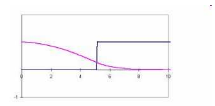
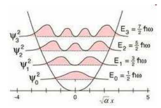
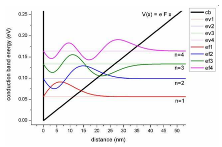
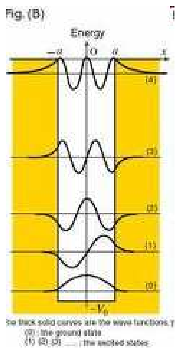
Q4_s2









SCHROEDINGER

La ecuacion de Schroedinger

Scroedinger siguio hasta cierto punto los postulados de De Broglie primeramente intento una teoria completamente relativista pero luego termino haciendo algo "clasico"

El habló de ondas representadas por una funcion $\Psi(x,t)$

Tenemos que segun De Broglie

$$\lambda = h/p$$

$$\nu = E/h$$

Por otro lado, Schroedinger tomó

$$\boxed{E = p^2/(2m) + V}$$

Condiciones a satisfacer

a) ser consistente con las ecuaciones anteriores

b) deberia ser linea en $\Psi(x,t)$ para que valga superposicion es decir que tambien sea solucion la combinacion:

$$\Psi(x,t) = a\Psi(x,t) + b\Psi(x,t)$$

c) La energia potencial V es en general una funcion de x , t, si $V(x,t) = V_0 \Rightarrow$

$$F = -\frac{\partial V(x,t)}{\partial x} = 0$$

$$\Psi = \gamma \sin(Kx - \omega t) + \cos(Kx - \omega t)$$

$$\alpha \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V_0 \Psi = \beta \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Hay dos soluciones , tomamos $\gamma = i$ y $\beta = i\hbar$, resultando

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V_0 \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}}$$

Si V_0 no es constante se postula que

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}}$$

Interpretacion de la Ecuacion de Schroedinger

En 1926 Born propuso el postulado siguiente:

Si en un instante t se realiza una medicion para localizar la particula asociada con una funcion de onda $\Psi(x,t)$ entonces la probabilidad $P(x,t)dx$ que la particula se encuentre entre x y $x + dx$ es

$$\boxed{P(x,t)dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx}$$

Ecuacion de balance para la probabilidad

$$-\frac{\hbar}{m}[K\Psi^*\Psi]_{x_1}^{x_2} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} \Psi^*\Psi dx$$

Como $\hbar K/m = p/m = v'$, resulta

$$\boxed{(v\Psi^*\Psi)_{x=x1} - (v\Psi^*\Psi)_{x=x2} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{x1}^{x2} \Psi^*\Psi dx}$$

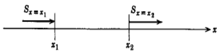


Figure 7-1. Illustrating the one dimensional conservation equation.

Schroedinger independiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

Entonces con $V(x,t) \rightarrow V(x)$ tenemos

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x)\phi(t) + V(x)\psi(x)\phi(t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x)\phi(t)}$$

$$\boxed{\Psi(x,t) = \psi(x) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)}$$

Las soluciones $\psi(x)$ no son necesariamente complejas

Cuantificacion de la Energia en Schroedinger

La "parte observable" de $\Psi(x,t)$ es

$$P(x,t)dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx$$

$$S(x,t) = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right]$$

1	$\psi(x)$	*finita*
2	$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$	*finita*
3	$\psi(x)$	*continua*
4	$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$	*continua*

Pues de no ser asi...si **no** se **cumple**

1	$\psi(x)$	*finita*
2	$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$	*finita*
3	$\psi(x)$	*continua*
4	$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$	*continua*

1)$\Rightarrow$ la probabilidad no esta definida

2)$\Rightarrow$ S no esta bien definida $S(x,t) = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right]$

3)$\Rightarrow$no se cumple 2)

4) $\Rightarrow$ como

$$\frac{1}{\psi(x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + V(x)\psi(x)\right] = C$$

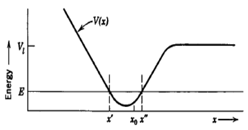
$$\Rightarrow$$

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

$$\Rightarrow$$

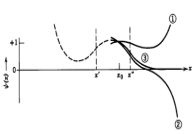
$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi(x)$$

Entonces para $V(x)$ y E finitos con $\psi(x)$ finita por 1) $\Rightarrow$ $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)$ luego $\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$ debe ser continua



$$\psi(x_1) = \psi(x_0) + \left[\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\right]_{x0}[x_1 - x_0]$$

$$\left[\frac{d}{dx}\psi(x)\right]_{x1} = \left[\frac{d}{dx}\psi(x)\right]_{x0} + \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E][\psi(x)]_{x0}[x_1 - x_0]$$



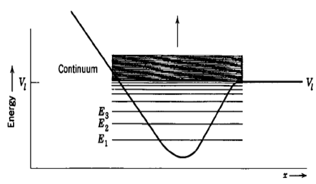
si $[V(x) - E] < 0 \Rightarrow$ para

$$[\psi(x)] > 0 \Rightarrow \Delta\left[\tfrac{d}{dx}\psi(x)\right] < 0$$

$$[\psi(x)] < 0 \Rightarrow \Delta\left[\tfrac{d}{dx}\psi(x)\right] > 0$$

Entonces si tenemos varios valores de E cuanto mayor es E mayor es la curvatura (digamos en x_0) luego la curvatura mayor corresponde a moyor energia.

