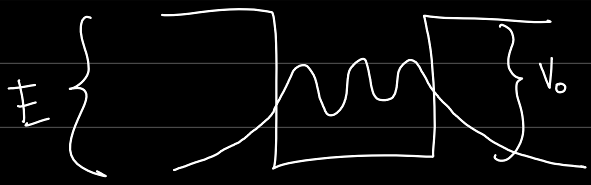
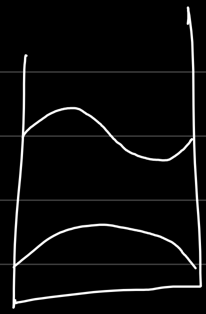
Pozo cuadrado finito



finito

$$\rho = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}$$

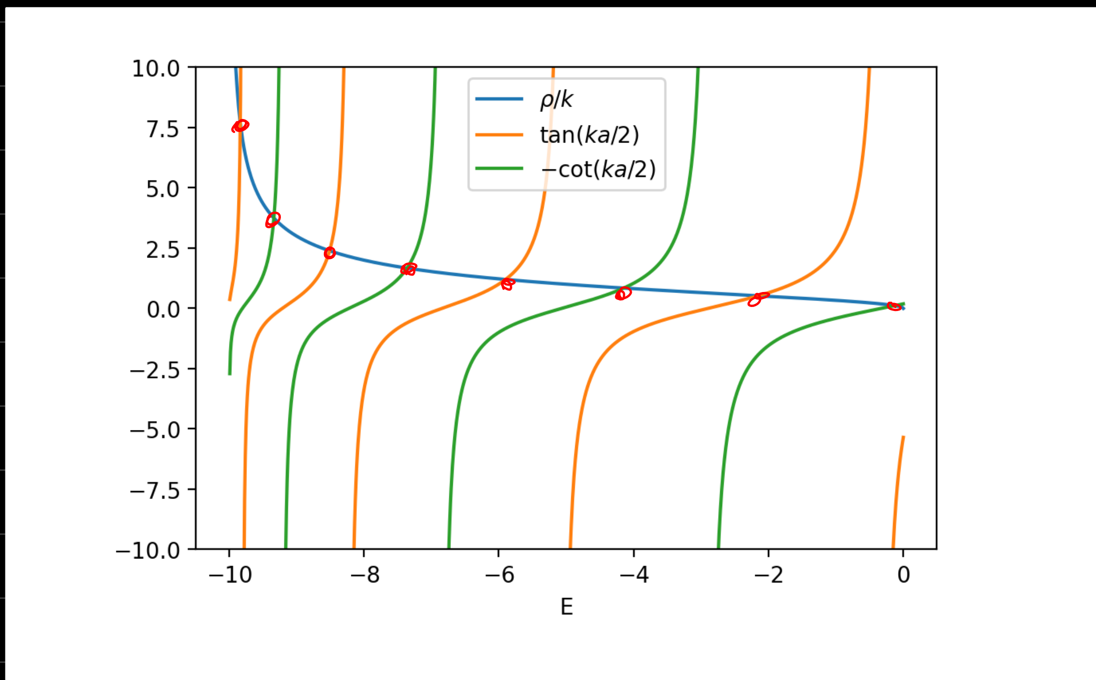
$$k = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$$



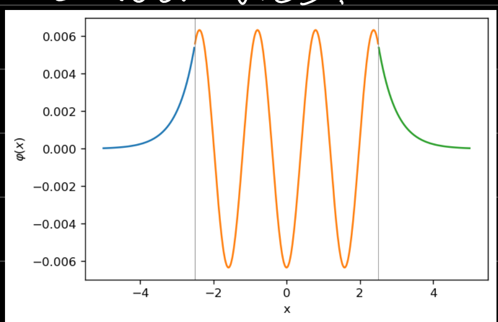
infinito

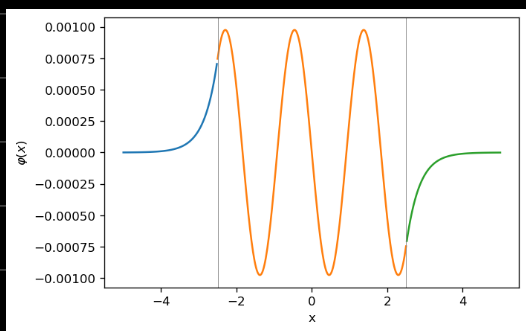
Condiciones de cuantización

i) $\rho/k = \tan\left(\frac{ka}{2}\right)$ ii) $\rho/k = -\cot\left(\frac{ka}{2}\right)$



Soluciones:





1) La frecuencia de oscilación tiene que ver con E cinética
2) $|\varphi(x)|^2 \neq 0$ afuera del pozo (en contraste con el caso clásico)
túnelaje cuántico.
3) Hay nodos y antinodos de probabilidad.

