

Mecánica Cuántica

- Profesores:
 - José Santiago: Teoría (jsantiago @ugr.es)
 - Tutorías: L (12-13 y 14-16), M (14:00-17:00) despacho A04.
 - Mar Bastero: Problemas (mbg @ugr.es)
 - Tutorías: M (10-12), X y J (15-17) despacho 23
 - Detalles del temario, información, apuntes en:
 - www.ugr.es/~jsantiago/Docencia/MC/
 - PRADO2
 - <http://www.ugr.es/~fteorica/Docencia/grado.php>

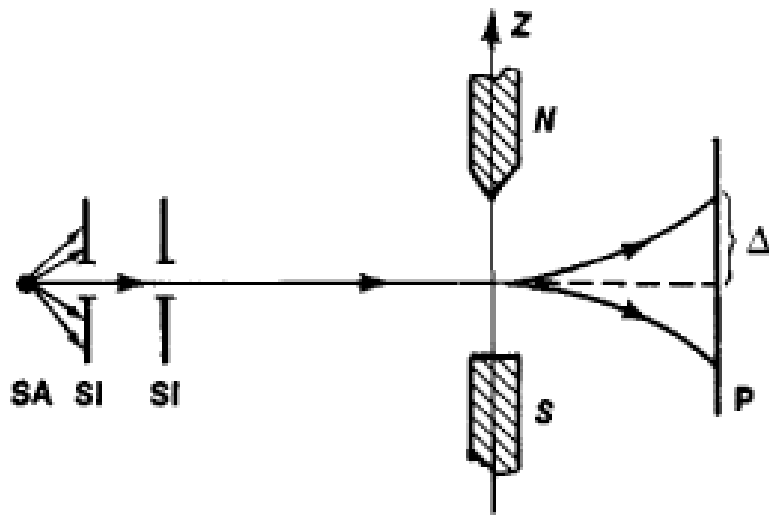
Mecánica Cuántica

- Bibliografía principal:
 - J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*.
 - A. Galindo y P. Pascual, *Mecánica Cuántica*.
 - J.R. Taylor, *Scattering Theory*.
 - P. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*.
- Notas de clase muy esquemáticas: ejemplos, demostraciones y comentarios importantes en pizarra o de viva voz (tomad apuntes)
- Clases de problemas los jueves (generalmente)

• Experimento Stern-Gerlach

Cuantización

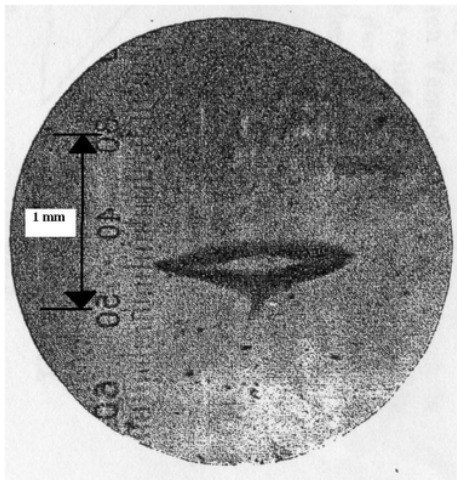
Átomos de plata (46+1 e)



$$\vec{\mu} = -\frac{e}{m_e c} \vec{s}_{e_{47}} \quad \text{Momento magnético del átomo}$$

$$F_z = -\frac{\partial}{\partial z} (-\vec{\mu} \cdot \vec{B}) \approx \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} = -\frac{e}{m_e c} \frac{\partial B_z}{\partial z} s_z$$

$$\Delta \propto s_z$$



Solo se observan dos valores $s_z = \pm \frac{\hbar}{2}$

$$\hbar = 1.05 \times 10^{-27} \text{ erg s} = 6.58 \times 10^{-16} \text{ eV s}$$