Si ahora el potencial es del tipo



Aqui solo debemos ajustar "de un lado" y en este caso para todo valor de E podemos conseguir una solucion.

Otra aproximación a la resolución numérica

Sabemos que la ecuacion se escribe como

$$\boxed{\frac{d^2}{dx^2}\psi = -\frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi}$$

10^{27} en cgs (muy grande)

Eso se reescribe como

$$\frac{d^2}{dz^2}\psi = -[e - W]\psi$$

Que es la forma adimensional

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2}Cx^2\right)$$

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} = -(e - z^2)\psi$$

Para el oscilar la ecuacion es

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{C}{2}x^2 \Rightarrow$$

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{C}{m}}$$

$$\boxed{E = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\varepsilon}$$

Luego dada la frecuencia caracteristica tomamos una energia caracteristica

---

Reescribimos ahora

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = (-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{2}\hbar\omega_0\varepsilon + \frac{2m^2}{\hbar^2}\frac{1}{2}\omega_0^2x^2)\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = (-\frac{m}{\hbar}\omega_0\varepsilon + \frac{m^2}{\hbar^2}\omega_0^2x^2)\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{m}{\hbar}\omega_0(\varepsilon - \frac{m}{\hbar}\omega_0x^2)\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2(\frac{m}{\hbar}\omega_0)} = -(\varepsilon - \frac{m}{\hbar}\omega_0x^2)\psi$$

con

$$\boxed{z^2 = \frac{m}{\hbar}\omega_0x^2 \Rightarrow x = \left(\frac{\hbar}{m\omega_0}\right)^{1/2}z}$$

Para el oscilador armonico $V(x) = \frac{1}{2}Cx^2 \rightarrow W(z) = z^2$

con

$$\boxed{\begin{aligned} E &= \frac{1}{2}\hbar\omega_0\,\varepsilon \\ x &= \left(\frac{\hbar}{\mu\omega_0}\right)z \\ \omega_0 &= \left(\frac{C}{\mu}\right)^{1/2} \end{aligned}}$$

Algunas definiciones para el calculo numerico

$$z \rightarrow z_j = j \cdot \Delta z$$

$$\psi(z) \rightarrow \psi(z_j) = \psi_j$$

$$W(z) \rightarrow W(z_j) = W_j$$

Para la derivada primera :

La derivada de ψ en el punto $(j+\frac{1}{2})\Delta z$ (en el medio de los puntos de grilla j y $(j+1)$)

$$\frac{\psi_{j+1}-\psi_j}{\Delta z}$$

Para la derivada Segunda :

$$\left[\frac{d^2}{dz^2}\psi\right]_{z_j} = \frac{\frac{\psi_{j+1}-\psi_j}{\Delta z} - \frac{\psi_j-\psi_{j-1}}{\Delta z}}{2\Delta z}$$

$$= \frac{\psi_{j+1}-2\psi_j+\psi_{j-1}}{2(\Delta z)^2}$$

Lo cual da para $\frac{d^2}{dz^2}\psi = -[e-W]\psi$

$$\boxed{\frac{\psi_{j+1}-2\psi_j+\psi_{j-1}}{2(\Delta z)^2} = -[e-W_j]\psi_j \rightarrow}$$

$$\psi_{j+1} = -[e-W_j]\psi_j 2(\Delta z)^2 + 2\psi_j - \psi_{j-1}$$

$$\boxed{\psi_{j+1} = (2-2(\Delta z)^2[e-W_j])\psi_j - \psi_{j-1}}$$

Suponemos un potencial simétrico $\rightarrow$ $V(x)=V(-x)$

Para resolver : $\psi_{j+1} = (2-2(\Delta z)^2[e-W_j])\psi_j - \psi_{j-1}$

Necesitamos dar valores

Para ψ:

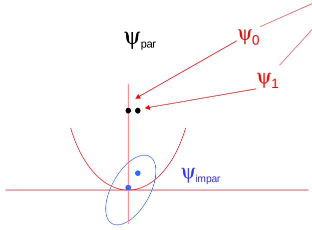
Dado un potencial simétrico luego dado que el observable fundamental es la Probabilidad asociada a $\psi^2(x)$, pero por simetria

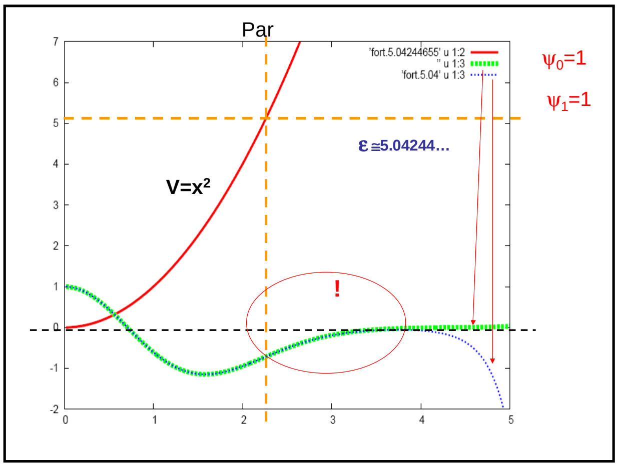
$$\boxed{\begin{array}{c}\Psi^2(x)=\Psi^2(-x)\Rightarrow \\ \Psi(x)=\pm\,\Psi(-x)\end{array}}$$