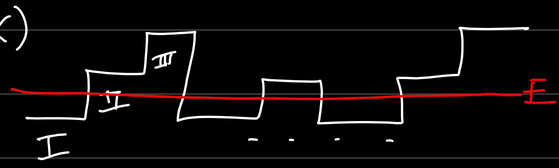
función de onda

$$\varphi_{I}(x) = B_1 e^{\rho x}$$
$$\varphi_{II}(x) = A_2 e^{ikx} + A_2' e^{-ikx}$$
$$\varphi_{III}(x) = B_3' e^{-\rho x}$$

Nos falta ver que $\langle \varphi | \varphi \rangle = 1$

$$1 = \int_{\mathbb{R}} \varphi^*(x)\varphi(x)\,dx = \int_{\mathbb{R}} |\varphi(x)|^2 dx = \int_{I} |\varphi(x)|^2 dx + \int_{II} |\varphi(x)|^2 dx + \int_{III} |\varphi(x)|^2 dx$$

Para problemas con potencial constante por pedazos:



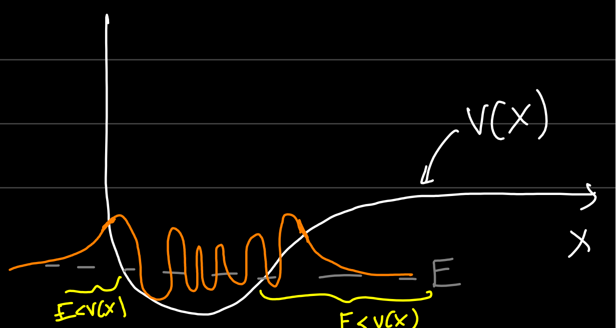
1. Dividir x en regiones
2. En cada región:
   - i) Si $V(x) > E$ $\quad \varphi_i(x) = B_i e^{\rho_i x} + B_i' e^{-\rho_i x}$
   - ii) Si $V(x) < E$ $\quad \varphi_i(x) = A_i e^{ik_i x} + A_i' e^{-ik_i x}$
   - iii) Si $V(x) = E$ $\quad \varphi_i(x) = Ax + B$

$$k_i = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_i)} \qquad \rho_i = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_i - E)}$$

3. Aplicar condiciones de frontera para determinar A_i, A_i', B_i, B_i', E $\quad \varphi_i(x) = \varphi_{i+1}(x) \quad \varphi_i'(x) = \varphi_{i+1}'(x)$
4. Normalizar.

Paréntesis de potenciales no constantes

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + \underbrace{\frac{2m}{\hbar}(V(x) - E)}_{\text{frecuencia de oscilación}}\varphi(x) = 0$$



Operadores unitarios

Def: operadores que su adjunto es su inverso:

$$U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbb{1} \qquad U^\dagger = U^{-1}$$

Nos permiten cambiar de marco de referencia

Ejemplos en 3D: rotaciones, reflexiones

- Considerando dos kets arbitrarios $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ y un operador unitario U

$$|\tilde{\psi}_1\rangle = U|\psi_1\rangle \quad ; \quad |\tilde{\psi}_2\rangle = U|\psi_2\rangle$$

$$\langle \tilde{\psi}_1 | \tilde{\psi}_2 \rangle = \langle \psi_1 | U^\dagger \cdot U | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$$

U conserva el producto escalar.

- Si A es hermitiano, $T = e^{iA}$ es unitario.

$$e^A = \sum_n \frac{A^n}{n!} \quad ; \quad T^\dagger = e^{-iA^\dagger} \overset{\text{A hermitiano}}{=} e^{-iA}$$

$$T T^\dagger = e^{iA} e^{-iA} = \mathbb{1}$$

- Hay que tener cuidado con $e^A e^B$, $e^B e^A$, e^{A+B}.
Sólo si $[A,B]=0$ pasa $e^A e^B = e^B e^A = e^{A+B}$.

Fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff

Teorema relacionado con el álgebra de Lie

Idioma — Vigilar — Editar

En matemáticas, la **fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff** permite hallar la solución de Z para la ecuación

$$e^X e^Y = e^Z$$

con X e Y que pueden ser no conmutativos en el álgebra de Lie de un grupo de Lie. Hay varias formas de escribir la fórmula, pero todas finalmente producen una expresión para Z en términos algebraicos de Lie, es decir, como una serie formal (no necesariamente convergente) en X e Y y conmutadores iterados de los mismos. Los primeros términos de esta serie son:

$$Z = X + Y + \frac{1}{2}[X,Y] + \frac{1}{12}[X,[X,Y]] - \frac{1}{12}[Y,[X,Y]] + \cdots,$$

- Con un operador unitario podemos transformar una base ortonormal a otra base ortonormal

Base ortonormal $|v_i\rangle \rightarrow |\tilde{v}_i\rangle = U|v_i\rangle$

Los $|\tilde{v}_i\rangle$ son ortonormales pues U preserva $\langle | \rangle$.