- Experimento Stern-Gerlach

Cuantización

Notación:

$$\begin{pmatrix} + \\ - \end{pmatrix}_\alpha \text{ SG}$$

$$\begin{pmatrix} + \\ - | \end{pmatrix}_\alpha \text{ Filtro}$$

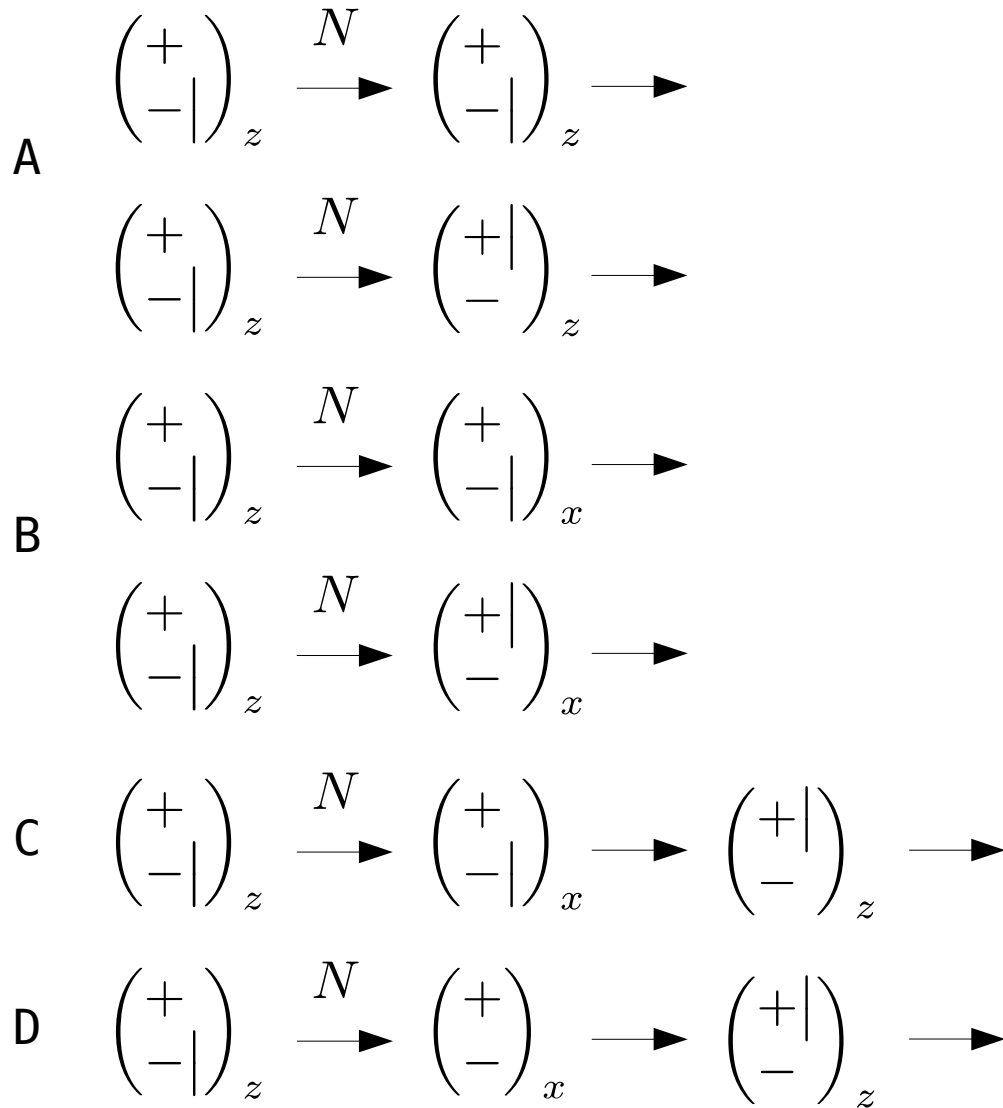
$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$ Amplitud de probabilidad de ir de ψ_2 a ψ_1

$|\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2$ Probabilidad de ir de ψ_2 a ψ_1