Luego son pares o impares

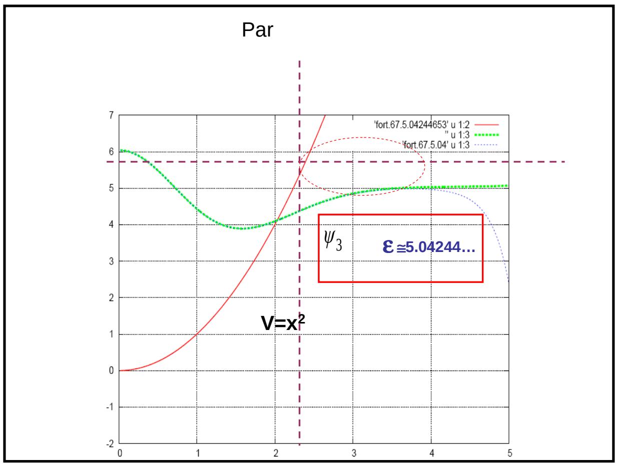
Si ahora me fijo en las pares en x=0

$$\psi_{j+1} = (2-2(\Delta z)^2[e-W_j])\psi_j - \psi_{j-1}$$

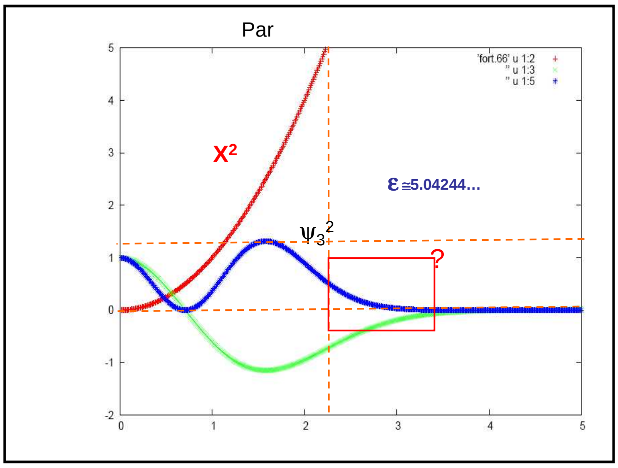




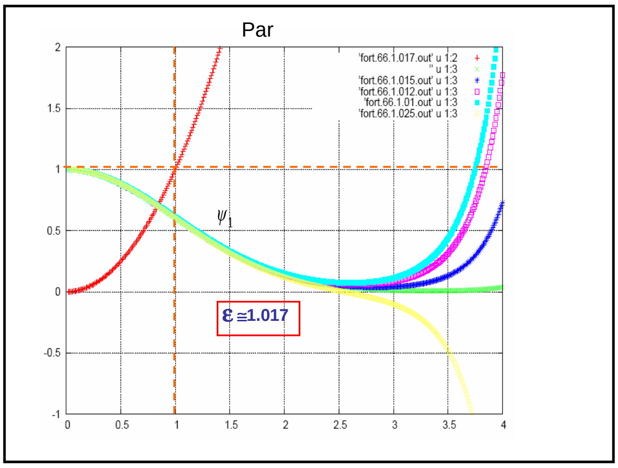
Par
'fort.5.04244655' u 1:2
'' u 1:3
'fort.5.04' u 1:3
$\psi_0=1$
$\psi_1=1$
$\varepsilon \cong 5.04244...$
$V=x^2$
!



Par
'fort.67.5.04244653' u 1:2
'' u 1:3
'fort.67.5.04' u 1:3
ψ_3
$\varepsilon \cong 5.04244...$
$V=x^2$

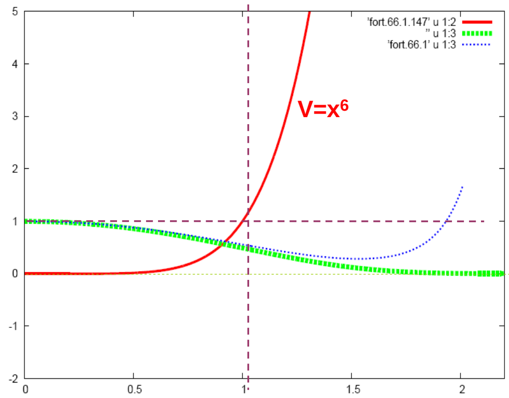


Par
'fort.66' u 1:2
'' u 1:3
'' u 1:5
X^2
$\varepsilon \cong 5.04244...$
ψ_3^2
?

