

Apuntes de mecánica cuántica 1

2023

Apuntes de las clases de *Mecánica Cuántica I* dadas por *María José Caturla* y transcritos a L^AT_EX por *Víctor Mira Ramírez* durante el curso 2023-2024 del grado en Física de la *Universidad de Alicante*.

ÍNDICE

CAPÍTULO	INTRODUCCIÓN	PÁGINA
	1.1 Radiación de cuerpo negro	3
	1.2 Efecto fotoeléctrico	4
	1.3 Espectro de rayos X	4
	1.4 Espectros atómicos	5
	1.5 Experimento de Franck-Hertz	6
	1.6 Longitud de onda de De Broglie	6
	1.7 Ondas Clásicas	7
	1.8 Difracción, doble rendija de Young	10
CAPÍTULO	LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER I	PÁGINA
	2.1 Mecánica clásica no relativista en una dimensión	11
	2.2 Interpretación de la función de onda	12
	2.3 Ecuación de continuidad	13
	2.4 Valores esperados y observables	14
CAPÍTULO	LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER II	PÁGINA
	3.1 Estados estacionarios	17
	3.2 El potencial función delta	24
	3.3 El oscilador armónico	26
CAPÍTULO	FORMALISMO	PÁGINA
	4.1 Introducción	29
	4.2 Operadores y observables Autovectores y autovalores — 30 • Operadores — 31 • Resultados en cuántica — 32	30
	4.3 Representación matricial Conexión con la función de onda — 33	32
	4.4 Oscilador Armónico	34

Capítulo 1

Introducción

1.1 Radiación de cuerpo negro

En el siglo XIX se buscaba el filamento que más radiación emitía (más luz), lo que propició el desarrollo de la física relacionada. Era posible medir el espectro de radiación de distintos cuerpos para estudiarlos. Aquí nace el concepto de cuerpo negro, un cuerpo que absorbe todas las radiaciones idélicamente. La emisión de radiación es una gráfica de energía frente a longitud de onda. Experimentalmente se obtuvieron dos leyes:

Definición 1.1.1: Ley de desplazamiento de Wien

La longitud de onda emitida depende de la temperatura del cuerpo emisor. A mayor temperatura, la longitud de onda emitida será menor (el pico).

$$\lambda_m \cdot T = B \quad (1.1)$$

donde B es la *Constante de Wien* $B = 2,898 \times 10^{-3} m \cdot k$

Comentario:

Si $\lambda_m = 500$, ¿Cuál es la temperatura de la superficie del Sol? $T = 6000k$

Definición 1.1.2: Ley de Stefan-Boltzmann

$$P \propto T^4 \quad (1.2)$$

Permite calcular la potencia irradiada en función de la temperatura.

Una manera de teorizar un cuerpo negro es considerando una esfera con un agujero muy pequeño. La luz que entra por un agujero se ve atrapada dentro, simulando un cuerpo negro. Cuando calcularon la densidad energética de este modelo, sucedía un problema: la **Catástrofe Ultravioleta**. El modelo no podía simular las longitudes de onda más pequeñas, la energía tendía a infinito con una asíntota vertical. Clásicamente se denomina a este modelo el modelo de Rayleigh-Jeans: $u(\lambda)d\lambda = 8\pi\lambda^{-4}KTd\lambda$.

Para resolver este problema, Max Planck tuvo un enfoque mucho más pragmático. Buscó una función que se aproximara a los datos experimentales para después deducir una posible teoría física de ahí. Él sabía que era necesario cambiar la constante de Boltzmann por otra que se acomodara mejor. Es en este punto donde introduce el concepto de la energía como cuantos. Nace aquí la famosa ecuación $\epsilon = h \cdot f$. Hoy en día ya le hemos puesto nombre a esta constante, la **Constante de Planck**. Como la energía es discreta, no se puede usar una integral, debemos hacer uso de sumatorios, lo cual resuelve la catástrofe.

El enfoque cuántico de Planck: $u(\lambda)d\lambda = \frac{8\pi\lambda^{-5}hc}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda kT}\right) - 1}d\lambda$.

Planck no se contentó con esta explicación teórica y dedicó su vida a tratar de buscar teorías alternativas. La constante de Planck es: $h = 6,626 \times 10^{-34} J \cdot s$. El hecho de que la constante sea tan pequeña explica porqué a nivel macroscópico no observamos fenómenos cuánticos.

1.2 Efecto fotoeléctrico

El primero en observar este fenómeno fue Hertz, mientras realizaba un experimento en el que trataba de probar que la luz era una onda. En dicho experimento, encontró un fenómeno que parecía demostrar lo contrario, que la luz se comportaba como una partícula: el efecto fotoeléctrico. Es remarcable el hecho de que Hertz publicara sus resultados a pesar de ser contradictorios.

El efecto fotoeléctrico se basa en que al irradiar con una onda electromagnética un metal se emiten electrones (o fotoelectrones) en algunas condiciones concretas. Al conectar un ánodo con una diferencia de potencial cercano al metal que irradiamos, observamos una corriente eléctrica generada, positiva si colocamos un potencial positivo, y al ir reduciendo el potencial llegamos a un potencial límite donde deja de haber corriente eléctrica, el llamado **Potencial de frenado** (V_0). La frecuencia de la luz incidente es directamente proporcional con la intensidad de corriente.

Teorema 1.2.1 Problemas clásicos del efecto fotoeléctrico

1. No se entendía cómo el potencial de frenado es independiente de la intensidad de la luz.
2. Tampoco podía explicarse clásicamente cómo la emisión de los electrones no sucedía para cualquier longitud de onda, independientemente de la intensidad. Llamamos a la frecuencia por debajo de la cual no se producen fotoelectrones **frecuencia umbral**.
3. Por último, la ausencia de tiempo de retardo entre la llegada de la radiación al metal y la producción de fotoelectrones era inexplicable también.

Fue Einstein quien resolvió este problema, basándose en la teoría de Planck. Einstein postuló que para poder empezar a arrancar electrones de un metal, debíamos superar una función de trabajo Φ dependiente del metal y del tratamiento de su superficie. El rigor en los experimentos era imprescindible para mantener una coherencia en los resultados.

La energía incidente era proporcional a la constante de Planck multiplicado por la frecuencia, hf . La energía cinética que tendrán los electrones emitidos será hf menos la función de trabajo: $E_c = hf - \Phi$ y como $E_c = e|V_0|$, entonces $e|V_0| = hf - \Phi$. La frecuencia umbral será cuando la energía incidente sea exactamente igual a la función de trabajo, pudiendo despejar la frecuencia umbral $hf_u = \frac{\Phi}{h}$.

1.3 Espectro de rayos X

Fueron descubiertos también en el siglo XIX de forma accidental mientras estudiaba rayos catódicos. Se dio cuenta que al hacer incidir electrones sobre un material, aparecía una radiación que no supo describir, y la bautizó como **Rayos X**. Se observó como estos rayos atravesaban materiales en mayor o menor grado en función de su densidad.

No se entendían los picos de la gráfica, así como la aparición de una frecuencia umbral. Fue Einstein quien se dio cuenta de la similitud de esta gráfica con la del efecto fotoeléctrico. Al acelerar electrones, obtenemos una radiación asociada, siguiendo la ecuación anterior: $e|V_0| = hf - \Phi$.

Definición 1.3.1: Ley de Duane-Hunt

Longitud de onda mínima a partir de la cuál aparece una radiación X asociada:

$$\lambda_m = \frac{1,24 \times 10^3}{V} m \quad (1.3)$$

Suponiendo: $e|V_0| \geq \Phi$ $e|V_0| = hf$ $c = \lambda f$

1.4 Espectros atómicos

Se aplicaba a ciertos gases un voltaje para que emitiesen luz. No se veía todo el espectro, sino solo líneas discretas (luz de forma no continua sino discreta). Estos eran los espectros de emisión, también en espectros de absorción: luz blanca impacta en un material y al reflejarse (según el material) faltaban ciertas líneas que correspondían a lo que absorbía y reflejaba el material.

Para cada material se tienen determinadas longitudes de onda. En el estudio de esta sucesión de longitudes de onda se llega a la siguiente expresión que puede describir de forma empírica la posición de dichas líneas: (Por ejemplo la serie del hidrógeno sólo tenía 4 líneas).

Definición 1.4.1: Ecuación de Balmer

$$\lambda_m = \frac{m^2}{m^2 - 4} \cdot 364,6nm \quad (1.4)$$

Donde m es un entero. Sea $m = 3, 4, 5, 6...$ esto funcionaba fenomenal. No sólo daba las líneas ya conocidas, sino que predecía las que se descubrieron posteriormente.

De forma paralela se consigue otra expresión válida para elementos alcalinos:

Definición 1.4.2: Ecuación de Rydberg-Ritz

$$\frac{1}{\lambda_n} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n > m \quad n, m = 1, 2, 3... \quad (1.5)$$

Donde R es la **Constante de Rydberg**, casi independiente del material. ($R_H = 1,096776 \cdot 10^7 m^{-1}$, $R > mf = 1,097373 \cdot 10^7 m^{-1}$)

Esto funciona con el hidrógeno: el espectro es visible, pero además también puede predecir las líneas espectrales que se hallan en el espectro no visible (infrarrojos, UV). La ecuación de Balmer se puede deducir a partir de esta.

Todo esto lleva a que Bohr desarrolle su teoría atómica, pero había dos problemas:

- El momento angular de los electrones de las órbitas había de estar cuantizado.
- Al estar el electrón orbitando alrededor de una carga, se pierde energía, cayendo en espiral y chocando contra el núcleo.

Teorema 1.4.1 Postulados del Modelo atómico de Bohr

1. Los electrones orbitan alrededor del núcleo en estados estacionarios donde no se emite radiación (no siguiendo la mecánica clásica), es decir, son estables.
2. La diferencia de energía entre niveles será aquella de la radiación que se emita.
3. El momento angular del electrón está cuantizado. Consecuentemente, la energía de los estados está cuantizada.

