Función de Onda

Función de onda: Coeficiente de Fourier de un estado en una b.o.n. correspondiente a los vectores propios (generalizados) de un CCOC.

$$\psi(a,b,c,\ldots) \equiv \langle a,b,c,\ldots|\psi\rangle \qquad |\psi\rangle = \sum_{a,b,c,\ldots} \psi(a,b,c,\ldots)|a,b,c,\ldots\rangle$$

$$1 = \langle\psi|\psi\rangle = \sum_{a,b,c,\ldots} |\psi(a,b,c,\ldots)|^2$$

Representación de posiciones: partícula elemental y sin espín (CCOC={X})

$$\vec{X}|\vec{x}\rangle = \vec{x}|\vec{x}\rangle \qquad X|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \quad \Rightarrow |\lambda\rangle(x) = N\delta(x-\lambda) \qquad \sigma(X) = \sigma_c(X) = \mathbb{R}$$

$$\psi(\vec{x}) = \langle\vec{x}|\psi\rangle, \qquad 1 = \langle\psi|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3x\, |\psi(\vec{x})|^2 \quad \Rightarrow \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$$

$$\langle\vec{y}|\vec{x}\rangle = \delta^{(3)}(y-x) = \Pi_i\delta(y_i - x_i), \qquad \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3x\, |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}| = \mathbb{1}$$

Probabilidad de que la partícula esté en un volumen V del espacio

$$P_{X,\psi}(V) = \langle\psi|P_X(V)|\psi\rangle = \langle\psi| \int_V \mathrm{d}^3x\, |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\psi\rangle = \int_V \mathrm{d}^3x\, |\psi(\vec{x})|^2$$

Función de Onda

Traslación: Operador T unitario que introduce una traslación espacial

$$T(\vec{a})|\vec{x}\rangle = |\vec{x}+\vec{a}\rangle \qquad T(\vec{a}_1)T(\vec{a}_2) = T(\vec{a}_1+\vec{a}_2), \qquad T^{-1}(\vec{a}) = T(-\vec{a}) = T^\dagger(\vec{a}), \qquad T(\vec{0}) = \mathbb{1}$$

Grupo continuo: podemos generar una traslación finita iterando una infinitesimal

$$T(\mathrm{d}\vec{x}) \equiv \mathbb{1} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{d}\vec{x}\cdot\vec{P}, \qquad T(\vec{x}) = \lim_{N\to\infty}\left(\mathbb{1} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{\vec{x}\cdot\vec{P}}{N}\right)^N = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{P}\cdot\vec{x}}, \qquad T^{-1} = T^\dagger \Rightarrow \vec{P} = \vec{P}^\dagger$$

$$[\vec{X}, T(\mathrm{d}\vec{x})]\cdot|\vec{x}\rangle = (\vec{x}+\mathrm{d}\vec{x})\cdot|\vec{x}+\mathrm{d}\vec{x}\rangle - \vec{x}|\vec{x}+\mathrm{d}\vec{x}\rangle = T(\mathrm{d}\vec{x})\mathrm{d}\vec{x}\cdot|\vec{x}\rangle \quad\Rightarrow\quad \boxed{[X_i, P_j] = \mathrm{i}\hbar\,\delta_{i,j}\,\mathbb{1}}$$

Cómo actúa sobre la función de onda de posiciones? (Caso 1-dim por simplicidad)

$$|x+\mathrm{d}x\rangle = |x\rangle - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{d}x\,P|x\rangle \Rightarrow P|x\rangle = \mathrm{i}\hbar\frac{|x+\mathrm{d}x\rangle - |x\rangle}{\mathrm{d}x} \Rightarrow \langle x|P = -\mathrm{i}\hbar\frac{\langle x+\mathrm{d}x| - \langle x|}{\mathrm{d}x}$$

$$\langle x|P|\psi\rangle = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} \Rightarrow \langle\vec{x}|P_i|\psi\rangle = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x_i}$$

Función de Onda

Representación de momentos

$$P_i|\vec{p}\rangle = p_i|p\rangle, \qquad \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3p\,|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| = \mathbb{1}, \qquad \langle\vec{p}|\vec{p}'\rangle = \delta^3(\vec{p}-\vec{p}') \qquad \psi(\vec{p}) = \langle\vec{p}|\psi\rangle$$

$$\langle\vec{x}|P_i|\vec{p}\rangle = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_i}\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle = p_i\,\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle \;\Rightarrow\; \langle\vec{x}|\vec{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \;\Rightarrow\; \langle\vec{p}|\vec{x}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}$$

$$\hat{\psi}(\vec{p}) = \langle\vec{p}|\psi\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}\psi(\vec{x}) \qquad \psi(\vec{x}) = \langle\vec{x}|\psi\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}\hat{\psi}(\vec{p})$$