$|\pm \alpha\rangle$ Estado con $s_\alpha = \pm \frac{\hbar}{2}$

• Experimento Stern-Gerlach

Cuantización



• Experimento Stern-Gerlach

A	$\begin{pmatrix} + \\ - \end{pmatrix}_z \xrightarrow{N} \begin{pmatrix} + \\ - \end{pmatrix}_z \xrightarrow{N}$	$ \langle +z +z \rangle ^2 = 1$	<p>Cuantización Incompat. Obs.</p>
	$\begin{pmatrix} + \\ - \end{pmatrix}_z \xrightarrow{N} \begin{pmatrix} + \\ - \end{pmatrix}_z \xrightarrow{0}$	$ \langle -z +z \rangle ^2 = 0$	<p>Interferencia</p>
B	$\begin{pmatrix} + \\ - \end{pmatrix}_z \xrightarrow{N} \begin{pmatrix} + \\ - \end{pmatrix}_x \xrightarrow{N/2}$	$ \langle +x +z \rangle ^2 = \left \frac{1}{\sqrt{2}} \langle +z +z \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle -z +z \rangle \right ^2 = \frac{1}{2}$	
	$\begin{pmatrix} + \\ - \end{pmatrix}_z \xrightarrow{N} \begin{pmatrix} + \\ - \end{pmatrix}_x \xrightarrow{N/2}$	$ \langle -x +z \rangle ^2 = \left -\frac{1}{\sqrt{2}} \langle +z +z \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle -z +z \rangle \right ^2 = \frac{1}{2}$	
C	$\begin{pmatrix} + \\ - \end{pmatrix}_z \xrightarrow{N} \begin{pmatrix} + \\ - \end{pmatrix}_x \xrightarrow{N/2} \begin{pmatrix} + \\ - \end{pmatrix}_z \xrightarrow{N/4}$	$ \langle -z +x \rangle \langle +x +z \rangle ^2 = \left \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \right ^2 = \frac{1}{4}$	
D	$\begin{pmatrix} + \\ - \end{pmatrix}_z \xrightarrow{N} \begin{pmatrix} + \\ - \end{pmatrix}_x \xrightarrow{N} \begin{pmatrix} + \\ - \end{pmatrix}_z \xrightarrow{0}$	$ \langle -z +x \rangle \langle +x +z \rangle + \langle -z -x \rangle \langle -x +z \rangle ^2 = \left \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{-1}{\sqrt{2}} \right ^2 = 0$	

- Experimento Stern-Gerlach

$$|\pm x\rangle = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}|+z\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-z\rangle$$

Qué pasa con s_y ?

$$|\pm y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+z\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}}|-z\rangle$$

Cuantización

Incompat. Obs.

Interferencia

Complejos

Postulados de la Mecánica Cuántica

- Postulado I: A cada sistema físico corresponde un espacio de Hilbert complejo separable y cada estado puro está descrito por un rayo unidad $|\psi\rangle$ en dicho espacio
- Postulado II: A cada observable de un sistema corresponde un operador lineal autoadjunto en el espacio de Hilbert
- Postulado III: La probabilidad de que al medir un observable (A) sobre un estado puro ($|\psi\rangle$) se obtenga un valor (a) perteneciente a un Boreliano $\Delta \subset \mathbb{R}$ es $\langle \Psi | P_{A,\Delta} | \Psi \rangle$, con $P_{A,\Delta}$ el proyector al subespacio propio de autovalores generalizados en Δ
- Postulado IV: Si al medir un observable A en un estado puro $|\psi\rangle$ obtenemos valores en el conjunto Δ , el sistema queda tras la medida en el estado $\frac{P_{A,\Delta}|\Psi\rangle}{\|P_{A,\Delta}|\Psi\rangle\|}$
- Postulado V: Entre dos medidas consecutivas los estados puros se mantienen puros y su evolución temporal viene dada por la Ec. de Schrödinger

