltoniano, obtenemos que:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \Longleftrightarrow \boxed{\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_- - \frac{1}{2}\right)} \tag{4.15}$$

Ahora el Hamiltoniano empieza a parecerse a la energía cuantizada en el oscilador armónico (chuli). A partir de aquí será muy fácil crear estados con mayor o menor energía. Para ello hemos de ver qué hace el Hamiltoniano cuando actúa sobre un estado.

$$\hat{H}\psi = E\psi \Longleftrightarrow \hat{H}\hat{a}_+\psi = \hbar\omega\left(\hat{a}_+\cdot\hat{a}_- + \frac{1}{2}\right)\hat{a}_+\psi = \hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_-\hat{a}_+ + \frac{1}{2}\hat{a}_+\right)\psi = \hbar\omega\hat{a}_+\left(\hat{a}_-\hat{a}_+ + \frac{1}{2}\right)\psi$$

Se deja como ejercicio comprobar que $[\hat{a}_-\cdot\hat{a}_+] = 1$ y que $[\hat{a}_+\cdot\hat{a}_-] = -1$ y continuando:

$$\hat{H}\hat{a}_+\psi = \hbar\omega\hat{a}_+\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + 1 + \frac{1}{2}\right)\psi = \hat{a}_+\left(\hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\right) = \hat{a}_+\left(\hat{H} + \hbar\omega\right) = \hat{a}_+\left(E + \hbar\omega\right)\psi$$

Es decir:

$$\boxed{\hat{H}\hat{a}_+\psi = \hat{a}_+\left(E + \hbar\omega\right)\hat{a}_+\psi} \quad \text{y} \quad \boxed{\hat{H}\hat{a}_+\psi = \hat{a}_-\left(E - \hbar\omega\right)\hat{a}_-\psi} \tag{4.16}$$

La nueva energía de este estado es una energía que está justo un nivel por encima de la energía de ψ.

Es por esto que llamamos a los operadores $\hat{a}$ operador creación y destrucción, porque $\hat{a}_+\psi$ crea un estado con un nivel de energía por encima del estado ψ, y análogamente el operador destrucción por debajo (si ψ_0 es el estado fundamental $\hat{a}_-\psi_0 = 0$).

De esta forma, sabemos que a partir de la condición $\hat{a}_-\psi_0 = 0$ podemos obtener ψ_0

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(+i\hat{p} - m\omega\hat{x}\right)\psi_0 = 0 \Longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\psi_0 = 0 \Longleftrightarrow \hbar\frac{d\psi_0}{dx} + m\omega\psi_0 = 0 \Longleftrightarrow \int \frac{1}{\psi_0}d\psi_0 = -\int \frac{m\omega x}{\hbar}\,dx$$

$$\boxed{\psi_0 = A\cdot e^{-m\omega/2\hbar x^2}}$$

Si ahora normalizamos:

$$\int_{-\infty}^{\infty}|A|^2\cdot e^{\frac{-m\omega}{\hbar}x^2} = 1 \Longleftrightarrow A = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}^{1/4}\right)$$

$$\boxed{\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/2\hbar}} \tag{4.17}$$

Y si aplicamos esto a la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo, entonces $\hat{H}\psi_0 = E_0\psi_0 \Longleftrightarrow E_0 = \dfrac{\hbar\omega}{2}$ es decir,

$$\hat{H}\psi_0 = \frac{\hbar\omega}{2}\psi_0$$

Si vamos aplicando el operador creación, vemos que en general, $\psi_n(x) = A_n(a_+)^n\psi_0$

Normalización

Vamos a ir aplicando los *ladder operators* y llegamos a las siguientes expresiones:

$$\hat{a_+}\psi_n = c_n\psi_{n+1} \qquad\qquad \hat{a_-}\psi_n = c_n\psi_{n-1}$$

Para que estas funciones tengan sentido físico, han de estar normalizadas, por lo que:

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_n|^2\,dx = 1 \Longleftrightarrow \int_{-\infty}^{\infty}|\psi_{n+1}|^2\,dx = 1 \Longleftrightarrow |c_n|^2\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_{n+1}|^2\,dx = \int_{-\infty}^{\infty}(c_n\psi_{n+1}^*)(c_n\psi_{n+1})\,dx =$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}(\hat{a}_+\psi_n)^*(\hat{(a)}_+\psi_n)\,dx = \boxed{1} = \int_{-\infty}^{\infty}(\hat{a}_-\hat{a}_+\psi_n)^*\psi_n\,dx = \boxed{2} = \int_{-\infty}^{\infty}(n+1)\psi_n^*\psi_n\,dx = (n+1)\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_n|^2\,dx$$

$$|c_n|^2\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_{n+1}|^2\,dx = (n+1)\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_n|^2\,dx \Longleftrightarrow \boxed{|c_n|^2 = (n+1)} \tag{4.18}$$