A consecuencia de la cuantización de los radios vamos a demostrar la cuantización de la energía de los electrones $E_c = K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m \left(\frac{kze^2}{mr} \right) = \frac{1}{2} \frac{kze^2}{r} = -\frac{1}{2}U \implies E = U + E_c = U - \frac{1}{2}U = \frac{1}{2}U = -\frac{1}{2} \frac{kze^2}{r}$

De aquí obtenemos una ecuación para la energía en función de n :

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{kze^2}{r_n} = -\frac{1}{2} \frac{mk^2e^4}{\hbar^2} \frac{z^2}{n^2} \quad (1.6)$$

Si llamamos E_0 a $-\frac{1}{2} \frac{kze^2}{r_n} = -\frac{1}{2} \frac{mk^2e^4}{\hbar^2}$, entonces obtenemos que $E_n = -E_0 \frac{z^2}{n^2}$ y como $h\nu = E_i - E_j \Rightarrow h\nu = -E_0 \frac{z^2}{n_i^2} + E_0 \frac{z^2}{n_f^2} = E_0 z^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = \frac{E_0 z^2}{hc} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$ notando que $R_H = \frac{E_0}{hc}$ es la constante de Raylberg.

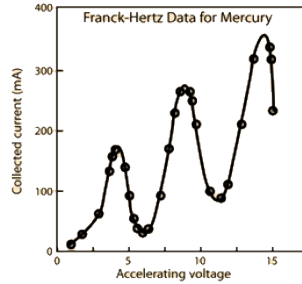
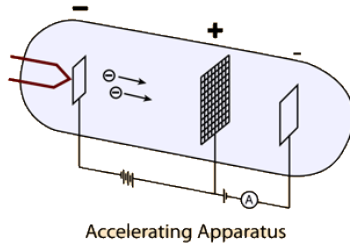
Esto validó el postulado de Bohr.

Hemos llegado a la misma expresión que teníamos antes. Esto implica que tenemos distintos niveles energéticos estacionarios, es decir, que todas las transiciones de $n > 2$ van a emitir fotones con cierta longitud de onda discreta (esto ya se veía experimentalmente, espectro de onda visible).

La teoría de Bohr de nuevo es capaz de predecir el espectro, así como las longitudes de onda en el espectro no visible.

1.5 Experimento de Franck-Hertz

Cápsula con dos placas: cátodo que se calienta y de donde se desprenden electrones, se acelera con cierta diferencia de potencial a una red metálica y detrás otra placa para detectar electrones. Con esto se generaba una corriente eléctrica que se medía con un amperímetro.



Conforme se aumenta el potencial, más electrones llegan a la placa que registra y mayor la corriente. Se observa que a cierto valor de voltaje, baja: tenemos el metal a estudiar en gas, y lo que ocurre es que tenemos T suficiente para que los electrones salten.

Por tanto, la energía que gana la pierde al pasar de un estado 1 a 2, los electrones salen sin T y por haber potencial que los repele no llegan a la placa. Con esto se demuestra la cuantización de los estados.

1.6 Longitud de onda de De Broglie

Llegado a este punto entra De Broglie, que propone que no solo las ondas se pueden comportar como corpúsculo, sino corpúsculo como onda.

$$\left. \begin{array}{l} \text{ENERGÍA} \\ \text{FOTÓN} \end{array} \right\} E = pc \quad E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad \Rightarrow \quad \frac{hc}{\lambda} = pc \quad \boxed{\lambda = \frac{h}{p}} \quad (1.7)$$

Propuso que las partículas se pueden comportar como ondas y que su longitud de onda viene determinada por su momento lineal (y por ello su velocidad).

Nos queda ver cómo los postulados de Bohr solucionan el hecho de que las órbitas de los electrones no irradian.

$$L_n = n\hbar \quad mrv = n\hbar \quad 2\pi r(mv) = n\hbar \xrightarrow{1,7} 2\pi r \cdot \frac{h}{\lambda} = n\hbar \quad \boxed{2\pi r = n\lambda} \quad (\text{la } \lambda \text{ es proporcional a } r).$$

Podemos decir que la onda que forma el electron es **estacionaria** (el origen y final están quietos, si los unimos la onda es circular).

$$\text{VECTOR DE ONDA} \rightarrow \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} < \quad \vec{k} = [\vec{k}] = \frac{2\pi}{\lambda}$$

1.7 Ondas Clásicas

Vamos a trabajar con una onda sinusoidal de longitud de onda λ , periodo T y fase inicial en una única dimensión. Las expresiones que describen este movimiento son las siguientes:

$$y(x, t) = y_0 \cos(kx \pm \omega t + \varphi_0) \quad \text{CONVENIO DE SIGNOS: } < 0 \text{ mueve hacia la derecha} \quad (1.8)$$

Teorema 1.7.1

Número de onda:	$k = \frac{2\pi}{\lambda}$
Frecuencia angular:	$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi}{T}$
Velocidad/fase de propagación:	$v_f = \lambda\nu = \frac{\omega}{k}$

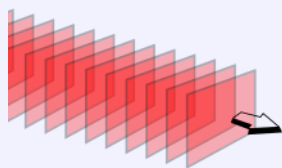
Se puede comprobar que la expresión dada cumple la ecuación de onda, lo cual una vez aplicado De Broglie implica que el momento p está bien definido:

$$\text{ECUACIÓN DE ONDA} \quad \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v_f^2} \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} \quad (1.9)$$

Aquí hallamos el principio de incertidumbre de Heisemberg, puesto que conocemos su momento lineal p pero no su posición, ergo la onda está deslocalizada.

Definición 1.7.1: Onda plana

Llamamos onda plana a aquella onda cuyo frente de onda se ve en un plano.



$$y(x, t) = a_0 e^{i(kx \pm \omega t)} \quad a_0 = y_0 e^{il_0}$$

Está expresada en forma compleja (notación que usaremos de ahora en adelante, puesto que la parte compleja cobra sentido físico en la mecánica cuántica), y para obtener la onda clásica nos quedamos solo con la parte real:

$$\text{Re}[y(x, t)] = \text{Re}[y_0 e^{kx \pm \omega t + l_0}] = y_0 \cos(kx \pm \omega t + l_0)$$

Teorema 1.7.2 Principio de superposición

Si y_1 e y_2 son soluciones de la ecuación de onda, una combinación lineal de ellas también lo será.

Definición 1.7.2: Ondas estacionarias



Se llama onda estacionaria a aquella onda cuyos nodos permanecen inmóviles. Llamamos nodos a los puntos de la onda cruzan el eje de abscisas y son por tanto estáticos en las ondas estacionarias.

Teorema 1.7.3 Interferencia de una onda consigo misma

- Hacia la derecha: $y_1 = y_0 \sin(kx - \omega t)$
- Hacia la izquierda: $y_2 = y_0 \sin(kx + \omega t)$

Para ver la onda resultante de la interferencia de ambas, las sumamos: $y = y_1 + y_2 = y_0 [\sin(kx - \omega t) + \sin(kx + \omega t)] = 2y_0 \sin\left(\frac{kx - \omega t + kx + \omega t}{2}\right) \cdot \left(\frac{kx - \omega t - kx + \omega t}{2}\right) \Leftrightarrow \boxed{y = 2y_0 \sin(kx) \cos(\omega t)}$

Sabiendo que $\sin \alpha + \sin \beta = 2 \sin\left(\frac{\alpha + \beta}{2}\right) \cdot \left(\frac{\alpha - \beta}{2}\right)$

Ahora, aplicamos las condiciones de contorno: $t = 0, y(x = L) \Leftrightarrow \boxed{k \cdot L = n\pi \quad n = 0, 1, 2, \dots}$

Donde cada valor de n se le llama **armónico**. Esta relación puede cambiar si se dan condiciones de contorno distintas.

Como $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ y $\frac{2\pi}{\lambda} \cdot L = n\pi$ entonces, $\boxed{\lambda = \frac{2\pi}{n}}$

Definición 1.7.3: Paquete de ondas

Llamamos **paquete de ondas** a un conjunto de ondas sinusoidales de igual amplitud pero distinta longitud de onda y frecuencia.

$$\left. \begin{aligned} y_1 &= A \cos(k_1 x - \omega_1 t) \\ y_2 &= A \cos(k_2 x - \omega_2 t) \end{aligned} \right\}$$

$$\begin{aligned} y(x, t) &= y_1 + y_2 = A [\cos(k_1 x - \omega_1 t) + \cos(k_2 x - \omega_2 t)] = \\ &2A \cos\left(\frac{k_1 + k_2}{2}x - \frac{\omega_1 + \omega_2}{2}t\right) \cos\left(\frac{k_1 - k_2}{2}x - \frac{\omega_1 - \omega_2}{2}t\right) \end{aligned} \quad (1.10)$$

Siendo los **valores medios**: $\langle k \rangle = \frac{k_1 + k_2}{2}$, $\langle \omega \rangle = \frac{\omega_1 + \omega_2}{2}$

Cada onda se mueve con velocidad $v_1 = \frac{\omega_1}{k_1}$ y $v_2 = \frac{\omega_2}{k_2}$ respectivamente. Además, podemos calcular la velocidad de fase con los valores medios que acabamos de definir:

$$v_f = \frac{\langle \omega \rangle}{\langle k \rangle}$$

También podemos calcular la velocidad de grupo, que es la velocidad a la que se mueve el paquete de ondas:

$$v_g = \frac{\Delta \omega}{\Delta k}$$

Cuando hacemos una superposición sí que podemos localizar la partícula, pero perdemos información sobre su momento. Esto nos vuelve a llevar otra vez al principio de incertidumbre de Heisenberg.

Ejemplo 1.7.1 (Consideramos las siguientes tres ondas y calculamos la superposición de su interferencia (sumándolas))

$$\left. \begin{aligned} \psi_1(x) &= \psi_0 e^{ik_0 x} \\ \psi_2(x) &= \frac{1}{2} \psi_0 e^{i(k_0 - \frac{\Delta k}{2})x} \\ \psi_3(x) &= \frac{1}{2} \psi_0 e^{i(k_0 + \frac{\Delta k}{2})x} \end{aligned} \right\} \psi(x) = \psi_0 e^{ik_0 x} \left(1 + \frac{1}{2} e^{-i\frac{\Delta k}{2}x} + \frac{1}{2} e^{i\frac{\Delta k}{2}x} \right) \Rightarrow \left. \begin{aligned} e^{i\theta} &= \cos \theta + i \sin \theta \\ e^{-i\theta} &= \cos \theta - i \sin \theta \end{aligned} \right\} 2 \cos \theta = e^{i\theta} + e^{-i\theta}$$

$$\boxed{\psi(x) = \psi_0 e^{ik_0 x} \left(1 + \cos \left(\frac{\Delta k}{2} x \right) \right)}$$

En los extremos tenemos que la función se anula y en el centro, que tiene un máximo. Se dice que la onda está localizada y tiene anchura Δx .

