

Dos teoremas para problemas de 1D.

Teorema: en 1D no hay degeneración en los ligados:

$$\textcircled{1} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V \right) \psi_1 = E \psi_1 \quad \textcircled{2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V \right) \psi_2 = E \psi_2$$

$$\psi_2 \textcircled{1} - \psi_1 \textcircled{2} \Rightarrow \psi_1 \frac{d^2}{dx^2} \psi_2 - \psi_2 \frac{d^2}{dx^2} \psi_1 = 0$$

$$\frac{d}{dx} \left(\psi_1 \frac{d}{dx} \psi_2 - \psi_2 \frac{d}{dx} \psi_1 \right) = 0 \Rightarrow \psi_1 \frac{d}{dx} \psi_2 - \psi_2 \frac{d}{dx} \psi_1 = C$$

Para los ligados $\psi_1, \psi_2 \rightarrow 0$ con $x \rightarrow \infty \Rightarrow C=0$

$$\frac{1}{\psi_1} \frac{d}{dx} \psi_1 = \frac{1}{\psi_2} \frac{d}{dx} \psi_2 \Rightarrow \frac{1}{\psi_1} \ln \psi_1 = \frac{1}{\psi_2} \ln \psi_2 + C \Rightarrow \boxed{\psi_1 = e^C \psi_2}$$

Teorema: Las e-funciones de H siempre pueden ser elegidas para ser reales en la base $\{|x\rangle\}$.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi_n(x) = E_n \psi_n(x)$$

(conjugando)

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

$\therefore \psi$ y ψ^* son e-funciones con e-valor E_n

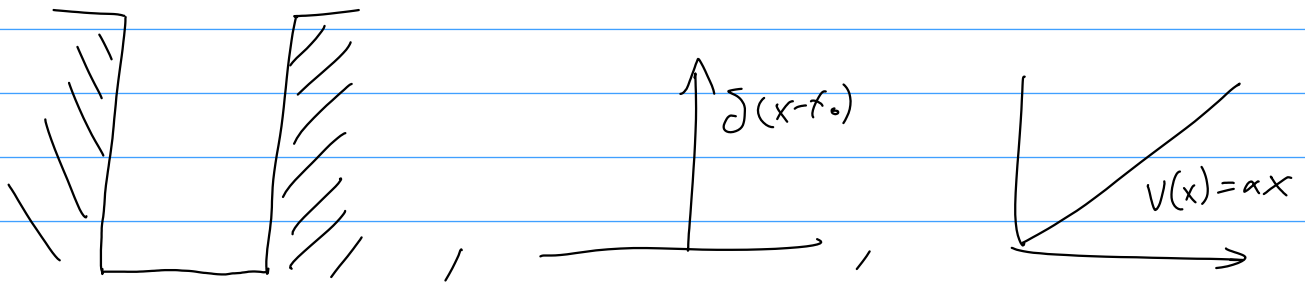
$\Rightarrow \psi_r = \frac{\psi + \psi^*}{2}$ es e-función con e-valor E_n .

ψ y ψ^* representan al mismo e-valor?
 $\psi^* = \psi e^{-2i\alpha}$ $\alpha = \arg(\psi)$

Sabemos que $\arg(\psi)$ no debe depender de x pues en 1D no hay degeneración.

Es decir, cualesquiera dos funciones con el mismo e-valor difieren por un escalar.

Para finalizar tema de funciones de onda en pozos, dar un resumen:



Equivalencia entre esquemas de Heisenberg y Schrödinger.

1925
inicia la
cuántica

Heisenberg hablaba de matrices que representan observables y que no conmutan.

$$\hat{X}(t) \quad \hat{P}(t) \quad \hat{P}(t)\hat{X}(t) - \hat{X}(t)\hat{P}(t) = \frac{h}{2\pi i}$$

Schrödinger de ecuaciones diferenciales parciales

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}, t)$$

¿Cómo se conectan estas representaciones?

8. ~~Esquemas de la mecánica cuántica y primeros ejemplos~~
(espín)

8.1. Operadores Unitarios

- Se define como operador unitario aquel que su adjunto es igual a su inverso. Es decir

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \mathbb{1}$$

- En ocasiones, cuando una presentación de la Ec. de Schrödinger sea difícil de resolver, podemos usar transformaciones unitarias para obtener formas más sencillas de la Ec. de Schrödinger sin afectar el comportamiento físico.
- Si consideramos dos vectores arbitrarios $|\psi_1\rangle$ y $|\psi_2\rangle$ y el resultado de transformarlos

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}_1\rangle &= \hat{U} |\psi_1\rangle \\ |\tilde{\psi}_2\rangle &= \hat{U} |\psi_2\rangle \end{aligned}$$

en 3D
rotaciones,
reflexiones respecto
a punto, plano

vemos que al calcular el producto escalar

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

- i.e. las transformaciones unitarias conservan el producto escalar (y la norma).
- En dimensión finita es una doble implicación.
- Si A es Hermitiano $\hat{T} = e^{iA}$ es unitario pues $\hat{T}^\dagger = e^{-iA^\dagger} = e^{-iA}$ y

$$\hat{T} \hat{T}^\dagger = \hat{T}^\dagger \hat{T} = \mathbb{1}$$

Ojo, aquí es importante que $-iA$ commute con iA pues en otro caso no se pueden combinar las exponenciales.

$$e^A e^B, e^B e^A, e^{A+B}$$

- Sólo cuando A y B conmutan podemos asegurar

$$e^A e^B = e^B e^A = e^{A+B}$$

- El producto de operadores unitarios es unitario. $(\hat{U}\hat{V})(\hat{U}\hat{V})^\dagger = \hat{U}\hat{V}\hat{V}^\dagger\hat{U}^\dagger = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \mathbb{1}$
- Dada una base ortonormal, podemos usar una U para encontrar otra.
- Los eigenvalores de un operador unitario son números complejos con módulo 1.

$$\hat{U}|e\rangle = u|e\rangle \Rightarrow \hat{U}^\dagger \hat{U}|e\rangle = u u^* |e\rangle = |e\rangle$$

$$u = e^{i\varphi} \quad |u|^2 = 1$$

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:

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

1-b. Unitary operators and change of bases

α . Let $\{|v_i\rangle\}$ be an orthonormal basis of the state space \mathcal{E} , assumed to be discrete. Call $|\tilde{v}_i\rangle$ the transform of the vector $|v_i\rangle$ under the action of a unitary operator U :

$$|\tilde{v}_i\rangle = U|v_i\rangle \quad (8)$$

Since the operator U is unitary, we have:

$$\langle \tilde{v}_i | \tilde{v}_j \rangle = \langle v_i | v_j \rangle = \delta_{ij} \quad (9)$$

The $|\tilde{v}_i\rangle$ vectors are therefore orthonormal. Let us show that they constitute a basis of \mathcal{E} . To do so, consider an arbitrary vector $|\psi\rangle$ of \mathcal{E} . Since the set $\{|v_i\rangle\}$ constitutes a basis, the vector $U^\dagger|\psi\rangle$ can be expanded on the $|v_i\rangle$:

$$U^\dagger|\psi\rangle = \sum_i c_i |v_i\rangle \quad (10)$$

Applying the operator U to this equation, we obtain:

$$UU^\dagger|\psi\rangle = \sum_i c_i U|v_i\rangle \quad (11)$$

and, therefore:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\tilde{v}_i\rangle \quad (12)$$

∴ \hat{U} unitario $\Rightarrow U$ transforma base orthonormal a otra base orthonormal

se puede mostrar que es " $\Leftarrow \Rightarrow$ " pero no lo haremos.