Pontificia Universidad Católica de Chile
Facultad de Física - Instituto de Física
FIZ0322 - Física Cuántica I
Profesor: Rafael Benguria (rbenguri@fis.puc.cl)
Ayudantes: Eitan Dvorquez (edvorquez@uc.cl)
Fernanda Correa (fpazcorrea@uc.cl)

Resumen Física Cuántica I

2020 - 2

- **Teorema de Ehrenfest**

$$\langle \mathbf{p} \rangle = m\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -i\hbar \int \overline{\Psi}\ \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx \tag{1}$$

$$\frac{d}{dt}\left(\langle \mathbf{p} \rangle\right) = -\left\langle V'(x) \right\rangle \tag{2}$$

- **Ecuación de Schrödinger Estacionaria**

$$H\phi = E\phi \qquad\qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + V\phi = E\phi \tag{3}$$

- **Solución General**

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x)\ e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \qquad\qquad c_n = \int \phi_n(x)\Psi(x,0)\ dx \tag{4}$$

- **Pozo infinito**

Dado un potencial de la forma:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & si \quad x < 0 \ o \ x > a \\ \\ 0 & si \quad 0 < x < a \end{cases}$$

Se tiene que los niveles de energía posibles están dados por:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \tag{5}$$

Mientras que los estados propios siguen la forma:

$$\phi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} sen\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \tag{6}$$

- **Principio de incertidumbre**

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{7}$$

- **Tabla de Integrales**

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \tag{8}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{2a} \tag{9}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\; e^{b^2/4a} \tag{10}$$

- **Oscilador Armónico**
  - **Hamiltoniano**

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m w^2 x^2 \tag{11}$$

  - **Operadores de subida y bajada**

$$a = \frac{1}{\sqrt{2wm\hbar}} (wmx + ip) \tag{12}$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2wm\hbar}} (wmx - ip) \tag{13}$$

    - a y a^+ satisfacen $[a,a^+] = 1$
    - Cuando actúan sobre las funciones propias del Hamiltoniano del oscilador armónico, satisfacen las siguientes relaciones:

$$a^+ \phi_n = \sqrt{n+1}\; \phi_{n+1} \tag{14}$$

$$a\; \phi_n = \sqrt{n}\; \phi_{n-1} \tag{15}$$

  - **Operador N**
    Definimos

$$N = a^+ a \tag{16}$$

    Podemos relacionar este operador con el hamiltoniano del oscilador armónico, de forma que:

$$H = \hbar w \left(N + \frac{1}{2} \right) \qquad\qquad E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar w \tag{17}$$

- **Potencial Delta**
  Truco: Condición de Salto
  Para esta clase de problemas debemos considerar que en todo el espacio, salvo en el punto en donde está centrado el potencial delta, el potencial es igual a cero (a menos que nos indiquen lo contrario). Planteando la ecuación de Schr¨dinger justo en el punto central del potencial e integrándola en un intervalo muy pequeño, obtenemos una "condición de salto". A partir de lo anterior y las condiciones de continuidad y borde adecuadas, podemos encontrar las energías permitidas para el problema. Por ejemplo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi'' - \lambda\delta(x)\phi = E\phi \qquad \Big/ \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \quad con\ \ \epsilon \to 0 \tag{18}$$

- **Operadores que conmutan**
  Si A y B son hermíticos y conmutan ($[A, B] = 0$), entonces se pueden diagonalizar simultáneamente y comparten los valores propios.

- **Coeficientes de Reflexión y Transmisión**
  Consideramos que "lanzamos" un paquete de ondas planas desde la izquierda de la Figura 1.

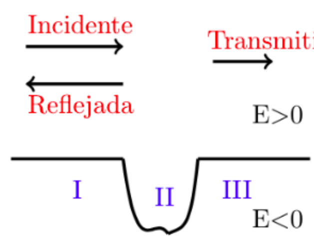

Figura 1: Representación reflexión y transmisión

Consideramos:

$$\Psi_{izq}(x) = \underbrace{Ae^{ikx}}_{Incidente} + \underbrace{Fe^{-ikx}}_{Reflejada} \qquad \Psi_{der}(x) = \underbrace{Ge^{ikx}}_{Transmitida} \tag{19}$$

y buscamos los coeficientes R y T:

$$R = \frac{|F|^2}{|A|^2} \qquad T = \frac{|G|^2}{|A|^2} \qquad R + T = 1 \tag{20}$$

- **Ecuación de Schrödinger en 3D**

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) = \frac{p^2}{2m} + V(r) \qquad \vec{p} = -i\hbar\nabla; \quad p^2 = -\hbar^2\Delta \tag{21}$$

- **Átomo de Hidrógeno**
  El potencial característico del átomo de Hidrógeno es:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{22}$$

Luego de aplicar el método de separación de variables para resolver la ecuación de Schrödinger tridimensional y tras un arduo análisis matemático llegamos a la siguiente expresión para la función de onda que describe el átomo de Hidrógeno:

$$\begin{aligned}\Psi_{nlm} &= R_{nl}(r)\ Y_{lm}(\theta,\phi) \\ &= \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}}\ e^{-\frac{r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l \left[L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)\right] Y_l^m(\theta,\phi)\end{aligned} \tag{23}$$

Donde a_0 es el radio de Bohr definido por:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2}\frac{\hbar^2}{m} \tag{24}$$

y las energías permitidas vienen dadas por:

$$E_n = -\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2} \qquad\qquad E_1 = -13{,}6eV \tag{25}$$

- **Operadores que conmutan**
  Si A y B son hermíticos y conmutan ($[A,B]=0$), entonces se pueden diagonalizar simultáneamente y tienen un conjunto común de funciones propias.