La representación de una partícula se puede dar como un paquete de ondas, donde se sabe que la partícula está en Δx (relación con Schrödinger porue perdemos informaciño sobre el momento).

Podemos construir un paquete de ondas sumando tantas ondas como queramos. Una suma infinita de ondas planas con distintios valores de número de onda o de momento se denomina *Serie de Fourier*.

Definición 1.7.4: Series de Fourier

Cualquier función periódica se puede escribir como suma de senos y cosenos.

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{ik_n x} \quad (1.11)$$

Donde A_n son las amplitudos de las ondas, el peso que cada onda tiene en la función.

Vamos a ver que k puede tomar cualquier valor continuo no discreto:

$$k \text{ continua} \Rightarrow \boxed{\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) e^{ikx} dk} \quad (1.12)$$

$g(k)$ tiene el mismo papel que los coeficientes A_n en el caso discreto. $g(k)$ es la *transformada de Fourier* de $\psi(x)$.

Teorema 1.7.4 Plancherel

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx \quad (1.13)$$

El valor de k estará relacionado con la energía de la partícula, será continua en el caso de una partícula libre (puesto que no tiene ningún tipo de restricción). Si quiero hacer un paquete de onda para esa partícula libre, se ha de hacer una integral.

Hemos definido dos velocidades distintas para los paquetes de ondas, una velocidad de fase v_f (ondas dentro del paquete) y una de grupo v_g (de todo el paquete). ¿Cómo las calculamos si tenemos un caso donde k es continuo?

- Velocidad de grupo: $v_g = \frac{\Delta \omega}{\Delta k} \xrightarrow{k \text{ continua}} v_g = \frac{d\omega}{dk}$

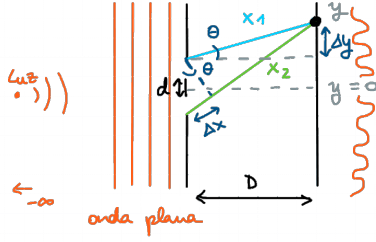
A esta relación entre ω y k se le llama **Relación de dispersión**.

- Relación entre la velocidad de grupo y la velocidad de fase:

$$v_f = \frac{\omega}{k}, \quad \omega = v_f \cdot k \Rightarrow v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(v_f \cdot k)}{dk} = v_f + k \cdot \frac{dv_f}{dk} \Rightarrow \boxed{v_g = v_f + k \cdot \frac{dv_f}{dk}}$$

Si v_f no varía, la onda no cambia de forma, pero si varía, se le llamará **Onda Dispersiva**.

1.8 Difracción, doble rendija de Young



Dos rendijas separadas una distancia d y una pantalla a una distancia D tal que $D \gg d$. Cuando se llega a la doble rendija, se producen nuevas ondas que interfieren entre ellas. Se espera encontrar un patrón de interferencia. Para que se produzca un máximo, la diferencia de caminos debe ser un múltiplo de la longitud de onda λ .

$$\Delta x = x_2 - x_1 = n\lambda \quad n \in \mathbb{Z}$$

Vamos a ver la distancia entre dos máximos Δy en función de algún dato que nos sea conocido.

$$\Delta x = d \cdot \sin \theta \Rightarrow \text{Condición máximo: } \boxed{d \cdot \sin \theta = n\lambda} \quad \frac{\Delta y}{D} = \tan \theta \simeq \sin \theta, \quad \boxed{\Delta y = \frac{n\lambda D}{d}}$$

Vamos a estudiar cómo se presenta el patrón de interferencia:

$$\text{Intensidad} \propto |\psi|^2 \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} \left. \begin{aligned} \psi_1 &= \psi_0 e^{i(kx_1 - \omega t)} \\ \psi_2 &= \psi_0 e^{i(kx_2 - \omega t)} \end{aligned} \right\} \Rightarrow |\psi|^2 &= (\psi_1 + \psi_2) \cdot (\psi_1 + \psi_2) = \psi_1 \cdot \psi_1 + \psi_2 \cdot \psi_2 + \psi_1 \cdot \psi_2 + \psi_2 \cdot \psi_1 = \\ |\psi_0|^2 \left(e^{-i(kx_1 - \omega t)} \cdot e^{i(kx_1 - \omega t)} + e^{-i(kx_2 - \omega t)} \cdot e^{i(kx_2 - \omega t)} + e^{-i(kx_1 - \omega t)} \cdot e^{i(kx_2 - \omega t)} + e^{-i(kx_2 - \omega t)} \cdot e^{i(kx_1 - \omega t)} \right) &= \\ |\psi_0|^2 e^{-i\omega t} \cdot e^{i\omega t} \left(2 + e^{ik(x_2 - x_1)} + e^{ik(x_1 - x_2)} \right) &= \quad (1.14) \\ |\psi_0|^2 \left(2 + e^{ik\Delta x} + e^{-ik\Delta x} \right) &= \\ |\psi_0|^2 (2 + 2 \cos(k\Delta x)) &= \\ |\psi_0|^2 \cdot 4 \cos^2 \left(\frac{k\Delta x}{2} \right) &= \end{aligned}$$

Sabiendo que por Euler $e^{ik\Delta x} + e^{-ik\Delta x} = 2 \cos(k\Delta x)$ y que $\cos(2\theta) + 1 = 2 \cos^2 \theta$

En conclusión, la función que se observa en el patrón:

$$\boxed{|\psi_0|^2 \cdot 4 \cos^2 \left(\frac{k\Delta x}{2} \right)} \quad (1.15)$$

¿Por qué aparece este patrón de interferencia y no solo partículas por donde pasan los electrones? Por los **términos de interferencia**, que no se cancelan (si lo hicieran, tendríamos únicamente dos bandas por donde pasan los rayos).

Capítulo 2

La ecuación de Schrödinger I

2.1 Mecánica clásica no relativista en una dimensión

Clásicamente, se han usado las ecuaciones de Newton para describir la dinámica. En la mecánica cuántica, usaremos una función llamada 'onda de materia' denotada $\Psi(x, t)$, donde nos interesa estudiar la evolución temporal de esta onda. Esta ecuación es un postulado, no se deriva de otras. Schrödinger propuso esta ecuación y la utilizamos porque funciona, los resultados experimentales se corresponden con el artefacto matemático que Schrödinger propuso. Podemos sin embargo tratar de motivar la idea que siguió para definir la ecuación de una forma concreta.

Definición 2.1.1: Ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U \cdot \Psi \quad (2.1)$$

Supongamos una onda de materia del tipo onda plana: $\Psi(x, t) = \Psi_0 \cdot e^{i(kx - \omega t)}$. Vamos a reescribir el número de onda y la frecuencia como múltiplos de \hbar^{-1}

$$\left. \begin{aligned} k &= \frac{2\pi}{\lambda} \\ \lambda &= \frac{h}{p} \end{aligned} \right\} \rightarrow k = \frac{2\pi p}{h} = \frac{p}{\hbar} \quad \left. \begin{aligned} \omega &= 2\pi\nu \\ E &= h\nu \end{aligned} \right\} \rightarrow \omega = \frac{2\pi}{h} E = \frac{E}{\hbar} \quad (2.2)$$

Así, podemos reescribir la ecuación de onda plana como:

$$\Psi(x, t) = \Psi_0 \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \quad (2.3)$$

La energía cinética de una partícula libre en función del momento lineal es $E = \frac{p^2}{2m}$

Si derivamos esta ecuación en función del tiempo y la posición obtenemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \frac{-i}{\hbar} E \cdot \Psi \rightarrow E = -\frac{\hbar}{i} \frac{1}{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \\ \frac{\partial \Psi}{\partial x} &= \frac{i}{\hbar} p \Psi \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi \rightarrow p^2 = -\frac{\hbar^2}{\Psi} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \\ i\hbar \frac{1}{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Psi} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Podemos reescribir esta ecuación en términos del hamiltoniano ya que la primera parte de la ecuación describe la energía total, el primer término de la segunda parte la energía cinética, y el último la potencial. El hamiltoniano en mecánica clásica es $H(x, t) = \frac{p^2}{2m} + U$.

Definición 2.1.2: Operadores

Operador momento

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (2.5)$$

Operador posición

$$\hat{x} = x \quad (2.6)$$

Operador hamiltoniano

Para el caso del hamiltoniano, vemos como la única diferencia entre el hamiltoniano clásico y el operador hamiltoniano son los operadores.

$$\hat{H}(x, t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x}) \implies \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \quad (2.7)$$

Operador energía

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (2.8)$$

Si le aplicamos el operador hamiltoniano y energía a la función de onda:

$$\hat{H}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U\Psi$$

$$\hat{E}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

$$\boxed{\hat{E}\Psi = \hat{H}\Psi} \quad (2.9)$$

Comentario:

Comprobar que una función real no cumple la ecuación de Schrödinger, por ejemplo $\Psi(x, t) = \Psi_0 \cos(kx - \omega t)$ (y tampoco una imaginaria pura).

2.2 Interpretación de la función de onda

La llamada *interpretación de Copenhague* fue aquella postulada por Max Born, quien propuso que el significado físico no lo portaba la función de onda, si no su cuadrado: $|\Psi(x, t)|^2 \cdot dx$. Y esto no es más que una probabilidad, la probabilidad de que la partícula se encuentre entre x , y $x + dx$. Intrínsecamente no podemos conocer con certeza la posición, a diferencia de en la mecánica estadística, en la que la probabilidad viene de la imposibilidad de medida de todo el sistema.

Definición 2.2.1: Densidad de probabilidad

$$\mathcal{P}(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 \quad (2.10)$$

Comentario:

Unidades de la función de onda: $[\Psi] = \frac{1}{[\sqrt{L}]}$

Para conocer la probabilidad de que una partícula se encuentre entre dos puntos $x = a$ y $x = b$, no hay más que integrar:

$$\mathcal{P}_{[a,b]} = \int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (2.11)$$

Vemos como para que esto tenga sentido y la función de onda represente a una partícula, la integral sobre todo el rango de definición debe ser 1, es decir, que la función de onda debe estar normalizada:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (2.12)$$

Si hacemos un a medida y encontramos que la partícula se encuentra en $x = A$, Einstein nos diría que la partícula se encontraba ya ahí anteriormente, y Bohr diría que la partícula se encontraba en una superposición de todas las posiciones posibles, y al realizar la medida definimos su posición. Lo que llamamos el colapso de la función de onda.

Después de la primera medida la función de onda pasa a ser similar a una delta de Dirac centrada en el punto $x = A$.