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

Postulados de la Mecánica Cuántica

Postulado I: A cada sistema físico corresponde un espacio de Hilbert complejo separable y cada estado puro está descrito por un rayo unidad $|\psi\rangle$ en dicho espacio

Recordatorio: Un esp de Hilbert complejo separable es un esp vectorial sobre los complejos con un producto escalar $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ de dim. Hilbertiana a lo sumo infinito numerable y completo con la métrica inducida

$$\begin{aligned}\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2 &\in H & \|\psi\| &= \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} \quad \text{norma inducida} \\ \alpha_{1,2} \in \mathbb{C}, \psi_{1,2} &\in H & d(\psi_1, \psi_2) &= \|\psi_1 - \psi_2\| \quad \text{métrica inducida}\end{aligned}$$

Base ortonormal $\{e_n\}$ b.o.n. $\Leftrightarrow \{e_n\}$ conj. ortonormal maximal $\Leftrightarrow |\psi\rangle = \sum_n \langle e_n|\psi\rangle |e_n\rangle$

Th. isomorfismo: Todo esp. Hilbert $H \neq \{0\}$ es isomorfo a $l^2_{\mathbb{C}}(A)$, con $\text{cardinal}(A) = \dim H$

Espacio dual $H^* = \{F : H \rightarrow \mathbb{C} / F \text{ lineal y cont.}\}$

Th Riesz-Frechet H^* es isomorfo a H $R : H \rightarrow H^*$ $R(|x\rangle) = F_x \equiv \langle x|$

$\{|e_n\rangle\}$ b.o.n. de $H \Leftrightarrow \{\langle e_n|\}$ b.o.n. de H^*

$$\langle\psi|\phi\rangle = \sum_n \langle\psi|e_n\rangle \langle e_n|\phi\rangle = \sum_n \langle e_n|\psi\rangle^* \langle e_n|\phi\rangle = \sum_n \psi_n^* \phi_n$$

$$I = \sum_n |e_n\rangle \langle e_n|$$

Descomposición
espectral de la identidad

Postulados de la Mecánica Cuántica

Postulado II: A cada observable de un sistema corresponde un operador lineal autoadjunto en el espacio de Hilbert

Repaso: Operadores lineales $A : H \rightarrow H$ $A(\alpha_1|\psi_1\rangle + \alpha_2|\psi_2\rangle) = \alpha_1A(|\psi_1\rangle) + \alpha_2A(|\psi_2\rangle)$

$$A = B \Leftrightarrow D(A) = D(B), \quad A(|\psi\rangle) = B(|\psi\rangle) \quad \forall |\psi\rangle \in D(A)$$

Se puede caracterizar a un operador por su acción sobre una b.o.n. $A_{ij} = \langle e_i | A | e_j \rangle$

$$(A + B)|\psi\rangle = A|\psi\rangle + B|\psi\rangle$$

$$(AB)|\psi\rangle = A(B|\psi\rangle) \quad \text{Conmutador de operadores: } [A, B] = AB - BA \neq 0 \text{ en general}$$

Operador adjunto: A op. lineal en $H \Rightarrow \exists! A^\dagger / \langle A^\dagger \psi | \phi \rangle = \langle \psi | A \phi \rangle$

Propiedades

$$(A^\dagger)^\dagger = A$$

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

$$(\alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2)^\dagger = \alpha_1^* A_1^\dagger + \alpha_2^* A_2^\dagger$$

$$\text{En dim. finita } (A^\dagger)_{ij} = A_{ji}^* = (A^{*T})_{ij}$$

Cambio de b.o.n. (operador unitario) $\{e_n\} \rightarrow \{\tilde{e}_n\}$ 2 b.o.n.

$$|\tilde{e}_n\rangle = U|e_n\rangle = \sum_m |\tilde{e}_m\rangle \langle e_m | e_n \rangle, \quad UU^\dagger = U^\dagger U = I$$

$$|\tilde{e}_n\rangle = \sum_m |e_m\rangle U_{mn}, \quad \langle \tilde{e}_n | = \sum_m \langle e_m | U_{nm}^\dagger$$

Cambio de coordenadas?