Localización de funciones de onda

$$f(x) = \langle x|x_0\rangle = \delta(x-x_0) \Rightarrow \hat{f}(p) = \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}x_0 p}}{\sqrt{2\pi\hbar}}, \qquad \Delta_\psi X\;\Delta_\psi P \geq \frac{1}{2}\left|\langle[X,P]\rangle_\psi\right| = \frac{\hbar}{2}$$

Paquete de ondas gaussiano (localización óptima en ambas variables)

Ecuación de Schrödinger para la función de onda $\quad H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$

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

Función de Onda

Ecuación de continuidad $\rho(\vec{x},t) = |\psi(\vec{x},t)|^2$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{x},t) = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\psi^* H\psi - (H\psi)^*\psi\right] \;\Rightarrow\; \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3x\,\rho(\vec{x},t) = 0$$

Si $H = \dfrac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \;\Rightarrow\; \dfrac{\partial\rho(\vec{x},t)}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{J}(\vec{x},t) = 0, \quad \vec{J}(\vec{x},t) = -\dfrac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left[\psi^*\vec{\nabla}\psi - (\vec{\nabla}\psi^*)\psi\right] = \dfrac{\hbar}{m}\mathrm{Im}(\psi^*\vec{\nabla}\psi)$

$$\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}x\,\vec{J}(\vec{x},t) = \frac{1}{2m}\int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}x\,\left[\psi^*\vec{P}\psi + (\vec{P}\psi^*)\psi\right] = \langle\psi|\vec{V}|\psi\rangle$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{\Omega} \mathrm{d}^3x\,\rho(\vec{x},t) = -\int_{\partial\Omega} \mathrm{d}\vec{s}\cdot\vec{J}(\vec{x},t)$$

$$\psi(\vec{x},t) = \sqrt{\rho(\vec{x},t)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}S(\vec{x},t)/\hbar} \;\Rightarrow\; \vec{J}(\vec{x},t) = \frac{1}{m}\rho\vec{\nabla}S$$

Teorema de Ehrenfest $H = \dfrac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$

$$\langle\vec{F}\rangle_\psi = m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\langle\vec{x}\rangle_\psi$$

Función de Onda

Propagador (retardado)

$$G(\vec{x}_2,t_2;\vec{x}_1,t_1) = \langle \vec{x}_2|U(t_2,t_1)|\vec{x}_1\rangle \theta(t_2-t_1) \qquad \psi(\vec{x}_2,t_2) = \int \mathrm{d}^3x\, G(\vec{x}_2,t_2;\vec{x}_1,t_1)\psi(\vec{x}_1,t_1)$$

$$G(\vec{x}_3,t_3;\vec{x}_1,t_1) = \int \mathrm{d}^3x_2\, G(\vec{x}_3,t_3;\vec{x}_2,t_2)G(\vec{x}_2,t_2;\vec{x}_1,t_1), \quad t_3>t_2>t_1$$

Función de Green de la ecuación de Schrödinger

$$\left[\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t'} - H(\vec{x}')\right] G(\vec{x}',t';\vec{x},t) = \mathrm{i}\hbar\delta^{(3)}(\vec{x}'-\vec{x})\delta(t'-t)$$

Sistema conservativo

$$G(\vec{x}_2,t_2;\vec{x}_1,t_1) = \langle \vec{x}_2|\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H(t_2-t_1)}|\vec{x}_1\rangle\theta(t_2-t_1) = \sum_E \psi_E(\vec{x}_2)\psi_E^*(\vec{x}_1)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E(t_2-t_1)}\theta(t_2-t_1)$$

Transformada de Fourier

$$\hat{G}(E,\vec{x};\vec{x}') = -\mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}G(\vec{x}',t;\vec{x},0)$$

$$\hat{G}_+(E,\vec{x};\vec{x}') = \lim_{\epsilon\to 0^+}\hat{G}(E+\mathrm{i}\epsilon,\vec{x}';\vec{x}) = \sum_{E_n}\frac{\psi_{E_n}(\vec{x}')\psi_{E_n}^*(\vec{x})}{E-E_n+\mathrm{i}0^+}$$

$$G(\vec{x}',t;\vec{x},0) = \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}E\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}\hat{G}_+(E,\vec{x}';\vec{x})$$

Función de Onda

Integral de camino de Feynman

$$G(x,t;x_0,t_0) = \int \ldots \int \mathrm{d}x_1 \ldots \mathrm{d}x_N G(x,t;x_N,t_N) \ldots G(x_1,t_1;x_0,t_0), \qquad t_0 < t_1 < \ldots < t_N < t$$

$$G(x,t;x_0,t_0) = \int \mathrm{d}[x]\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} S[x]}$$

La medida se define como límite del discreto

Límite clásico $\hbar/S \to 0$: todas las trayectorias salvo la clásica dan lugar a grandes oscilaciones que promedian a cero

Todos los caminos contribuyen (con su peso): Experimento de la doble rendija

Formulación equivalente a la de Schrödinger (sin operadores), muy útil en teoría cuántica de campos (invariancia Lorentz explícita)