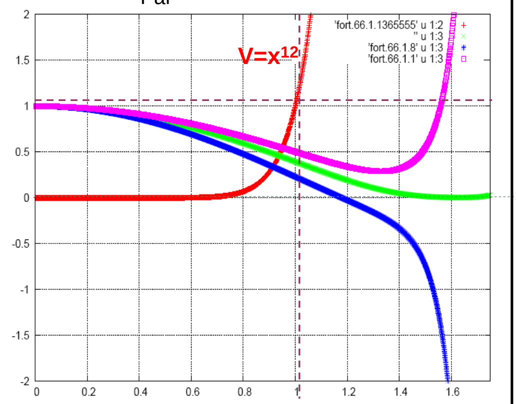


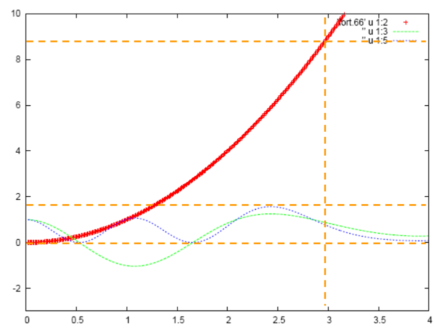
Par
'fort.66.1.017.out' u 1:2
'' u 1:3
'fort.66.1.015.out' u 1:3
'fort.66.1.012.out' u 1:3
'fort.66.1.01.out' u 1:3
'fort.66.1.025.out' u 1:3
ψ_1
$\varepsilon \cong 1.017$

Par

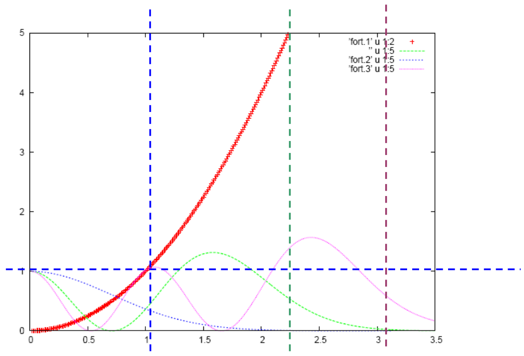


Par

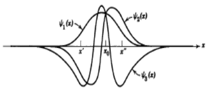




No normalizadas



Tenemos un conjunto discreto de valores de energia.



Si se estudian las cosas en x_0

$E_2 > E_1 \Rightarrow$

$|[V(x) - E_2]| > |[V(x) - E_1]|$

como

$$\frac{d^2\Psi_1}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar}[V(x) - E]\Psi$$

entonces

$$\boxed{\left|\frac{d^2\Psi_2}{dx^2}\right| > \left|\frac{d^2\Psi_1}{dx^2}\right|}$$

Propiedades de la funcionde ondas

1) Dado $V(x)$ obtenemos una secuancia de energias posibles que llamamos autovalores

$$E_1, E_2, E_3, \ldots$$

A cada uno de ellos corresponde un autofuncion

$$\boxed{\psi_1, \psi_2, \psi_3, \ldots}$$

Las correspondientes funciones de onda son

$$\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \ldots$$

$$\boxed{\psi_1 \exp(-iE_1 t/\hbar)}, \boxed{\psi_2 \exp(-iE_2 t/\hbar)}, \boxed{\ldots}$$

2) Cada una de la Ψ_n es una solucion particular

Tambien lo sea cualesquiera combinacion lineal de ellas,

u:

$$\boxed{\Psi(x,t) = a\,\Psi_1(x,t) + b\,\Psi_2(x,t)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) - i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = 0$$

Entonces

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(a\Psi_1(x,t) + b\Psi_2(x,t))$$
$$+ V(a\Psi_1(x,t) + b\Psi_2(x,t))$$
$$- i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(a\Psi_1(x,t) + b\Psi_2(x,t)) = 0$$

Esto se factoriza y da dos terminos iguales

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(a\Psi_1(x,t)) + V(a\Psi_1(x,t)) -$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(b\Psi_2(x,t)) \quad \ldots \text{ etc.}$$

queda entonces

$$\overbrace{\boxed{\begin{aligned} & a\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi_1(x,t) + V\Psi_1(x,t) - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_1(x,t)\right] + \\ & b\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi_2(x,t) + V\Psi_2(x,t) - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_2(x,t)\right] \\ & = 0 \end{aligned}}}^{=0}$$

Cada termino se anula

Esto es valido para cualesquiera cantidad de terminos

$$\boxed{\Psi(x,t) = \sum a_j \Psi_j(x,t)}$$

3 Como es la densidad de probabilidad para una Ψ generica?

$$\Psi(x,t) = \sum a_j \Psi_j(x,t)$$
$$= \sum \underbrace{a_j \psi_j(x)\exp(-iE_j t/\hbar)}_{\Rightarrow V=V(x)} \Rightarrow$$

Y el conjugado

$$\Psi^*(x,t) = \sum a_j^* \psi_j^*(x)\exp(+iE_j t/\hbar)$$

Calculamos ahora

$$\boxed{\begin{aligned} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = & \sum_j a_j^* a_j \psi_j^*(x)\psi_j(x) \\ & + \sum_k \sum_{\substack{l \\ k\neq l}} a_k^* a_l \psi_k^*(x)\psi_l(x) \cdot \\ & \cdot \exp(-i(E_l - E_k)t/\hbar) \end{aligned}}$$