Postulados de la Mecánica Cuántica

Postulado II: A cada observable de un sistema corresponde un operador lineal autoadjunto en el espacio de Hilbert

Repaso: Operadores autoadjuntos $A = A^\dagger, [D(A) = D(A^\dagger)]$

$$\sigma(A) \subset \mathbb{R}, \quad \sigma(A) = \sigma_p(A) \cup \sigma_c(A) \quad \lambda \in \sigma_p(A) \Leftrightarrow \exists |\lambda\rangle \in D(A) / A|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$
$$\lambda \in \sigma_c(A) \Leftrightarrow \exists (A - \lambda I)^{-1} \text{ con dom. NO denso en } H$$

Subespacio asociado a autovalor $\lambda \in \sigma_p(A)$: $H_\lambda \equiv \{|\lambda\rangle \in H / A|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle\} = [\{|\lambda, \alpha\rangle\}]$

$A = A^\dagger$ compacto

$$\{|\lambda, \alpha\rangle, \lambda \in \sigma_p(A)\} \text{ es b.o.n. de } H \quad |\psi\rangle = \sum_{\lambda, \alpha} |\lambda, \alpha\rangle \langle \lambda, \alpha | \psi\rangle$$

$$\text{Proyector ortogonal sobre } H_\lambda: P_\lambda = \sum_\alpha |\lambda, \alpha\rangle \langle \lambda, \alpha| \quad P_\lambda^2 = P_\lambda, P_\lambda = P_\lambda^\dagger$$

$$\text{Descomposición espectral de operadores: } A = \sum_\lambda \lambda P_\lambda, \quad f(A) = \sum_\lambda f(\lambda) P_\lambda$$

Postulados de la Mecánica Cuántica

Postulado II: A cada observable de un sistema corresponde un operador lineal autoadjunto en el espacio de Hilbert

Repaso: Operadores autoadjuntos $A = A^\dagger, [D(A) = D(A^\dagger)]$

$$\sigma(A) \subset \mathbb{R}, \quad \sigma(A) = \sigma_p(A) \cup \sigma_c(A) \quad \lambda \in \sigma_p(A) \Leftrightarrow \exists |\lambda\rangle \in D(A) / A|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

$$\lambda \in \sigma_c(A) \Leftrightarrow \exists (A - \lambda I)^{-1} \text{ con dom. NO denso en } H$$

Subespacio asociado a autovalor $\lambda \in \sigma_p(A)$: $H_\lambda \equiv \{|\lambda\rangle \in H / A|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle\} = [\{|\lambda, \alpha\rangle\}]$

$A = A^\dagger$ NO compacto: Definimos autovalores y autovectores generalizados -fuera de H -

$$\lambda \in \sigma_c(A), \quad A|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle, \quad |\lambda\rangle \notin H$$

$$\langle \lambda_n, \alpha | \lambda_m, \beta \rangle = \delta_{nm} \delta_{\alpha\beta}$$

$\{|\lambda_n, \alpha\rangle, \lambda_n \in \sigma_p(A)\} \cup \{|\lambda, \alpha\rangle, \lambda \in \sigma_c(A)\}$ es b.o.n. generalizada de H $\langle \lambda, \alpha | \lambda', \beta \rangle = \delta(\lambda - \lambda') \delta_{\alpha\beta}$

$$\langle \lambda, \alpha | \lambda_n, \beta \rangle = 0$$

$$|\psi\rangle = \sum_{\lambda_n \in \sigma_p(A)} \sum_{\alpha} |\lambda_n, \alpha\rangle \langle \lambda_n, \alpha | \psi \rangle + \int_{\sigma_c(A)} d\lambda \sum_{\alpha} |\lambda, \alpha\rangle \langle \lambda, \alpha | \psi \rangle$$