Teorema 2.2.1 Propiedades de la función de onda $\Psi(x, t)$ para que esta represente una partícula

- Debe ser compleja
- Debe estar normalizada $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$ (para que una función sea normalizable, los límites en el infinito deben ser 0). $\lim_{(x \rightarrow \infty, t)} \Psi(x, t) = 0 \quad \lim_{(x \rightarrow -\infty, t)} \Psi(x, t) = 0$
- Debe ser una función continua y unievaluada.
- Si Ψ_1 y Ψ_2 son soluciones de la *Ecuación de Schrödinger*, una combinación lineal de ellas también es solución. (Principio de superposición) $\Phi(x, t) = \alpha\Phi_1 + \beta\Phi_2$.
Si conozco la condición inicial de la función de onda, conocemos la evolución temporal, es decir, es una ecuación determinística. $\Psi(x, t = 0) \implies |\Psi(x, t)|^2$

2.3 Ecuación de continuidad

Vamos a ver que se cumple una ecuación de continuidad análoga a la de la conservación de carga en *Electromagnetismo*, o la que se ve en *Mecánica de fluidos*.

Definición 2.3.1: Ecuación de continuidad

Una vez hemos definido la densidad de probabilidad 2.11, vamos a estudiar cómo varía esta función en el tiempo, es decir, su derivada temporal.

Conociendo que:

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U\Psi \\ -i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + U\Psi^* \end{aligned} \right\}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{P}(x, t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \cdot \Psi) = \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi + \frac{\partial \Psi}{\partial t} \Psi^* = \left(\frac{\hbar}{i2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} - \frac{U}{i\hbar} \Psi^* \right) \Psi + \left(-\frac{\hbar}{i2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{U}{i\hbar} \Psi \right) \Psi^* = \\ &= \left(-\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi + \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \Psi^* \right) = \frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi^* - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi \right) = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \Psi^* - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \end{aligned}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \Psi^* - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \right) = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \Psi^* + \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x}$$

Definición 2.3.2: Corriente de probabilidad

Una ecuación de continuidad es una ecuación que nos dice que hay una conservación de algún tipo, en nuestro caso lo que se conserva es la probabilidad.

$$\mathcal{J}(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \Rightarrow \boxed{\frac{\partial \mathcal{P}(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{J}(x, t)}{\partial x}} \quad (2.13)$$

Reescrito: $\frac{\partial \mathcal{P}(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{J}(x, t)}{\partial x} = 0$

Una vez tenga la función de onda normalizada, lo estará de forma independiente del tiempo: Si integramos sobre todo el espacio:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \mathcal{P}(x, t)}{\partial t} dx + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \mathcal{J}(x, t)}{\partial x} dx = 0$$
$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{P}(x, t) dx + \mathcal{J}(x = \infty, t) - \mathcal{J}(x = -\infty, t) = 0$$

En conclusión, si $\Psi(x, t)$ es normalizable, lo estará para cualquier tiempo.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{P}(x, t) dx = 0 \quad (2.14)$$

2.4 Valores esperados y observables

Llamamos valor observable a cualquier magnitud susceptible de medida. Todo parámetro observable va a estar relacionado con un operador y viceversa. Nos gustaría conocer, por ejemplo, cuál sería el valor esperado de la posición de la partícula, que denotaremos por $\langle x \rangle$.

Esta probabilidad en un caso discreto es $\langle x \rangle = \sum x_n \cdot P_n$. En el caso continuo: $\langle x \rangle = \int x \cdot f(x) dx$ donde $f(x)$ es una función de probabilidad. Sabemos que en cuántica esto es el cuadrado de la función de onda:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \times \Psi dx \quad (2.15)$$

Calcular un valor medio no implica volver a medir la misma posición sobre la misma partícula (puesto que colapsa y volvería a x_a), sino que tendríamos que preparar varias partículas con la misma función de probabilidad, hacerlas colapsar y tomar el valor esperado de la posición respecto a la medida que vayamos a tomar de cada una.

Esta definición es extensible a cualquier valor observable Q : $Q \rightarrow \langle Q \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} Q \cdot |\Psi(x, t)|^2 dx$

Vamos a ver cómo cambiará el valor esperado de un valor observable en el tiempo, su derivada temporal:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \cdot \Psi) dx = \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx$$

Resolviendo por partes:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx \right) = - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx + x \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \Big|_{-\infty}^{+\infty}$$

Idem con la segunda parte.

En conclusión:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle x \rangle}{dt} &= \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) dx \implies \boxed{\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx} \\ \implies \langle p \rangle &= m \frac{d\langle x \rangle}{dt} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi \right) dx \\ \implies \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{x} \Psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx \end{aligned} \quad (2.16)$$

donde $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi$ es el operador momento lineal \hat{p}

Generalizando el valor esperable:

$$\langle Q \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{Q} \Psi dx \quad (2.17)$$

En este caso necesitamos los operadores en el espacio de posiciones, pero más adelante trabajaremos en el espacio de momentos y cambiará la expresión de los operadores que ya hemos definido. A nivel práctico, tendríamos que hacer lo siguiente para cualquier magnitud que podamos representar en función de x y p .

Ejemplo 2.4.1

En mecánica clásica: $T = \frac{1}{2m} p^2$

$$\langle T \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{1}{2m} \hat{p}^2 \Psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi dx$$

Definición 2.4.1: Incertidumbre

La otra variable que nos interesa conocer a nivel probabilístico es la desviación estándar, que sería equivalente a conocer la anchura de la Gaussiana. Nos da la dispersión de los posibles valores. Es decir, la **incertidumbre**.

$$\sigma = \sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle} \quad (2.18)$$

La dispersión de una variable observable Q , de valor esperado $\langle Q \rangle$ la daremos de la siguiente forma:

$$\Delta Q^2 = (Q - \langle Q \rangle)^2 \implies \sigma = \sqrt{\langle \Delta Q^2 \rangle} = \sqrt{\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2} \quad (2.19)$$

Ya que: $\langle \Delta Q^2 \rangle = \langle (Q - \langle Q \rangle)^2 \rangle = \langle Q^2 + \langle Q \rangle^2 - 2Q\langle Q \rangle \rangle = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2$ (el valor esperado de la suma es la suma de valores esperados).

Para sucesos independientes: $\langle Q\langle Q \rangle \rangle = \langle Q \rangle \cdot \langle Q \rangle$

Ejemplo 2.4.2 (Suponemos que la función de onda que representa a una partícula tiene la siguiente forma:

$$\Psi(x, t=0) = \Psi_0 \cdot e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma x^2}})$$

Vemos como esta función es equivalente a una gaussiana centrada en x_0 .

1. Normalizamos Ψ : $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx = 1$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_0|^2 e^{-\frac{2(x-x_0)^2}{4\sigma x^2}} dx &= |\Psi_0|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma x}} dx = |\Psi_0|^2 \sqrt{2\sigma x} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = |\Psi_0|^2 \sqrt{2\pi\sigma x} = 1 \\ \implies |\Psi_0|^2 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi \cdot \sigma x}} \implies \Psi_0 = \frac{1}{(2\pi \cdot \sigma x^2)^{1/4}} \end{aligned}$$

2. Tenemos un problema porque este número es real y debe ser complejo. Para solucionar esto, le asignamos una cierta fase:

$$\Psi_0 = \frac{e^{i\varphi}}{(2\pi \cdot \sigma_x^2)^{1/4}} \longrightarrow \text{JUSTIFICACIÓN: } |\Phi_0|^2 = \Phi_0^2 \cdot \Phi_0 = \frac{e^{i\varphi} \cdot e^{-i\varphi}}{(2\pi \cdot \sigma_x^2)^{1/4}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x}$$

La probabilidad, que es lo que nos interesa por ser lo que tiene significado físico, se mantiene igual. Por tanto, dos funciones de onda que difieren en cierta fase representan el mismo objeto físico.

3. Nos queda la siguiente función de onda: $\Phi(x, t = 0) = \frac{e^{i\varphi}}{(2\pi \cdot \sigma_x^2)^{1/4}} \cdot e^{-\frac{(x - x_0)^2}{4\sigma_x^2}}$

Y calculamos ahora el valor esperado de x :

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\varphi}}{(2\pi \cdot \sigma_x^2)^{1/4}} \cdot e^{-\frac{(x - x_0)^2}{4\sigma_x^2}} \cdot x \cdot \frac{e^{i\varphi}}{(2\pi \cdot \sigma_x^2)^{1/4}} \cdot e^{-\frac{(x - x_0)^2}{4\sigma_x^2}} \, dx = \\ &= \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot e^{-\frac{(x - x_0)^2}{4\sigma_x^2}} \, dx = \dots = x_0 \end{aligned}$$

Esto tiene sentido por ser una gaussiana centrada en ese valor. También es posible comprobar que $\langle \Delta x^2 \rangle = \sigma_x^2$.

Capítulo 3

La ecuación de Schrödinger II

Hasta ahora hemos visto la ecuación de onda dependiente del tiempo, cuya resolución es bastante complicada. Vamos a ver que esto se facilita con separación de variables.

3.1 Estados estacionarios

Partimos de la siguiente ecuación, la *Ecuación de Schrödinger* dependiente del tiempo: (donde $\Psi = \Psi(x, t)$)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U\Psi$$

La primera simplificación que haremos será considerar potenciales independientes del tiempo $U = U(x)$. Puesto que una combinación lineal de soluciones también es solución, lo que haremos es proponer una solución y a partir de esta obtener el resto de soluciones (como las EDO de tipo Ricatti que vimos en *MAEDO*). En este caso, vamos a proponer una solución del siguiente tipo:

$$\Psi(x, t) = \Psi(x) \cdot \varphi(t) \quad \text{con } \varphi(t) = e^{\frac{-iEt}{\hbar}}$$

Sustituimos esta expresión en la *Ecuación de Schrödinger* y vemos que obtenemos:

$$i\hbar \cdot \frac{\partial(\Psi \cdot \varphi)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2(\Psi \cdot \varphi)}{\partial x^2} + U\Psi\varphi$$
$$\Psi i\hbar$$

Recordando la ecuación (2.9), vemos como la función por el operador hamiltoniano es igual a un valor constante por la función. Este tipo de funciones las llamaremos *autofunciones* (siempre van asociadas a un operador) y la constante (en este caso E) contiene a los *autovalores*

En los estados estacionarios la densidad de probabilidad es constante en el tiempo.

$$\langle H \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{H} \Psi \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* e^{i\frac{E}{\hbar}t} \hat{H} \Psi \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{H} \Psi \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* E \Psi \, dx = E \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi \, dx = E$$

$$\boxed{\langle H \rangle = E \quad \text{y} \quad \sigma_H = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} = 0}$$

Solución general

Si conocemos los estados estacionarios (o las autofunciones Ψ y autovalores E_n para el Hamiltoniano), la solución general será una combinación lineal de ellos:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cdot \Psi_n(x) \cdot e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}}$$

Definimos $|c_n|^2$ como la probabilidad de que al medir la energía de ese sistema obtenga el valor de E_n .