Luego depende del tiempo

4 Para una sola Ψ_n

$$\Psi_n^*(x,t)\Psi_n(x,t) = a_n^* a_n \psi_n^*(x)\psi_n(x)\exp(-i(E_n - E_n)t/\hbar)$$
$$= a_n^* a_n \psi_n^*(x)\psi_n(x)$$

Es independiente del tiempo

5) Normalizacion

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx = 1$$

6) Si se trata de una autofuncion, la normalizacion

(poniendo $a_n = 1$)

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x,t)\psi_n(x,t)dx = 1}$$

Luego las ψ_n tambien deben estar normalizadas

7) **ortogonalidad**

Sean dos autofunciones de onda tales que dado un $V(x)$ satisfacen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_n(x)}{\partial x^2}+V(x)\psi_n(x)=E_n\psi_n(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_l^*(x)}{\partial x^2}+V(x)\psi_l^*(x)=E_l\psi_l^*(x)$$

multiplicamos la primera por ψ_l^* y la otra por ψ_n, resultando

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi_l^*\frac{\partial^2\psi_n}{\partial x^2}-\psi_n\frac{\partial^2\psi_l^*}{\partial x^2}\right]+\left[\psi_l^*V\psi_n-\psi_nV\psi_l^*\right]=(E_n-E_l)\psi_l^*\psi_n$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\psi_l^*\frac{\partial^2\psi_n}{\partial x^2}-\psi_n\frac{\partial^2\psi_l^*}{\partial x^2}\right]+\int_{-\infty}^{\infty}\left[\psi_l^*V\psi_n-\psi_nV\psi_l^*\right]=(E_n-E_l)\int_{-\infty}^{\infty}\psi_l^*\psi_n$$

Integramos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}dx\left[\psi_l^*\frac{\partial^2\psi_n}{\partial x^2}-\psi_n\frac{\partial^2\psi_l^*}{\partial x^2}\right]+V\int_{-\infty}^{\infty}dx\left[\psi_l^*\psi_n-\psi_n\psi_l^*\right]=(E_n-E_l)\int_{-\infty}^{\infty}\psi_l^*\psi_n dx$$

V(x)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}dx\left[\psi_l^*\frac{\partial^2\psi_n}{\partial x^2}-\psi_n\frac{\partial^2\psi_l^*}{\partial x^2}\right]=(E_n-E_l)\int_{-\infty}^{\infty}\psi_l^*\psi_n\,dx \quad \#$$

Tomando en cuenta que:

$$\frac{d}{dx}\left[\psi_l^*\frac{\partial\psi_n}{\partial x}-\psi_n\frac{\partial\psi_l^*}{\partial x}\right]=\left[\begin{array}{c}\psi_l^*\frac{\partial^2\psi_n}{\partial x^2}-\psi_n\frac{\partial^2\psi_l^*}{\partial x^2}+\\ \frac{\partial\psi_l^*}{\partial x}\frac{\partial\psi_n}{\partial x}-\frac{\partial\psi_n}{\partial x}\frac{\partial\psi_l^*}{\partial x}\end{array}\right]\Rightarrow \quad \#$$

$$=\psi_l^*\frac{\partial^2\psi_n}{\partial x^2}-\psi_n\frac{\partial^2\psi_l^*}{\partial x^2}\Rightarrow \quad \#$$

Queda entonces:

$$(E_n-E_l)\int_{-\infty}^{\infty}\psi_l^*\psi_n=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d}{dx}\left[\psi_l^*\frac{\partial\psi_n}{\partial x}-\psi_n\frac{\partial\psi_l^*}{\partial x}\right]$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi_l^*\frac{\partial\psi_n}{\partial x}-\psi_n\frac{\partial\psi_l^*}{\partial x}\right]_{-\infty}^{\infty}$$

Con E_n y E_l discretos estamos con estados ligados y luego las ψ se van a 0 en ∞

El termino de la derecha es 0

$$(E_n-E_l)\int_{-\infty}^{\infty}\psi_l^*\psi_n=0\Rightarrow$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_l^*\psi_n=0$$

8) **Normalizacion en general**

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_l^*\psi_n=0 \text{ si } l\neq n$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_l^*\psi_n=1 \text{ si } l=n$$

9) **Acerca de los coeficientes**

$$\boxed{\Psi(x,t) = \sum a_j \psi_j(x,t)}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx = \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} a_j^* a_j \psi_j^*(x)\psi_j(x)dx + \sum_k \sum_{\substack{l \\ k\neq l}} \int_{-\infty}^{\infty} a_k^* a_l \psi_k^*(x)\psi_l(x) \bullet \exp(-i(E_l - E_k)t/\hbar)dx = 1$$

Como esta normalizada

Reordenamos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx = \sum_j a_j^* a_j \overbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_j^*(x)\psi_j(x)dx}^{\text{norma}} + \sum_k \sum_{\substack{l \\ k\neq l}} a_k^* a_l \bullet \exp(-i(E_l - E_k)t/\hbar) \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^*(x)\psi_l(x)dx$$

PEro sabemos lo que dan las integrales

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx = \sum_j a_j^* a_j + \sum_k \sum_{\substack{l \\ k\neq l}} a_k^* a_l \bullet \exp(-i(E_l - E_k)t/\hbar)\delta_{kl}$$