$$P_A(\Delta) = \sum_{\lambda_n \in \sigma_p(A) \cap \Delta} \sum_{\alpha} |\lambda_n, \alpha\rangle \langle \lambda_n, \alpha| + \int_{\sigma_c(A) \cap \Delta} d\lambda \sum_{\alpha} |\lambda, \alpha\rangle \langle \lambda, \alpha|$$

$$F(A) = \sum_{\lambda_n \in \sigma_p(A)} f(\lambda_n) \sum_{\alpha} |\lambda_n, \alpha\rangle \langle \lambda_n, \alpha| + \int_{\sigma_c(A)} d\lambda f(\lambda) \sum_{\alpha} |\lambda, \alpha\rangle \langle \lambda, \alpha|$$

Postulados de la Mecánica Cuántica

Postulado III: La probabilidad de que al medir un observable (A) sobre un estado puro ($|\psi\rangle$) se obtenga un valor (a) perteneciente a un Boreliano $\Delta \subset \mathbb{R}$ es $\langle \Psi | P_{A,\Delta} | \Psi \rangle$, con $P_{A,\Delta}$ el proyector al subespacio propio de autovalores generalizados en Δ

$$P_{A,\psi}(\Delta) = \sum_{\lambda_n \in \sigma_p(A) \cap \Delta} \sum_{\alpha} |\langle \lambda_n, \alpha | \psi \rangle|^2 + \int_{\sigma_c(A) \cap \Delta} d\lambda \sum_{\alpha} |\langle \lambda, \alpha | \psi \rangle|^2$$

Postulado VI: Si al medir un observable A en un estado puro $|\psi\rangle$ obtenemos valores en el conjunto Δ , el sistema queda tras la medida en el estado $\frac{P_{A,\Delta}|\Psi\rangle}{\|P_{A,\Delta}|\Psi\rangle\|}$

Valor medio (o esperado):

$$\langle A \rangle_{\psi} = \sum_{\lambda_n \in \sigma_p(A)} \sum_{\alpha} \lambda_n |\langle \lambda_n, \alpha | \psi \rangle|^2 + \int_{\sigma_c(A)} d\lambda \lambda \sum_{\alpha} |\langle \lambda, \alpha | \psi \rangle|^2 = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

Indeterminación

$$\Delta_{\psi} A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle_{\psi})^2 \rangle_{\psi}} = \sqrt{\langle A^2 \rangle_{\psi} - \langle A \rangle_{\psi}^2}$$

Relación de indeterminación

$$\Delta_{\psi} A \Delta_{\psi} B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle_{\psi}|$$

CCOC: conjunto de observables cuyos operadores

- Son compatibles (conmutan)
- La b.o.n. de vectores propios simultáneos es única salvo fases
- El sistema es no redundante

Postulados de la Mecánica Cuántica

Operador densidad: descripción de una colectividad (colección estadística).

$$\rho = \sum_n p_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|, \quad \sum_n p_n = 1, \quad p_n \geq 0. \quad \rho = \rho^\dagger, \quad \|\rho\| \leq 1$$

$$\text{Tr}\rho = \sum_n \langle\psi_n|\rho|\psi_n\rangle = 1 \quad \text{Tr}\rho A = \sum_n p_n \langle A \rangle_{\psi_n} = \langle A \rangle_\rho$$

Un estado general siempre puede escribirse como un operador densidad

Probabilidad de obtener un resultado en una colectividad: Tomamos un elemento al azar de la colectividad, ¿cuál es la probabilidad de obtener a al medir A?

$$P_{A,\rho}(\Delta) = \text{Tr}\rho P_A(\Delta)$$

Medimos A en todos los elementos de la colectividad y seleccionamos los que tienen valor a ¿Cuál es el operador densidad resultante?

$$\rho_{a,\Delta} = \frac{1}{\text{Tr}\rho P_A(\Delta)} \sum_{a \in \Delta} P_{A,M_a} \rho P_{A,M_a}$$

Estado puro: $\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \Leftrightarrow \rho^2 = \rho \Leftrightarrow \text{Tr}\rho^2 = 1$