Escribir vectores en la base $\{|\tilde{v}_i\rangle\}$ $|\psi\rangle$ arbitrario

$U^\dagger|\psi\rangle$ es vector.

$$U^\dagger|\psi\rangle = \sum_i c_n |v_i\rangle \xRightarrow{U\rightarrow} UU^\dagger|\psi\rangle = |\psi\rangle = \sum_i c_n U|v_i\rangle$$
$$= \sum_i c_n |\tilde{v}_i\rangle$$

- Transformar operadores:

Definimos $\tilde{A}$ al operador que en la base $\{|\tilde{v}_i\rangle\} = \{U|v_i\rangle\}$ tiene los mismos elementos de matriz que el operador A en la base $\{|v_i\rangle\}$

$$\underbrace{\langle \tilde{v}_i|\tilde{A}|\tilde{v}_j\rangle}_{\langle v_i|U^\dagger \tilde{A} U|v_j\rangle} = \langle v_i|A|v_j\rangle$$

$$\Rightarrow U^\dagger \tilde{A} U = A \Rightarrow \tilde{A} = UAU^\dagger$$

- Si los e-vectores de A son $|\phi_n\rangle$ los de $\tilde{A}$ son $|\tilde{\phi}_n\rangle$:

$$A|\phi_n\rangle = a|\phi_n\rangle$$

$$\tilde{A}|\tilde{\phi}_n\rangle = UA\cancelto{\mathbb{1}}{U^\dagger U}|\phi_n\rangle = UA|\phi_n\rangle$$
$$= aU|\phi_n\rangle = a|\tilde{\phi}_n\rangle$$

Los e-valores de A y $\tilde{A}$ son los mismos.

El operador de evolución temporal

$$|\psi(t)\rangle = \underbrace{U(t,t_0)}_{\text{operador de evolución temporal}} |\psi(t_0)\rangle \quad ; \quad U(t,t) = \mathbb{1}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} U|\psi(t_0)\rangle = HU|\psi(t_0)\rangle$$

Como se vale para cualquier $|\psi(t_0)\rangle$

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t,t_0) = H\, U(t,t_0)$$

Para un sistema conservativo (H no depende de t)

$$U(t,t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}$$

U es unitario pues H es hermitiano.

Los esquemas de Schrödinger y Heisenberg

Esquema de Schrödinger:

$X, \vec{R}, \vec{P}, \vec{L}, H$ independientes del tiempo

$|\psi_s(t)\rangle$ vector de estado contiene la dinámica

Esquema de Heisenberg

$|\psi_H\rangle$ el vector de estado no depende de t

$X(t), \vec{R}(t), \vec{P}(t), \vec{L}(t), H(t)$ observables contienen la dinámica.

Usando el operador de evolución

$$|\psi_S(t)\rangle = U(t,t_0)\,|\psi_S(t_0)\rangle$$

Como U es unitario

$$|\psi_H\rangle = U^{\dagger}(t,t_0)\,|\psi_S(t)\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle$$

Los operadores

$$A_H(t) = U^{\dagger}(t,t_0)\,A_S\,U(t,t_0)$$

Aunque A_S no dependa de t, A_H si depende de t.

Si A_S es una constante de mov. $[A_S, H]=0$
$\Rightarrow [A_S, U]=0 \Rightarrow A_H(t)=A_S$ (A_H no depende de t)

$$\langle A(t)\rangle = \langle \psi_H|\,A_H(t)\,|\psi_H\rangle = \langle\psi_S(t)|\,\underbrace{U\cdot U^{\dagger}}_{\mathbb{1}} A_S \underbrace{U\cdot U^{\dagger}}_{\mathbb{1}}\,|\psi_S(t)\rangle$$

$$= \langle\psi_S(t)|\,A_S\,|\psi_S(t)\rangle$$

Ecuación de evolución de operadores

$$\frac{d}{dt}A_H(t) = \frac{iH_S}{\hbar}\underbrace{U^{\dagger}A_S U}_{A_H} + U^{\dagger}\frac{d}{dt}A_S U - \frac{i}{\hbar}\,\underbrace{U^{\dagger}A_S}_{A_H}\overset{UU^{\dagger}}{}\underbrace{H_S U}_{H_H}$$

$$A_H(t) = U^{\dagger}(t,t_0)\,A_S\,U(t,t_0)$$

$$U(t,t_0) = e^{-iH_S(t-t_0)/\hbar}\ ;\ U^{\dagger}(t,t_0) = e^{iH_S(t-t_0)/\hbar}$$

$$\frac{d}{dt}A_H(t) = \frac{1}{i\hbar}\left[A_H(t), H_H(t)\right] + \left(\frac{d}{dt}A_S(t)\right)_H$$

Ecuación de evolución de operadores en el esquema de Heisenberg.