Ejemplo 3.1.1 (Si tenemos dos estados (autofunciones) $\Psi_1(x)$ $\Psi_2(x)$ con energías E_1 y E_2 vamos a calcular la densidad de probabilidad y la solución general)

$$\Psi(x, t) = c_1 \Psi_1(x, t) e^{\frac{-iE_1}{\hbar} t} + c_2 \Psi_2(x, t) e^{\frac{-iE_2}{\hbar} t}$$

$$|\Psi(x, t)|^2 = c_1^2 \Psi_1^2 + c_2^2 \Psi_2^2 + c_1 c_2 \Psi_1 \Psi_2 \left(e^{\frac{-i(E_1 - E_2)t}{\hbar}} + e^{\frac{i(E_1 - E_2)t}{\hbar}} \right)$$

Ejemplo 3.1.2 (Suponemos una partícula de masa m sometida a un potencial fijo:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{para cualquier valor de } x \end{cases}$$

Pozo de potencial cuadrado infinito

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + U\psi = E\psi \iff \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = E\psi \longrightarrow \frac{d^2 \psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi \text{ y llamamos } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Sabemos que $E > 0$ para que la función sea normalizable, lo que nos lleva a resolver la ecuación:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = -k^2 \psi$$

Propuestas a solución:

- $\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$
- $\psi(x) = A' e^{-ikx} + B' e^{ikx}$

Vamos a usar la primera, por lo que hemos de dar las condiciones de contorno.

$$1. \psi_1(x=0) = \psi_2(x=0) \iff A \cdot \sin(k0) + B \cos(k0) = 0 \implies \boxed{B=0}$$

$$2. \psi_2(x=a) = \psi_3(x=a) \text{ y como } \psi_2(x) = A \sin(kx) \longrightarrow A \sin(ka) = 0 \implies \boxed{ka = n\pi} \text{ con } n = 1, 2, 3...$$

Sabiendo que n no puede ser 0 porque si lo es entonces $k=0$ y por tanto $E=0$ y $\psi=0$

$$\text{Despejando ahora la energía sabiendo que } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ y } k = n \frac{\pi}{a} \implies k^2 \hbar^2 = 2mE \longrightarrow E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} \implies$$

$$\boxed{E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}}$$

Que es nuestra condición de cuantización de la energía.

$$3. \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \iff \int_0^a |A|^2 \sin^2(kx) dx = 1 \iff |A|^2 = \frac{2}{a} \longrightarrow \boxed{A = \sqrt{\frac{2}{a}}}$$

$$\text{Finalmente, obtenemos nuestras autofunciones para el pozo infinito: } \boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)}$$

La solución general para un potencial $U(x)$ dadas unas condiciones iniciales $\Psi(x, 0)$ conociendo ψ_n y E_n :

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$$

Donde vemos que solo nos falta conocer $c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \cdot \psi(x, 0) dx$ para los cuales habremos de resolver la Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Otra forma de obtener los coeficientes es a través de

$$\text{la igualdad } \Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n$$

Comentario:

Las funciones de esta familia son ortonormales, es decir que para $n \neq m$, $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \cdot \psi_n = 0$

Ejemplo 3.1.3 (Suponemos una partícula de masa m en un sistema en el que $U = 0 \quad \forall x$)

Pozo de potencial cuadrado finito

La ecuación de una onda $\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t)$

$$\Psi(x, t) = (Ae^{-ikx} + Be^{ikx}) \cdot e^{-i\omega t} \quad \text{con } \omega = \frac{E}{\hbar}$$

En el caso clásico: $H = \frac{p^2}{2m} \quad E = \frac{1}{2}mv^2 \rightarrow v_{\text{clásica}} = \sqrt{\frac{2E}{m}}$

En cuántica: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad \hat{H}\psi = E\psi \rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi$

Propuestas a solución:

- $\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$
- $\psi(x) = A' e^{-ikx} + B' e^{ikx}$

Vamos a buscar una relación entre la energía y la velocidad. Sabemos que: $v = \lambda \nu = \frac{\omega}{k}$ y que $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ y $E = \hbar\omega$.

Finalmente: $v = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{\hbar k} = \frac{E\hbar}{\hbar\sqrt{2mE}} \Rightarrow v_{\text{cuántica}} = \sqrt{\frac{E}{2m}}$

Encontramos dos problemas:

- Observamos como $v_{\text{clásica}} = 2 \cdot v_{\text{cuántica}}$ lo cual es preocupante.
- La ecuación de una onda que se propaga hacia la derecha con una energía $E = \hbar\omega$ es: $\Psi(x, t) = Ae^{+ikx-i\omega t}$. Aquí tenemos el otro problema, esta función no es normalizable.

Para que $\Psi(x, t)$ represente a una partícula, debe cumplir que $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 \cdot e^{ikx+i\omega t} \cdot e^{-ikx-i\omega t} dt = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx = |A|^2(\infty) \Rightarrow \text{No es normalizable}$$

Es por esto, que para obtener la solución general vamos a usar una integral en vez de un sumatorio:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k) \psi(x) \cdot e^{\frac{-iEt}{\hbar}} dk$$

Donde $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ sale de la Transformada de Fourier, de las funciones que usamos como coeficientes $\tilde{\psi}(k)$

Para el problema de las velocidades, vamos a recordar algunas expresiones: $v_f = \frac{\omega}{k}$, $v_{\text{grupo}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m}$, $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$, $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $E = \hbar\omega$, $k^2 = \frac{2m\hbar\omega}{\hbar^2} \Rightarrow v_g = 2 \cdot v_f$

Es decir, que la velocidad que se asemeja a la clásica es la velocidad de grupo. Con esto solucionamos el problema de las velocidades.

Ejemplo 3.1.4 (Barreras y pozos de potencial finitos)

Encontraremos dos coeficientes para conocer información acerca de su transmisión T y reflexión R .

Estados ligados

Un estado ligado es aquel en el que $-V_0 < E < 0$ $V(x) = \begin{cases} -V_0 & -a \leq x \leq a \\ 0 & \text{para cualquier otro valor de } x \end{cases}$

Para resolverlo, vamos a definir tres regiones I , II y III , una desde $-\infty$ hasta $-a$, otra desde $-a$ hasta a y la última desde a hasta ∞ Como es un estado estacionario, sólo tenemos en cuenta el término de la posición:

$$1. \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_I}{dx^2} = -|E|\psi_I \iff \frac{d^2\psi_I}{dx^2} = \frac{2m|E|}{\hbar^2}\psi_I \text{ que con } k = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}, \implies \frac{d^2\psi}{dx^2} = k^2\psi_I$$

$$\textbf{Solución: } \psi_I = Ae^{kx} + Be^{-kx}$$

Y vemos como $B = 0$ para que $\psi(x = -\infty) \rightarrow 0$ y por tanto ψ sea normalizable.

$$2. -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} - V_0 \cdot \psi_{II} = -|E|\psi_{II} \iff \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = -\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}\psi_{II}$$

$$\text{Llamando } l^2 = \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}, \text{ entonces nuestra ecuación nos queda: } \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = -l^2\psi_{II}$$

$$\textbf{Soluciones: } \psi_{II} = C'e^{ilx} + D'e^{-ilx}$$

$$\psi_{II} = C \cos(lx) + D \sin(lx)$$

$$3. \text{ Este caso es análogo al I: } \frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} = k^2\psi_{III}$$

$$\textbf{Solución: } \psi_{III} = Fe^{kx} + Ge^{-kx}$$

Con el mismo argumento que en I, sabemos que $F = 0$ por la normalización.

Las soluciones pares o impares alternarán por ser un potencial simétrico.

■ Solución par:

$$1. \psi_I = Ge^{kx}$$

$$2. \psi_{II} = C \cos(lx)$$

$$3. \psi_{III} = Ge^{-kx}$$

Para obtener G , C , l y k imponemos que ψ , ψ' sean continuas y ψ esté normalizada. Realmente, como hemos definido a l y k en función de E , nuestras únicas incógnitas son E , G y C . Vamos a usar condiciones de contorno:

- $\psi_{II}(x = a) = \psi_{III}(x = a) \iff C \cos(la) = Ge^{-ka}$ Despejamos G : $G = Ce^{ka} \cos(la)$ y aplicamos que la función debe estar normalizada:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1 \iff 2 \int_0^{\infty} |\psi|^2 dx \iff 2 \int_0^a |C|^2 \cos^2(lx) dx + 2 \int_a^{\infty} |G|^2 \cdot e^{-2kx} dx = 1 \dots$$

$$C = \frac{1}{\sqrt{a + \frac{1}{k}}}$$

$$G = \frac{e^{ka} \cdot \cos(la)}{\sqrt{a + \frac{1}{k}}}$$

- $\psi'_{II}(x=a) = \psi'_{III}(x=a) \iff -Cl \sin(la) = -kGe^{-ka} \iff \boxed{l \tan(la) = k}$

La llamada condición de cuantización de la energía, que no tiene solución analítica y se debe resolver o numéricamente o gráficamente. Vamos a reescribirla para poder representarla:

Definición de variables:

$$\xi = ka \quad z = al \quad \xi^2 + z^2 = z_0^2 \iff \xi = \sqrt{z_0^2 - z^2}$$

Desarrollo:

$$l \tan(la) = k \iff al \tan(la) = ka \iff z \tan(s) = \xi \iff k^2 + l^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2} + \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2} =$$

$$\frac{2mV_0}{\hbar^2} \iff (ak)^2 + (al)^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} = z_0^2 \iff \boxed{z_0^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}} \iff z \tan(z) = \sqrt{z_0^2 - z^2} \iff$$

$$\boxed{\tan(z) = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}}$$

- Solución impar: Se deja como ejercicio para el lector yikes

Estados no ligados, estados de *scattering* o estados de dispersión

Un estado no ligado es aquel en el que $E > 0$, y por tanto estamos por encima del pozo de potencial. De igual manera, vamos a dividir el problema en tres regiones I, II, y III.

$$1. \quad \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_I}{dx^2} = |E|\psi_I \iff \frac{d^2\psi_I}{dx^2} = -\frac{2m|E|}{\hbar^2}\psi_I \text{ que con } k = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}, \implies \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi_I$$

Solución: $\psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

Donde el término Ae^{ikx} representa a una partícula incidente desde la izquierda, mientras que el término Be^{-ikx} representa a una partícula reflejada. Puesto que nos encontramos un pozo, la reflexión puede sucederse repetidas veces dentro del pozo, generando una resonancia.

$$2. \quad \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} - V_0\Psi_{II} = E\Psi_{II} \iff \frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} = -\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}\Psi_{II} \text{ con } l = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar} \text{ tenemos } \frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} = -l^2\Psi_{II}$$

Solución: $\psi_{II} = Ce^{ilx} + De^{-ilx}$

3. El caso de la zona III es análogo al I:

Solución: $\psi_{III} = Fe^{ikx}$

Llamamos onda transmitida a la onda que escapa de la resonancia, que se transmite a través del pozo hacia la derecha. Sabemos que Ge^{-ikx} es nulo pues no hay onda reflejada.