- **Momentum Angular**
  Consideramos $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$ como el momentum angular o generador de rotaciones. Podemos escribir sus componentes como:

$$\begin{aligned} L_x &= yp_z - zp_y \\ L_y &= zp_x - xp_z \\ L_z &= xp_y - yp_x \end{aligned} \tag{26}$$

  $\vec{L}$ satisface el "Álgebra de Lie"(que también conoceremos como álgebra de momentum angular)

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= i\hbar L_z \\ [L_y, L_z] &= i\hbar L_x \\ [L_z, L_x] &= i\hbar L_y \end{aligned} \tag{27}$$

  Con estas relaciones se puede mostrar que:

$$[L^2, Lz] = 0 \tag{28}$$

  Será útil recordar:

$$[x,p] = i\hbar \qquad\qquad [x_j, p_k] = i\hbar\delta_{jk} \tag{29}$$

- **Momentum Angular y esféricos armónicos**
  Si se satisfacen las relaciones de conmutación, se puede demostrar que:

$$\begin{aligned} L^2\ Y_{lm} &= \hbar^2 l(l+1)\ Y_{lm} \\ L_z\ Y_{lm} &= \hbar m\ Y_{lm} \end{aligned} \tag{30}$$

  De esto extraemos que los esféricos armónicos son funciones propias de L^2 y L_z con valores propios $\hbar^2 l(l+1)$ y $m\hbar$, respectivamente

- **Momentum Angular General**
Vamos a decir que $\vec{J}$ es un momentum angular general si satisface el álgebra de momentum angular generalizado:

$$\begin{aligned}
[J_x, J_y] &= i\hbar J_z \\
[J_y, J_z] &= i\hbar J_x \\
[J_z, J_x] &= i\hbar J_y
\end{aligned} \tag{31}$$

Con estas relaciones se puede mostrar que J^2 conmuta con todas las componentes de J:

$$[J^2, Ji] = 0 \tag{32}$$

- **Momentum Angular, operadores de subida y bajada**

$$\begin{aligned}
J_+ &= J_x + iJ_y \\
J_- &= J_x - iJ_y
\end{aligned} \tag{33}$$

Estos operadores satisfacen:

$$\begin{aligned}
[J_z, J_\pm] &= \pm\hbar J_\pm \\
[J^2, J_\pm] &= 0
\end{aligned} \tag{34}$$

- **Momentum Angular y el problema espectral**

Se puede demostrar que:

$$\begin{aligned}
J^2\ \ |jm\ &= \hbar^2 l(l+1)\ \ |jm \\
J_z\,|jm\ &= \hbar m\ \ |jm
\end{aligned} \tag{35}$$

- **Elementos de matrices de los J's para j dado**

Consideremos

$$\begin{aligned}
\langle jm'|\, J_z\,|jm\ &= \hbar m\ \delta_{m`m} \\
\langle jm'|\, J^2\,|jm\ &= \hbar^2 j(j+1)\ \delta_{m`m} \\
\langle jm'|\, J_+\,|jm\ &= \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\ \delta_{m`(m+1)} \\
\langle jm'|\, J_-\,|jm\ &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\delta_{m`(m-1))}\ \delta_{m`(m-1)}
\end{aligned} \tag{36}$$

- **Matrices de Pauli**
Definimos las matrices de Pauli para el caso de Spin $\frac{1}{2}$ como:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{37}$$

Estas matrices son hermíticas y sus valores propios son ± 1. Se cumple que:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbb{I} \tag{38}$$

y además son cíclicas:

$$\begin{aligned}\sigma_x\sigma_y &= i\sigma_z\\ \sigma_y\sigma_z &= i\sigma_x\\ \sigma_z\sigma_x &= i\sigma_y\end{aligned} \tag{39}$$

- **Matrices de Spin**
  Podemos escribir las matrices de Spin como:

$$\mathbb{S}_x = \frac{1}{2}\hbar\sigma_x \qquad \mathbb{S}_y = \frac{1}{2}\hbar\sigma_y \qquad \mathbb{S}_z = \frac{1}{2}\hbar\sigma_z \tag{40}$$

- **Suma de Momentum Angular**
  Ante una suma de momentum angular con j_1 y j_2 tenemos que los posibles valores de j serán:

$$j = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, ..., j_1 + j_2 \tag{41}$$

  Por otro lado, los posibles valores de m estarán dados por:

$$m = -j, .., j \tag{42}$$

  siempre y cuando los "saltos"que se vayan dando sean iguales a 1.

  Por último, de acuerdo a lo visto en clases tenemos:

$$|j\ m\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} C^{j_1,j_2,j}_{m_1,m_2,m} |j_1\ m_1\rangle\, |j_2\ m_2\rangle \tag{43}$$

  Donde $|j_1\ m_1\rangle\, |j_2\ m_2\rangle$ es el producto directo de los kets. Los coeficientes C son los coeficientes de Clebsch-Gordan, que se encuentran tabulados.

- **Teorema de Bloch**

  Dado un potencial periódico de la forma

$$V(x+a) = V(x) \tag{44}$$

  El teorema de Bloch nos dice que para tal potencial, las soluciones a la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + V(x)\Psi = E\Psi \tag{45}$$

  Satisfacen la condición:

$$\Psi(x+a) = e^{iKa}\Psi(x) \tag{46}$$

  Para una constante K (independiente de x).

  Se puede mostrar que se satisface también:

$$|\Psi(x+a)|^2 = |\Psi(x)|^2 \tag{47}$$