Postulados de la Mecánica Cuántica

Estados compuestos: entrelazamiento

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = \{|u\rangle \otimes |v\rangle / u \in \mathcal{H}_1, v \in \mathcal{H}_2\}$$

Estado separable: $|uv\rangle$

Estado entrelazado: $\sum_{ij} \alpha_{ij} |u_i v_j\rangle$

Operadores actuando sobre sistemas compuestos $A_1 \otimes A_2 |uv\rangle = (A_1 |u\rangle) \otimes (A_2 |v\rangle)$

Densidad de matriz reducida $A \in L(\mathcal{H}_1) \Rightarrow A |uv\rangle = (A |u\rangle) \otimes |v\rangle$

$$\text{Tr}(\rho A) = \sum_{ij} \langle u_i v_j | \rho A | u_i v_j \rangle = \sum_i \langle u_i | \left(\sum_j \langle v_j | \rho | v_j \rangle \right) A | u_i \rangle \equiv \text{Tr}_{\mathcal{H}_1}(\rho^{\mathcal{H}_1} A) \quad \rho^{\mathcal{H}_1} \equiv \text{Tr}_{\mathcal{H}_2}(\rho)$$

Postulados de la Mecánica Cuántica

Postulado VI: Entre dos medidas consecutivas los estados puros se mantienen puros y su evolución temporal viene dada por la Ec. de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad H = H^\dagger$$
$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle\psi(t)| = \langle\psi(t)| H(t)$$

La evolución temporal es determinista (la indeterminación ocurre en el proceso de medida)

El tiempo es un parámetro, no un observable (al contrario que x) => No covariante Lorentz

Operador evolución temporal: $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$

$$U(t, t) = 1$$
$$U(t_2, t_1) U(t_1, t_0) = U(t_2, t_0)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H(t) U(t, t_0)$$
$$U(t + dt, t) = 1 - \frac{i}{\hbar} H(t) dt$$

Soluciones de la Eq de Schrödinger $\partial_t H = 0, \Rightarrow U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)}$

$$\partial_t H \neq 0, [H(t), H(t')] = 0 \forall t \neq t' \Rightarrow U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t')}$$

En general
$$U(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) H(t_2) \dots H(t_n)$$

Estados estacionarios

$$U(t, 0) = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |n\rangle \langle n|$$

Postulados de la Mecánica Cuántica

Imágenes de evolución temporal: Schrödinger y Heisenberg

Imagen de Schrödinger: Los observables no evolucionan en el tiempo, los estados sí.

$$\langle \psi | O | \phi \rangle \rightarrow \langle \psi | U^\dagger O U | \phi \rangle$$

Imagen de Heisenberg: Los observables evolucionan en el tiempo, los estados no.

$$|\psi(t)\rangle_H = |\psi(0)\rangle_H = |\psi(0)\rangle_S$$

$$O^{(H)}(t) = U^\dagger(t) O^{(S)}(t) U(t) \quad \frac{d}{dt} O^{(H)}(t) = -\frac{i}{\hbar} [O^{(H)}(t), H^{(H)}] + U^\dagger(t) \frac{dO^{(S)}(t)}{dt} U(t)$$

$$\rho(t) = U(t) \rho(t_0) U^\dagger(t), \quad i\hbar \frac{d\rho}{dt} = -[\rho(t), H(t)] \quad \rho_H(t) = \rho_H(0)$$

Regla de cuantización canónica: Reemplazamos en un sistema físico las coordenadas cartesianas x_i y sus momentos conjugados p_j por operadores que satisfacen:

$$[X_i, P_j] = i\hbar \delta_{i,j} \mathbb{1}, \quad [X_i, X_j] = [P_i, P_j] = 0$$

Reglas de superselección: Sea un observable Q que conmuta con todos los demás observables del sistema. Entonces los subespacios de H asociados a valores propios de Q diferentes no pueden conectarse a través de ningún observable físico.