0

Entonces

$$\boxed{\sum_j a_j^* a_j = 1}$$

10) **Mas coeficinetes**

$$\Psi(x,0) = \sum_j a_j \psi_j(x,0)$$

Multiplicamos por $\psi_l^*(x)$ e integramos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_l^*(x)\Psi(x,0)dx = \sum_j a_j \int_{-\infty}^{\infty} \psi_l^*(x)\psi_j(x,\,)\ dx = \sum_j a_j \delta_{lj} = a_l$$

Luego es posible escribir

$$\boxed{\begin{aligned}\Psi(x,0) &= \sum_j a_j \psi_j(x)\exp(-iE_j t/\hbar)\\ &= \sum_j \left[\int_{-\infty}^{\infty} \psi_j^*(x')\Psi(x',0)dx'\right]\psi_j(x)\exp(-iE_j t/\hbar)\end{aligned}}$$

Valores de espectacion y operadores

Dado que el observable es la probabilidad lo que podemos calcular son los valores medios de las variables dinamicas del sistema

Vimos que la proba es

$$\boxed{P(x,t) = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)}$$

Definimos

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\ x\ \Psi(x,t)\ dx$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\ x^2\ \Psi(x,t)\ dx$$

En general

$$\boxed{\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\ f(x)\ \Psi(x,t)\ dx}$$

por ejemplo

$$\langle V(x,t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\ V(x,t)\ \Psi(x,t)\ dx$$

En particular

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\ p\ \Psi(x,t)\ dx$$

Sabemos que no se pueden determinar simultanemanetr x y p

Pero sabemos que

$$\Psi(x,t) = e^{i(Kx-\omega t)}$$

Entonces

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t) = iKe^{i(Kx-\omega t)} = iK\Psi(x,t)}$$

Como $K = p/\hbar$

Entonces

$$\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t) = i\frac{p}{\hbar}\Psi(x,t) \Rightarrow$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t) = p\Psi(x,t)$$

Del mismo modo

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \frac{\partial}{\partial t}e^{i(Kx-\omega t)} = -i\omega\Psi(x,t)$$

Pero sabemos que $\omega = E/\hbar$, de donde

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \hbar\omega\Psi(x,t) = E\Psi(x,t)$$

Entonces los valores medio asociados son

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x,t)\,dx$$

$$= -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,t)\,\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)\,dx$$

y consecuentemente

$$\langle E\rangle = i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,t)\,\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)\,dx$$

o tambien

$$\langle E\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,t)\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)\right]\Psi(x,t)\,dx$$

En general entonces

$$\langle f(x,p,t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,t)f_{op}\left(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x},t\right)\Psi(x,t)\,dx$$

Esto pone de manifiesto toda la informacion que contiene la Funcion de onda

Sea ahora un funcion de onda general

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty}a_n\Psi_n(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty}a_n e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(x)$$

Resulta entonces , con

$$\langle E\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,t)\,i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)\,dx$$

$$\langle E\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\left[\sum_{l=1}^{\infty}a_l^* e^{iE_lt/\hbar}\psi_l^*(x)\right]i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[\sum_{n=1}^{\infty}a_n e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(x)\right]dx$$

operando

$$\langle E\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\left[\sum_{l=1}^{\infty} a_l^* e^{iE_l t/\hbar}\psi_l^*(x)\right] i\hbar\left[\sum_{n=1}^{\infty} a_n[-iE_n/\hbar]e^{-iE_n t/\hbar}\psi_n(x)\right]dx$$

$$\boxed{\langle E\rangle = \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} E_n\, a_l^* a_n e^{i(E_l-E_n)t/\hbar}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\psi_l^*(x)\psi_n(x)\,dx\right]}$$

Usando la condicion de ortogonalidad de las $\psi_n \Rightarrow \int \psi_n^*\psi_l = \delta_{nl}$

$$\langle E\rangle = \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} E_n\, a_l^* a_n e^{i(E_l-E_n)t/\hbar}\delta_{nl}$$

$$\boxed{= \sum_{n=1}^{\infty} E_n\, a_n^* a_n}$$

Conmutadores

Bajo que condiciones pueden dos operadores medirse simultaneamente

Sean α y β operadores

Sea el $(\alpha)_{op}$ (completamente arbitrario)

$$(\alpha)_{op}\Psi = \alpha\Psi$$

Donde α es un numero (respecto de β)

Sea $(\beta)_{op}$

$$(\beta)_{op}\Psi = \beta\Psi$$

Donde β es otro numero

entonces

$$\boxed{(\alpha)_{op}(\beta)_{op}\Psi = (\alpha)_{op}(\beta\Psi) = \beta(\alpha)_{op}\Psi = \beta\alpha\Psi}$$

y

$$(\beta)_{op}(\alpha)_{op}\Psi = (\beta)_{op}(\alpha\Psi) = \alpha(\beta)_{op}\Psi = \alpha\beta\Psi$$

$$\Rightarrow$$

$$\boxed{(\alpha)_{op}(\beta)_{op}\Psi - (\beta)_{op}(\alpha)_{op}\Psi = \left[(\alpha)_{op}(\beta)_{op} - (\beta)_{op}(\alpha)_{op}\right]\Psi = [\alpha\beta - \beta\alpha]\Psi = 0}$$