Para calcular A, B, C, D, y F inponemos condiciones de frontera:

- $\Psi_I(x=-a) = \Psi_{II}(x=-a)$
- $\Psi'_I(x=-a) = \Psi'_{II}(x=-a)$
- $\Psi_{II}(x=a) = \Psi_{III}(x=a)$
- $\Psi'_{II}(x=a) = \Psi'_{III}(x=a)$

Las soluciones no son normalizables porque no son estados ligados. Puesto que nos falta una ecuación, vamos a definir dos coeficientes, el *Coefficiente de Reflexión* R , y el *Coefficiente de Transmisión* T en función de la corriente de probabilidad \mathcal{J} .

$$R = \frac{|\mathcal{J}_{\text{reflejada}}|}{|\mathcal{J}_{\text{incidente}}|} \quad T = \frac{|\mathcal{J}_{\text{transmitida}}|}{|\mathcal{J}_{\text{incidente}}|}$$

Recordemos la definición de corriente de probabilidad 2.13 tomando $\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t) = \psi(x)e^{-i\omega t}$

$$\mathcal{J}(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi(x)e^{-i\omega t} \frac{\partial}{\partial x} (\psi^* e^{i\omega t}) - \psi^* e^{i\omega t} \frac{\partial}{\partial x} (\psi e^{-i\omega t}) \right)$$

Es decir, que \mathcal{J} es independiente del tiempo.

Para el desarrollo de la $\mathcal{J}_{\text{incidente}}$, recordemos que $\psi(x)_{\text{incidente}} = Ae^{ikx}$:

$$\begin{cases} \mathcal{J}_{\text{inc}} = \frac{i\hbar}{2m} (-|A|^2 e^{ikx} ike^{-ikx} - |A|^2 e^{-ikx} ike^{ikx}) = -\frac{i^2 \hbar k}{m} |A|^2 = \frac{\hbar k}{m} |A|^2 \\ \mathcal{J}_{\text{ref}} = -\frac{\hbar k}{m} |B|^2 \end{cases}$$

De forma que los coeficientes nos quedarán ahora como:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} \quad T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

Pero esta definición sólo funciona cuando el potencial es simétrico, por lo que la definición anterior de los coeficientes es más general.

El coeficiente de transmisión para el pozo cuadrado finito de anchura $2a$ y profundidad V_0 (los cálculos son *densos*):

$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(E + V_0)} \sin^2 \left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \right)$$

De aquí obtenemos una condición de resonancia:

$$\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} = n\pi \iff \frac{4a^2}{\hbar^2} (2mE + 2mV_0) = n^2 \pi^2 \iff 2mE + 2mV_0 = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{4a^2} \implies$$

$$E + V_0 = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(2a)^2}$$

Que es la misma solución la de estados ligados en un pozo infinito de anchura $2a$ que la de la energía del pozo infinito. Es como si existiera un pozo infinito en nuestro pozo finito, y solamente cuando estamos en un estado de resonancia tenemos transmisión.

Ejemplo 3.1.5 (Obtén los coeficientes de reflexión y de transmisión para: $E > V$ y $0 < E < V$)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V > 0 & x > 0 \end{cases}$$

■ **Caso 1:** $E > V_0 > 0$

Lo primero que vamos a calcular son los coeficientes de reflexión y refracción R y T .

$$1. \psi_I = A \cdot e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx} \text{ con } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$2. \psi_{II} = C \cdot e^{ilx} \text{ con } l = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

Donde el término con A corresponde con la onda incidente, el de B con la onda reflejada y el de C con la onda transmitida.

Como $R = \frac{|B|^2}{|A|^2}$ y $T = \frac{l}{k} \frac{|C|^2}{|A|^2}$ Ahora aplicamos las condiciones de contorno:

- $\psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0) \iff A + B = C$
- $\psi'_I(x=0) = \psi'_{II}(x=0) \iff ikA - ikB = i l C \iff k(A - C + A) = l C \iff 2kA - kC = l C \iff$
 $C = \frac{2kA}{l+k} \quad D = \frac{2kA - lA - kA}{l+k} = \frac{k-l}{k+l} A$

Y de aquí obtenemos finalmente los coeficientes:

$$R = \left(\frac{k-l}{k+l} \right)^2$$

$$T = \frac{l}{k} \frac{4k^2}{(l+k)^2} = \frac{4kl}{(l+k)^2}$$

Sabemos que clásicamente $R = 0$ y que $T = 1$, pero en el caso cuántico no sucede así ya que existe cierta probabilidad de que exista reflexión aunque la partícula tenga una energía superior a la del pozo/pared.

$$R \text{ en función de la energía: } R = \frac{4mE - 2mU - 4m\sqrt{E(E-U)}}{4mE - 2mU + 4m\sqrt{E(E-U)}}$$

La representación de R con T es interesante:

■ **Caso 2:** $E > V_0 > 0$

$$1. \psi_I = A \cdot e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx} \text{ con } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$2. -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + V_0\psi_{II} = E \iff -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = E\psi_{II} - V_0\psi_{II} \iff -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = -(V_0 - E)\psi_{II} \iff$$

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \psi_{II} \iff \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = k^2\psi_{II}$$

$$\text{Solucion: } \psi_{II} = C e^{ilx} + D e^{-lx} \text{ con } l = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

pero como hemos de hacer que sea normalizable: $C = 0 \implies \psi_{II} = D e^{-lx}$ Ya que cuando la función ψ se vaya a infinito debe irse a cero.

Para calcular el coeficiente de refracción y de transmisión usaremos la misma fórmula que en el primer caso. Para obtener los coeficientes inponemos condiciones de frontera:

- $\psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0) \iff A + B = D$
- $\psi'_I(x=0) = \psi'_{II}(x=0) \iff ikA - ikB = -lD \iff B(-ik + l) = A(-l - ik) \iff$
 $B = \frac{ik + l}{ik - l}A \iff R = \frac{|\mathcal{J}_{\text{ref}}|}{|\mathcal{J}_{\text{inc}}|} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{(l - ik)(l + ik)}{(-ik - l)(ik - l)} = 1 \iff \boxed{T = 0} \quad \boxed{R = 1}$

Hay cierta probabilidad de que la partícula se encuentre ahí abajo (entre 0 y E), pero no se va a transmitir ya que $T = 0$. Si tengo un tipo de potencial como un pozo invertido, sí que tendría cierta probabilidad de que se transmitiera, pero en el potencial escalón no.

Otra forma de calcular T es mediante su definición, pero hemos de tener cuidado de usar la fórmula con \mathcal{J} y no la genérica. Recordamos:

$$T = \frac{|\mathcal{J}_{\text{trans}}|}{|\mathcal{J}_{\text{inc}}|} \quad \mathcal{J}_{\text{trans}} = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi_t \frac{d\psi_t^*}{dx} - \psi_t^* \frac{d\psi_t}{dx} \right) \text{ y como } \psi_t = De^{-lx} \text{ es una real, } \implies \mathcal{J}_{\text{trans}} = 0 \implies \boxed{T = 0}$$

Ejemplo 3.1.6 ($0 < E < V_0$)

Barrera finita (pozo)⁻¹

1. $\psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ incidente y reflejada
2. Si planteamos la ecuación: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + V_0\psi_{II} = E\psi_{II} \longrightarrow \psi_{II}(x) = Ce^{lx} + De^{-lx}$ exponenciales reales.
3. $\psi_{III}(x) = Fe^{ikx}$ transmitida

Tras unos cálculos arduos, se obtiene para el coeficiente de transmisión:

$$T = \left(1 + \frac{\sinh^2(\sqrt{2m(V_0 - E)} \cdot a/\hbar) }{4E/V_0(1 - E/V_0)} \right)^{-1}$$

3.2 El potencial función delta

La definición de la función delta es:

$$\begin{cases} \delta(x - x_0) = 0 & \text{para } x \neq x_0 \\ \delta(x - x_0) \rightarrow \infty & \text{para } x = x_0 \end{cases} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) dx = 1 \quad f(x)\delta(x - x_0) = f(x_0)\delta(x - x_0)$$

Vamos a considerar un potencial centrado en cero. $U(x) = -\alpha\delta(x)$ para el caso en el que $E < 0$. Vamos a tratar de resolver el problema dividiéndolo en dos trozos I y II .

$$1. -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_I}{dx^2} = -|E|\psi_I \implies \frac{d^2\psi_I}{dx^2} = \frac{2m|E|}{\hbar^2}\psi_I, \text{ donde } k^2 = \frac{d^2\psi_I}{dx^2} = \frac{2m|E|}{\hbar^2}.$$

Vemos cómo debo quitar el término asociado a B para que la función sea normalizable: $\psi_I = Ae^{kx} + Be^{-kx}$

Solución: $\psi_I = Ae^{kx}$

$$2. \text{ De manera análoga, } \psi_{II} = Ce^{kx} + De^{-kx}, \text{ solo que esta vez hemos de igualar a cero la constante } C:$$

Solución: $\psi_{II} = De^{-kx}$

Ahora, vamos a proponer las condiciones de frontera para obtener las constantes:

- Continuidad de la función $\phi_I(x=0) = \phi_{II}(x=0) \iff A = D \quad \psi_I = Ae^{kx} \quad \psi_{II} = Ae^{-kx}$