Comentario:

1. Si tenemos dos funciones f y g: $\int_{-\infty}^{\infty} f^*(\hat{a}_\pm g)\ dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_\mp f)^*\ dx$
2. $\hat{a}_-\hat{a}_+\psi_n = (n+1)\psi_n$
3. c_n es una constante de normalización, no tiene nada que ver con el c_n de la densidad de probabilidad.
4. Se deja como ejercicio comprobar que $|b_n|^2 = n$ (con el operador destrucción)

A modo de conclusión, obtenemos:

$$\hat{a}_+\psi_n = \sqrt{n+1}\cdot\psi_{n+1} \qquad \hat{a}_-\psi_n = \sqrt{n}\cdot\psi_{n-1}$$

$$\psi_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\hat{a}_+\psi_n \qquad \psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}_-\psi_n$$

Si calculamos varias iteraciones llegamos a la expresión en función de n:

- $\psi_1 = \hat{a}_+\psi_0$
- $\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}_+\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_+)^2\psi_0$
- ...

Finalmente:

$$\boxed{\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_+)^n\psi_0} \qquad \boxed{E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)} \qquad \boxed{\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega/2\hbar x^2}} \tag{4.19}$$

4.5 Principio de Incertidumbre Generalizado

Vamos a tratar de generalizar el principio de incertidumbre que ya conocemos, $\sigma_x\sigma_p \geqslant \frac{\hbar}{2}$. Si queremos localizar la partícula, perdemos información sobre su momento y al revés. Esto se puede generalizar para cualquier par de observables, teniendo en mente que cualquier observable se puede asociar a un operador. Tenemos:

$$\left.\begin{matrix} x \longrightarrow \hat{x} \\ p \longrightarrow \hat{p} \end{matrix}\right\} \ [\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$$

Es decir, que los operadores posición y momento lineal no conmutan. No podemos encontrar una base de autovectores que sirva de base a ambas magnitudes a la vez precisamente porque no conmutan. Cuando los operadores conmutan, sí podemos encontrar un autovector que lo es a la vez de ambos operadores.

$$\hat{H}|q_i\rangle = q_i|q_i\rangle \longrightarrow \quad \text{autovalor, en este caso la energía del nivel fundamental}$$

Si encontramos una función que es autovector de dos observables a la vez, podemos conocer ambos observables a la vez, sin ningún tipo de incertidumbre asociada.

Definición 4.5.1: Principio de Incertidumbre de Heisemberg Generalizado

Sean $\hat{A}$ y $\hat{B}$ dos operadores hermíticos y se pueden identificar con observables, se cumple que:

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geqslant \left(\frac{1}{2i}\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right)^2 \tag{4.20}$$

Notando que el elevado al cuadrado viene por la relación con $Cauchy-Schwartz$ y con la parte imaginaria.

El principio de incertidumbre generalizado extiende el principio de incertidumbre, que es solo para posición x y momento lineal p, a cualquier par de observables.
Podemos ver como el principio de incertidumbre sale del principio generalizado aplicado para x y p:

$$\sigma_x^2\sigma_p^2 \geqslant \left(\frac{1}{2i}(i\hbar)\right)^2 \Longleftrightarrow \sigma_x\sigma_p \geqslant \frac{\hbar}{2}$$

Teorema 4.5.1 Condición de Cauchy-Schwartz
Sean $\vec{a}$ y $\vec{b}$ dos vectores radiales desde el origen definimos $\vec{c}$ como el vector que va desde $\vec{a}$ hasta $\vec{b}$. Entonces:

$$|\vec{a}|^2 \cdot |\vec{b}|^2 \geqslant |\vec{a}\cdot\vec{b}|^2 \qquad |\vec{a}| + |\vec{b}| \geqslant |\vec{c}|$$

$$|\vec{a}| + |\vec{b}| \geqslant |\vec{a}+\vec{b}| \Longrightarrow |\vec{a}|^2 + |\vec{b}|^2 + 2|\vec{a}|\cdot|\vec{b}| \geqslant |\vec{a}|^2 + |\vec{b}|^2 + 2|\vec{a}\cdot\vec{b}| \Longrightarrow |\vec{a}|\cdot|\vec{b}| \geqslant |\vec{a}\cdot\vec{b}|$$