Se dice que conmutan

Luego si conmutan los operadores pueden actuar sobre la misma funcion de onda y tenemos valores para los dos

Pero veamos ahora que ocurre si calculamos

$$\boxed{(x)_{op}(p_x)_{op}\Psi = (x)_{op}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi\right) = \frac{\hbar}{i}x\frac{\partial}{\partial x}\Psi}$$

y

$$\boxed{(p_x)_{op}(x)_{op}\Psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(x\Psi) = \frac{\hbar}{i}\Psi + \frac{\hbar}{i}x\frac{\partial}{\partial x}\Psi}$$

entonces

$$\left[(x)_{op}(p_x)_{op} - (p_x)_{op}(x)_{op}\right]\Psi = -\frac{\hbar}{i}\Psi \Rightarrow$$

$$\boxed{\left[(x)_{op}(p_x)_{op} - (p_x)_{op}(x)_{op}\right] = -\frac{\hbar}{i} \neq 0}$$

O sea que no hay un estado para el cual los dos operadores esten definidos simultaneamente!

Limite Clásico

Sea una particula en un potencial bajo condiciones que la distancia media y los momentos caracteristicos son tan grandes que el ppo de incerteza puede ser dejado de lado, entonces se cumple Ehrenfest 1927.

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial V(x,t)}{\partial x}$$

$$p = m\frac{dx}{dt}$$

Para estas condiciones de distancia y momento es posible asignar a la particula un *paquete mas o menos determinado en espacio y momento* (**el error relativo sera pequeño**)

Podemos calcular

$$\boxed{\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi \, dx}$$

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle x\rangle &= \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x\Psi \, dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\partial}{\partial t}\Psi^* x\Psi + \Psi^* x\frac{\partial}{\partial t}\Psi\right)dx\end{aligned}}$$

reemplazando las derivadas temporales por la ecuacion de Schroedinger

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\Psi^* x\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi\right) - \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2} + V\Psi^*\right)x\Psi\right]dx$$

La parte en $V(x,\ )$ se anula

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle x\rangle = i\frac{\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\Psi^* x\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}x\Psi\right]dx}$$ #

Integrando por partes se obtiene , con

Sea un paquete de ondas con extension finita en x la Ψ se va a 0 en ∞

Sea

Es una buena ψ

Se anula este termino

$$x\Psi = u$$

$$\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}dx = dv \Rightarrow v = \frac{\partial\Psi^*}{\partial x} \Rightarrow$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x\Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}dx = \left[\underbrace{x\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}}_{uv}\right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\frac{\partial(x\Psi)}{\partial x}dx \Rightarrow$$

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} x\Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}dx = -\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\frac{\partial(x\Psi)}{\partial x}dx}$$

Sea ahora

$$\frac{\partial\Psi^*}{\partial x} = v$$

$$x\Psi = u \Rightarrow \frac{\partial(x\Psi)}{\partial x}dx = du \Rightarrow$$

Sea $f = \Psi^*$

$$g = \frac{\partial(x\Psi)}{\partial x}$$

Con $(fg)' = f'g + fg'$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x\Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}dx = -\left[\Psi^*\frac{\partial(x\Psi)}{\partial x}\right]_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\frac{\partial^2(x\Psi)}{\partial x^2}dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\frac{\partial^2(x\Psi)}{\partial x^2}dx$$

Con esto la ecuacion para $\overline{x}$ queda

Entonces usando el resultado anterior

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = i\frac{\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\Psi^* x\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}x\Psi\right]dx \Rightarrow$$

obtenemos

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

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

El termino entre corchetes se trata de la siguiente forma

$$\frac{1}{i\hbar}\left(x\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}x\right) = \frac{1}{i\hbar}\left(xH - Hx\right)$$

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = i\frac{\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\left[x\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}-\frac{\partial}{\partial x}\underbrace{\left(x\frac{\partial\Psi}{\partial x}+\Psi\right)}_{\text{Primer derivada}}\right]dx$$

derivando $\frac{d}{dt}\langle x\rangle = i\frac{\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\left[-2\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right]dx$

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = -\frac{i\hbar}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}dx = \frac{1}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi dx$$

Aqui entonces encontramos que

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi dx$$

Por lo que

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{\langle p\rangle}{m}$$

O sea que recuperamos lo clasico!!!!

$$m\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \langle p\rangle$$

ENtonces hacemos

conmutan

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial t}\left[\Psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi\right]dx = \qquad \#$$

$$= -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*\frac{\partial}{\partial x}\Psi+\Psi^*\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial t}\Psi\right]dx \qquad \#$$

Procediendo usualmente, es decir reeplazamos las derivadas

temporales mediante la ecuacion de schroedinger queda

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\left[-\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}+V\Psi^*\right)\frac{\partial}{\partial x}\Psi+\Psi^*\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+V\Psi\right)\right]dx$$

Integrando obtenemos

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*\frac{\partial}{\partial x}\Psi+\Psi^*\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial t}\Psi\right]}$$