- Continuidad de la primera derivada: no podemos calcularla directamente, pero podemos obtener la ecuación de la primera derivada $\phi'(x)$ a partir de la *Ecuación de Shrödinger*.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha\delta(x)\psi = E\psi \text{ e integramos para obtener } \frac{d\psi}{dx}: -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} (-\alpha\delta(x))\psi dx = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} E\psi dx$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d\psi}{dx} \Big|_{\epsilon} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\epsilon} \right] - \alpha \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \delta(x)\psi(x) dx = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} E\psi dx \text{ y ahora vamos a tomar el límite:}$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d\psi}{dx} \Big|_{\epsilon} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\epsilon} \right] - \alpha \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \delta(x)\psi(x) dx \right) = 0 \text{ ya que } \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x_0) dx = 1 \text{ y } \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi dx = 0$$

$$\text{Y por tanto ya conocemos el valor de la discontinuidad: } \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{d\psi}{dx} \Big|_{\epsilon} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\epsilon} \right) = -\frac{2m}{\hbar^2} \alpha \psi(0)$$

y evaluamos la función ψ donde hayamos evaluado la función delta.

$$\text{Como conocemos } \begin{cases} \psi_I = Ae^{kx} \\ \psi_{II} = Ae^{-kx} \end{cases} \begin{cases} \frac{d\psi_{II}}{dx} = -Ake^{-kx} \\ \frac{d\psi_I}{dx} = kAe^{kx} \end{cases} \iff -Ak - kA = -\frac{2m}{\hbar^2} \alpha \psi(0) \iff \begin{cases} k = \frac{m}{\hbar^2} \alpha \frac{\psi(0)}{A} \\ \psi(0) = A \end{cases} \iff \boxed{k = \frac{m\alpha}{\hbar^2}}$$

Lo cual nos dice que hay una única cuantización posible, un único estado ligado cuya energía viene dada por esta relación.

Haciendo uso de la condición de normalización, obtenemos el valor de A :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 &\iff \int_{-\infty}^0 |A|^2 e^{2kx} dx + \int_0^{\infty} |A|^2 e^{-2kx} dx = 1 \iff |A|^2 \int_{-\infty}^0 e^{2kx} dx + |A|^2 \int_0^{\infty} e^{-2kx} dx = \\ &= |A|^2 \cdot \frac{e^{2kx}}{2k} \Big|_{-\infty}^0 + |A|^2 \cdot \frac{e^{-2kx}}{-2k} \Big|_0^{\infty} = \frac{|A|^2}{2k} + \frac{|A|^2}{2k} = \frac{|A|^2}{k} = 1 \end{aligned}$$

Vamos a estudiar ahora el caso de los estados de *scattering*, el caso en el que $E > 0$ considerando que la partícula se mueve desde la izquierda hasta la derecha. Como hemos hecho otras veces, vamos a dividir el problema en dos zonas I , y II .

$$1. \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_I}{dx^2} = E\psi_I \iff \frac{d^2\psi_I}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \iff \frac{d^2\psi_I}{dx^2} = -k^2\psi_I$$

Solución: $\psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

Donde el término que acompaña a A corresponde con la onda incidente y el término que acompaña a B corresponde con la onda reflejada.

2. Análogamente, $\psi_{II} = Ce^{ikx} + De^{-ikx}$ pero sabemos que el término que acompaña a D es cero ya que es el término de una onda que viene desde la derecha, y hemos supuesto lo contrario. El término que acompaña a C es el de la onda transmitida.

Solución: $\psi_{II} = Ce^{ikx}$

Por tanto, los coeficientes nos quedan (ya que el potencial es simétrico):

$$R = \frac{|\mathcal{J}_{\text{ref}}|}{|\mathcal{J}_{\text{inc}}|} = \frac{|B|^2}{|A|^2} \quad T = \frac{|\mathcal{J}_{\text{trans}}|}{|\mathcal{J}_{\text{inc}}|} = \frac{|C|^2}{|A|^2}$$

Ahora para las condiciones de frontera tenemos el mismo problema de continuidad de la primera derivada, por lo que vamos a realizar el mismo procedimiento que en el caso anterior.

- Continuidad de ψ_I : $\psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0) \implies A + B = C$
- Continuidad de ψ'_I : $\frac{d\psi_{II}}{dx} \Big|_{x=0} - \frac{d\psi_I}{dx} \Big|_{x=0} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0) \implies ikC - ikA + ikB = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0)$

Y como ψ_{II} tiene menos términos que ψ_I utilizamos su fórmula para sustituir en $\psi(0)$.

Planteamos un sistema con las dos condiciones de frontera y lo resolvemos para obtener A , B , C y D . Con las constantes obtenemos R y T .

$$\left. \begin{aligned} ikC - ikA + ikB &= -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}C \\ A + B &= C \end{aligned} \right\} \iff \boxed{R = \frac{1}{1 + \frac{2\hbar^2 E}{m\alpha^2}}} \quad \boxed{T = \frac{1}{1 + \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 E}}}$$

Análogamente, el caso de una barrera (función delta)⁻¹

$$\boxed{T = \left(1 + \frac{\sinh^2(\sqrt{2m(V_0 - E)} \cdot a/\hbar)}{4E/V_0(1 - E/V_0)}\right)^{-1}} = 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-2 \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)} \cdot a}{\hbar}}$$

3.3 El oscilador armónico

Clásicamente, para calcular el potencial de un oscilador armónico, derivamos la ecuación de la fuerza $F = -kx$ y obtenemos la ecuación de un potencial armónico:

$$F = -\frac{dU}{dx} \implies U = \frac{1}{2}kx^2$$

El potencial asociado a las partículas subatómicas es el potencial de Lennard-Jones, que es el que vemos en la figura. El potencial armónico es una buena aproximación en bajas energías, por lo que es interesante realizar su estudio.

Para empezar, vamos a recordar el hamiltoniano en mecánica clásica:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \iff H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Sabemos que para estudiar el hamiltoniano en cuántica, hemos de reescribirlo en forma de operador:

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

Sea $\Psi(x, t)$ la función de onda de una partícula de masa m en un potencial armónico, vamos a definirla tal que se pueda dividir en una función espacial y una temporal $\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}$:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t) \iff \hat{H}\psi = E\psi$$

Y ahora, la *Ecuación de Schrödinger* nos quedará como:

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2\psi = E\psi \iff \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi = E\psi}$$

Que es la ecuación que vamos a tratar de resolver analíticamente, aunque es resoluble también a través del *Álgebra Lineal*.

Vamos a suponer una cuantización de la energía análoga a la que teníamos en el pozo de potencial, y nuestros objetivos van a ser obtener dichas energías, así como la expresión de la función de onda. Buscamos reescribir la ecuación en función de magnitudes adimensionales que la simplifiquen.

Definimos $U = x/C$ donde x es la posición, por lo que C es una constante que debe tener dimensiones de longitud para que U sea adimensional. Si nos fijamos, la ecuación posee tres constantes, \hbar , m y ω , por lo que hemos reescribir estas para definir una C que tenga dimensiones de longitud. Es fácil comprobar que el resultado es que

C debe ser $\boxed{C = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}$

Teniendo en cuenta esta definición, la ecuación nos queda como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2\psi}{dU^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{\hbar}{m\omega} U^2\psi = E\psi \iff -\frac{\hbar\omega}{2} \frac{d^2\psi}{dU^2} + \frac{\hbar\omega}{2} U^2\psi = E\psi \iff -\frac{d^2\psi}{dU^2} + U^2\psi = \frac{2E}{\hbar\omega} \psi$$

Donde, si nos fijamos, el término de la derecha que acompaña a la energía es adimensional, ya que $\hbar\omega$ tiene unidades de energía. Por tanto, definiremos $\epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$ para simplificar aún más la expresión.

$$\boxed{\frac{d^2\psi}{dU^2} = (U^2 - \epsilon)\psi} \quad (3.1)$$

En el caso en el que $U \rightarrow \infty$ para que la función sea normalizable, $\psi(U \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ lo que nos simplifica la ecuación a:

$$\frac{d^2\psi}{dU^2} = U^2\psi$$

Cuyas soluciones son: $\psi(U) = Ae^{U^2/2} + Be^{-U^2/2}$ y vemos que el término que acompaña a A debe ser cero para que la función sea normalizable por lo que finalmente:

$$\textbf{Solución: } \psi(U) = Be^{-U^2/2}$$

Sin embargo, fuera de la aproximación para todo valor de U , podemos reescribir la ecuación como:

$$\psi(U) = h(U) \cdot e^{-U^2/2}$$

y haciendo uso de 3.1 podemos obtener el valor de $h(U)$, aunque los cálculos no son triviales. Hemos de derivar dos veces la expresión para poder aplicar 3.1:

$$\begin{cases} \frac{d\psi}{dU} = \frac{dh}{dU} e^{-U^2/2} - Uhe^{-U^2/2} = \left(\frac{dh}{dU} - Uh \right) e^{-U^2/2} \\ \frac{d^2\psi}{dU^2} = \left(\frac{d^2h}{dU^2} - h - U \frac{dh}{dU} \right) e^{-U^2/2} - \left(\frac{dh}{dU} - Uh \right) \cdot Ue^{-U^2/2} = \left(\frac{d^2h}{dU^2} - 2U \frac{dh}{dU} - h + U^2h \right) e^{-U^2/2} \end{cases}$$

Y finalmente sustituyendo en la ecuación:

$$\left(\frac{d^2h}{dU^2} - 2U \frac{dh}{dU} - h + U^2h \right) e^{-U^2/2} = (U^2 - \epsilon)he^{-U^2/2} \iff \boxed{\frac{d^2h}{dU^2} - 2U \frac{dh}{dU} - h + \epsilon h = 0}$$

Proponemos como solución de la EDO un polinomio de la forma:

$$h(U) = a_0 + a_1U + a_2U^2 + a_3U^3 + a_4U^4 \dots \iff h(U) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \cdot U^j$$

Por lo que hemos de calcular las derivadas:

$$\begin{cases} \frac{dh}{dU} = a_1 + 2a_2U + 3a_3U^2 + \dots = \sum_{j=1}^{\infty} ja_jU^{j-1} \\ \frac{d^2h}{dU^2} = 2a_2 + 6a_3U + \dots = \sum_{j=2}^{\infty} j(j-1)a_jU^{j-2} \end{cases}$$

Vamos a hacer un cambio de variable para que U^k sea igual en los sumatorios, $j' = j - 2$:

$$\begin{cases} \frac{dh}{dU} = a_1 + 2a_2U + 3a_3U^2 + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} (j+1)a_{j+1}U^j \\ \frac{d^2h}{dU^2} = 2a_2 + 6a_3U + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} (j+1)(j+2)a_{j+2}U^j \end{cases}$$

Reescribiendo la ecuación en función de las derivadas de h :

$$\sum_{j=0}^{\infty} [(j+2)(j+1)a_{j+2}U^j - 2ja_jU^j + (\epsilon-1)a_jU^j] = 0$$

y como podemos sacar U^j factor común, y sabemos que no es cero, entonces el resto del término debe de ser cero:

$$(j+2)(j+1)a_{j+2} - 2ja_jU^j + (\epsilon-1)a_j = 0$$

y despejando a_{j+2}

$$a_{j+2} = \frac{2j+1-\epsilon}{(j+2)(j+1)}a_j$$

Por lo que tenemos una expresión de recurrencia, que usando el *Método de Frobenius*, si conocemos a_0 y a_1 podemos calcular los coeficientes pares y impares: $h(U) = h_{\text{impar}}(u) + h_{\text{par}}(U)$.