Vamos a ver esta condición en el espacio complejo en el que estamos trabajando. En un espacio de Hilbert:

$$\langle f\,|\,f\rangle \cdot \langle g\,|\,g\rangle \geqslant |\langle f\,|\,g\rangle|^2 \qquad \text{donde } |f\rangle \text{ y } |g\rangle \text{ son dos vectores del espacio de Hilbert}$$

Partiendo de esta desigualdad vamos a tratar de llegar al principio de incertidumbre. Para ello, cada uno de esos vectores representará un estado de mi sistema, que modificaremos aplicando un operador. Queremos llegar a:

$$\langle f\,|\,f\rangle \to \sigma_A^2$$
$$\langle g\,|\,g\rangle \to \sigma_B^2$$

$$\left.\begin{array}{l} |f\rangle = \Delta\hat{A}|\psi\rangle \text{ con } \Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle A\rangle \\ |g\rangle = \Delta\hat{B}|\psi\rangle \text{ con } \Delta\hat{B} = \hat{B} - \langle B\rangle \end{array}\right\} \text{Donde } \langle A\rangle \text{ y } \langle B\rangle \text{ son números, vienen multiplicados por } \hat{I}$$

$$\langle f| = \langle\psi|\Delta\hat{A} \quad \langle g| = \langle\psi|\Delta\hat{B} \Longrightarrow \langle f\,|\,f\rangle = \langle\psi|\Delta\hat{A}^2|\psi\rangle = \sigma_A^2 \quad \langle g\,|\,g\rangle = \langle\psi|\Delta\hat{B}^2|\psi\rangle = \sigma_B^2$$

Y ya podemos reescribir la parte de la izquierda:

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geqslant |\langle f\,|\,g\rangle|^2$$

Vamos a ver qué hacemos con la parte de la derecha.

$$\langle f\,|\,g\rangle = z = \mathrm{Re}(z) + i\mathrm{Im}(z) \Longrightarrow |z|^2 = |\mathrm{Re}(z)|^2 + |Im(z)|^2$$

Y como sabemos que $|\mathrm{Re}(z)|^2 \geqslant 0$ trabajamos solo con la parte imaginaria. ¿Cuál es la parte imaginaria de este producto interno?

$$\mathrm{Im}(z) = \frac{z - z^*}{2i} = \frac{\langle f\,|\,g\rangle - \langle g\,|\,f\rangle}{2i} \Longrightarrow \sigma_A^2\sigma_B^2 \geqslant \left(\frac{1}{2i}\left(\langle f\,|\,g\rangle - \langle g\,|\,f\rangle\right)\right)^2$$

- $\langle f\,|\,g\rangle = \langle\psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\psi\rangle = \langle\psi|(\hat{A} - \langle A\rangle)(\hat{B} - \langle B\rangle)|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}\hat{B} - \langle A\rangle\hat{B} - \hat{A}\langle B\rangle + \langle A\rangle\langle B\rangle|\psi\rangle$
- $\langle g\,|\,f\rangle = \langle\psi|\Delta\hat{B}\Delta\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{B}\hat{A} - \langle B\rangle\hat{A} - \langle A\rangle\hat{B} + \langle A\rangle\langle B\rangle|\psi\rangle$
- $\langle f\,|\,g\rangle - \langle g\,|\,f\rangle = \langle\psi|\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle = \langle\left[\hat{A},\hat{B}\right]\rangle$

Y llegamos a que:

$$\boxed{\psi_A^2\psi_B^2 \geqslant \left(\frac{\langle\left[\hat{A},\hat{B}\right]\rangle}{2i}\right)^2}$$

Comentario:

Se deja como ejercicio calcular $|\text{Re}(z)|^2$. Solución: $\text{Re}(z) = \frac{\langle f \mid g\rangle + \langle g \mid f\rangle}{2} = \langle\left\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\right\}\rangle$
Comprobar además que si $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0 \rightarrow \left\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\right\} = 0$
Los operadores contenidos entre llaves los llamamos anticonmutador. Por esta última propiedad es por lo que cuando dos operadores conmutan, podemos conocerlos sin incertidumbre

Un principio de incertidumbre muy empleado es el de energía-tiempo:

$$\Delta E \Delta t \geqslant \frac{\hbar}{2}$$