Pero aparece una $\frac{\partial}{\partial t}$ que tambien aparece en la ecuacion de Schroedinger

$$\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)+V\Psi(x,t) = \frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)$$

Reemplazando la ec. en la anterior

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*\frac{\partial}{\partial x}\Psi + \Psi^*\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + V\Psi(x,t)\right)\right] \qquad \#$$

ademas

$$\Psi^*\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + V\Psi(x,t)\right) = \frac{\hbar}{2m}\Psi^*\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + \Psi^*\frac{\partial}{\partial x}(V\Psi(x,t)$$

y lo mismo para el termino $\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*$

aparece

$$\left(-\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi^*(x,t) - V\Psi^*(x,t)\right)\frac{\partial}{\partial x}\Psi \qquad \#$$

Reuniendo todo queda (solo aparecen $\frac{\partial^n}{\partial x^n}$)

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

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

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

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle = -\frac{\hbar}{2m}\left[\frac{\partial}{\partial x}\Psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\Psi - \Psi^*\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)\right]_{-\infty}^{\infty}$$
$$-\int_{-\infty}^{\infty}\left(\Psi^*\frac{\partial V}{\partial x}\Psi(x,t)\right)dx$$

Pero usando las propiedades de la funcion de onda en ∞

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle p\rangle &= -\int_{-\infty}^{\infty}\left(\Psi^*\frac{\partial V}{\partial x}\Psi(x,t)\right)dx\\ &= -\left\langle\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle\end{aligned}}$$

Que se promedia?

Luego las ecuaciones son similares a las clasicas.

Son las ecuaciones clásicas pero con valores medios

En el limite clásico (dimensiones y momentos altos) la incerteza relativa

$$\frac{\Delta x}{x} \text{ y } \frac{\Delta p}{p}$$

Son muy pequeñas y x □ □x □

El teorema de Ehrenfest dice que:

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [A,H]\rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle}$$

Con

$$H(p,x,t) = \frac{p^2}{2m} + V(x,t)$$

o

$$H(p,x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)$$

Propiedades de los operadores

Los operadores de interes se tienen que corresponder con observables fisicos

Sea entonces un operador O y una funcion de onda $\psi \Rightarrow$

$$O\psi = o\psi \qquad \#$$

Una autofuncion de O es una funcion tal que ante la aplicacion de O me da una dada cte o

El valor medio sera entonces

$$\langle O\rangle = \int \psi^* O\psi \, d\tau$$
$$= \int \psi^* (O\psi)\, d\tau$$

Como el $\langle O\rangle$ debe ser real $\Rightarrow \langle O\rangle = \langle O\rangle^* \Rightarrow$

$$\langle O\rangle = \int \psi^* O\psi \, d\tau = \langle O\rangle^* = \left(\int \psi^* O\psi \, d\tau\right)^*$$
$$= \int \psi (O\psi)^* \, d\tau = \int (O\psi)^* \psi \, d\tau = \int (o\psi)^* \psi \, d\tau$$

Un operador que satisface esto se llama Hermitiano

En general satisfacen

$$\int \psi_1^* O\psi_2 \, d\tau = \int (O\psi_1)^* \psi_2 \, d\tau$$

Entonces podemos ver algunas propiedades interesantes de estos operadores

1)

$$\int \psi^* O\psi \, d\tau = \int \psi (O\psi)^* \, d\tau \Rightarrow$$

$$\int \psi^* O\psi \, d\tau = \int \psi (O\psi)^* \, d\tau \Rightarrow$$

con

$$O\psi = o\psi$$

entonces

$$o \int \psi^* \psi \, d\tau = o^* \int \psi \psi^* \, d\tau \Rightarrow$$

$$(o - o^*) \int |\psi|^2 \, d\tau = 0 \Rightarrow$$

$$o = o^*$$

Luego para operadores hermitianos los autovalores son reales

2

$$O\psi_2 = o_2\psi_2$$

$$O\psi_1 = o_1\psi_1$$

Entonces

$$\int \psi_2^* O\psi_1 d\tau = o_1 \int \psi_2^* \psi_1 d\tau \qquad \int \psi_1^* O\psi_2 d\tau = o_2 \int \psi_1^* \psi_2 d\tau$$

$$\left(\int \psi_1^* O\psi_2 d\tau\right)^* = (o_2)^* \left(\int \psi_1^* \psi_2 d\tau\right)^*$$

$$= o_2 \int \psi_1 \psi_2^* d\tau$$

restando los terminos

$$(o_1 - o_2) \int \psi_1 \psi_2^* d\tau = 0 \Rightarrow$$

$$\int \psi_1 \psi_2^* d\tau = 0$$

o tambien

$$\int \psi_1^* O\psi_2 \, d\tau = \int (O\psi_1)^* \psi_2 \, d\tau$$

$$\int \psi_1^* o_2 \psi_2 \, d\tau = \int o_1^* \psi_1{}^* \psi_2 \, d\tau$$

$$\int \psi_1^* o_2 \psi_2 \, d\tau = \int o_1 \psi_1{}^* \psi_2 \, d\tau \Rightarrow$$

$$[o_2 - o_1] \int \psi_1{}^* \psi_2 \, d\tau = 0 \Rightarrow$$