Para que la función sea normalizable, hemos de acotar el valor máximo de los coeficientes con un valor máximo a partir del cual $a_{j+2} = 0$, por lo que ya tendríamos nuestros estados de energía. Esto quiere decir que $2j+1-\epsilon = 0$, que es nuestra condición de cuantización. Despejando:

$$\epsilon = 2j+1 \iff \frac{2E}{\hbar\omega} = 2j+1 \longrightarrow E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \text{ con } n = 0, 1, \dots$$

Vemos como si $j \rightarrow \infty \implies a_{j+2} = \frac{2}{j}a_j \implies a_j = \frac{C}{(j/2)!}$ y por tanto $h(U) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{C}{(j/2)!}U^j$ y con $l = j/2$ entonces:

$$h(U) = \sum_{l=0}^{\infty} C \frac{U^{2l}}{l!} = Ce^{U^2}$$

Y como $h(U) = h_{\text{pares}}(U) + h_{\text{impares}}(U)$ entonces:

$$\begin{aligned} h_{\text{pares}}(U) &= a_0 + a_2U^2 + a_4U^4 + \dots \\ h_{\text{impares}}(U) &= a_1 + a_3U^3 + a_5U^5 + \dots \end{aligned}$$

Ejemplo 3.3.1 (Supongamos que es de la forma $h(U) = a_0 + a_1U + \dots$ $j = 1$)

Si dejamos a_0 y a_1 y como $j = 1 \implies \epsilon = 2j+1 = 3$ entonces $a_3 = 0a_1$ y toda la sucesión de impares será cero.

Pero para el caso de los pares, $a_2 = \frac{-2}{2}a_0 = -a_0$, $a_4 = \frac{5}{12}a_2$. Observamos como siempre nos quedará una de las sucesiones (par o impar) anulada, mientras que la otra nos dará coeficientes distintos de cero.

Finalmente, damos la función ya normalizada:

$$\psi_n(U) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \mathcal{H}_n(U) e^{-\frac{U^2}{2}}$$

Donde \mathcal{H}_n son los Polinomios Hermíticos ($H_n = \{1, 2U, 4U^2 - 2, \dots\}$) que aparecen tras imponer la condición de normalización de la función de onda.

Capítulo 4

Formalismo

En este apartado no solo nos basamos en el *Griffiths*, si no también en el *Sakurai 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 *Heisenberg*, 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:

$$\langle\alpha|\beta\rangle = a_1^*b_1 + a_2^*b_2 + \dots \quad (4.1)$$

Notando que el resultado será un escalar complejo.

Teorema 4.1.2 Propiedades del producto interno

1. $\langle \beta | \alpha \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle^*$
2. $\langle \alpha | \alpha \rangle = \langle \alpha | \alpha \rangle^* \iff \langle \alpha | \alpha \rangle = \|\alpha\|^2 \in \mathbb{R} \iff \langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0$
3. $\langle \alpha | \beta \rangle = 0 \iff |\alpha\rangle$ y $|\beta\rangle$ son ortogonales.
4. Normalización de un estado: $|\tilde{\alpha}\rangle = \frac{1}{\|\alpha\|}|\alpha\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}}\right)|\alpha\rangle$
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 $\iff |q_i\rangle$ son vectores ortonormales por lo que $\langle q_j | q_i \rangle = \delta_{ij}$:
 - Si $j = i \longrightarrow \langle q_i | q_i \rangle = 1$
 - Si $j \neq i \longrightarrow \langle q_i | q_j \rangle = 0$

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \sum_j c_j^* \langle q_j | \cdot \sum_i c_i |q_i\rangle = \sum_j \sum_i c_j^* c_i \langle q_j | q_i \rangle = \sum_j \sum_i c_j^* c_i \delta_{ij} = \sum_i c_i^* c_i = \sum_i |c_i|^2 = 1$$

Lo cual tiene una interpretación probabilística, decir que $\sum_i |c_i|^2 = 1$ es un postulado de la cuántica.

Vemos que: $\langle q_n | \alpha \rangle = \langle q_n | \sum_i c_i |q_i\rangle = \sum_i c_i \langle q_n | q_i \rangle = c_n$

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.

$$\hat{Q}|q\rangle = q'|q\rangle \quad (4.2)$$

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 $|\alpha\rangle = (a_1, a_2, \dots)$. Análogamente $\langle \alpha | = (a_1^*, a_2^*, \dots)$

Definición 4.2.2: Espectro de energías

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

$$\{q_1, q_2, \dots, q_N\} = \{q_i\} \quad (4.3)$$

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:

$$|\alpha\rangle = \sum_i^n C_i |q_i\rangle \quad (4.4)$$

4.2.2. Operadores

Definición 4.2.3: Construcción de un operador

Cuando multiplicamos un Ket con un Bra obtenemos un operador:

$$\hat{X} = |\alpha\rangle\langle\beta| \quad (4.5)$$

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**:

$$\hat{X} = \hat{X}^\dagger \quad (4.6)$$

Definición 4.2.5: Operadores

Operador Identidad

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

$$\hat{I} = \sum_i |q_i\rangle\langle q_i| \quad (4.7)$$

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:

$$\hat{H} = \sum_i E_i |E_i\rangle\langle E_i| \quad (4.8)$$

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 para que sea real entonces $\langle \alpha | \hat{Q} | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{Q} | \alpha \rangle^* \iff \hat{Q} = \hat{Q}^\dagger$

En general,

$$\langle \alpha | \hat{Q} | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{Q}^\dagger | \alpha \rangle = \{ \langle \beta | \hat{Q}^\dagger | \beta \rangle \}^* \iff \begin{aligned} \langle \alpha | \hat{Q} | \beta \rangle &= \langle \beta | \hat{Q}^\dagger | \alpha \rangle^* \\ \langle \alpha | \hat{Q} | \alpha \rangle &= \langle \alpha | \hat{Q}^\dagger | \alpha \rangle^* \end{aligned}$$

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 $| \alpha \rangle \rightarrow | q_i \rangle$

El postulado fundamental de la mecánica cuántica es entonces:

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

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 $\langle \alpha | \beta \rangle = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \dots$

$$| \alpha \rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \langle \alpha | = (a_1^* \quad a_2^* \quad \dots) \quad | \alpha \rangle \langle \beta | = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} (b_1^* \quad b_2^* \quad \dots) = \begin{pmatrix} a_1 b_1^* & a_1 b_2^* & \dots \\ a_2 b_1^* & a_2 b_2^* & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \dots \\ m_{21} & m_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

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:

$$\langle 0 | 0 \rangle = (1 \quad 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \iff | \alpha \rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

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

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

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:

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

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

$$\langle x | x' \rangle = \delta(x, x') \quad (4.10)$$

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

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

Vemos entonces la demostración de 4.9:

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

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

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi^* \psi \quad (4.11)$$

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

Construcción de operadores

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

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

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 trascendentes, 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:

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

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

Definición 4.4.1: Operador construcción y destrucción

Definimos los operadores:

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

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:

$$\begin{aligned} \hat{a}_- \cdot \hat{a}_+ &= \frac{1}{2\hbar m\omega} (+i\hat{p} + m\omega\hat{x})(-i\hat{p} + m\omega\hat{x}) = \frac{1}{2\hbar m\omega} (\hat{p}^2 + im\omega\hat{p}\hat{x} - im\omega\hat{x}\hat{p} + m^2\omega^2\hat{x}^2) = \\ &= \frac{1}{2\hbar m\omega} (\hat{p}^2 + m^2\omega^2\hat{x}^2 + im\omega(\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p})) \end{aligned}$$

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

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} \quad (4.13)$$

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.

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (4.14)$$

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

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

Y despejando el hamiltoniano, obtenemos que:

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

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.

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

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

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

Es decir:

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

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

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

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

Si ahora normalizamos:

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

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

Y si aplicamos esto a la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo, entonces $\hat{H}\psi_0 = E_0\psi_0 \iff E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ 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:

$$\hat{a}_+\psi_n = c_n\psi_{n+1} \quad \hat{a}_-\psi_n = c_n\psi_{n-1}$$

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

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 dx = 1 &\iff \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{n+1}|^2 dx = 1 \iff |c_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{n+1}|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} (c_n\psi_{n+1}^*)(c_n\psi_{n+1}) dx = \\ &\int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_+\psi_n)^*(\hat{a}_+\psi_n) dx = \boxed{1} = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_-\hat{a}_+\psi_n)^*\psi_n dx = \boxed{2} = \int_{-\infty}^{\infty} (n+1)\psi_n^*\psi_n dx = (n+1) \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 dx \\ &|c_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{n+1}|^2 dx = (n+1) \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 dx \iff \boxed{|c_n|^2 = (n+1)} \end{aligned} \quad (4.18)$$

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:

$$\begin{aligned}\hat{a}_+\psi_n &= \sqrt{n+1} \cdot \psi_{n+1} & \hat{a}_-\psi_n &= \sqrt{n} \cdot \psi_{n-1} \\ \psi_{n+1} &= \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}_+\psi_n & \psi_{n-1} &= \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}_-\psi_n\end{aligned}$$

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:

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}_+)^n \psi_0$$

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

$$\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-m\omega/2\hbar x^2} \quad (4.19)$$