Mecánica Cuántica I,
Primer Cuatrimestre 2014; Resumen del contenido de las clases[1]
G.A. Raggio

1. 12/03: Comentarios sobre la organización. La ec.de Schrödinger de una partícula libre

Condiciones generales y bibliografía.
La ecuación de Schrödinger para la partícula libre (via métodos de la transformación de Fourier). La función de onda y su interpretación como "amplitud" de la densidad de probabilidad para la posición de la partícula. Paquete de ondas o superposición de ondas planas (con dispersión desconocida). Identificación del valor esperado de la velocidad con aquel de la velocidad de grupo del paquete de ondas y determinación de la ley de dispersión. Primeras propiedades de la ecuación de Schrödinger

2. 14/03: Transformación de Fourier y mecánica cuántica: el momento. Movimiento libre.

Repaso de propiedades básicas de la transformación de Fourier. La transformada de Fourier de la función de onda como amplitud de la densidad de probabilidad para el momento via la relación de de Broglie. La ec. de Schrödinger para la transformada de Fourier. Identificación del operador asociado con el momento lineal. La ec. de movimiento para la transformada de Fourier en el caso libre y su solución. Aproximación (brutal) para el caso en el cual la distribución en momento está muy concentrada: la función se mueve con velocidad constante sin deformación.

3. 19/03: Movimiento libre. Posición y momento.

Solución por transf. de Fourier –propagador para el movimiento libre. Propiedades y fórmula asintótica para tiempos grandes. El operador posición y el operador momento: definición y propiedades (discontinuidad); dispersión. El conmutador y su interpretación.

4. 21/03: "Postulados"

Los postulados básicos de la mecánica cuántica (no relativista y sin spin). Funciones de onda y su interpretación; "Observables" (magnitudes físicas) como operadores lineales; posición y momento; dinámica (ec. de Schrödinger) y Hamiltoniano (energía); valores esperados. Ec. de movimiento para los valores esperados. Solución de la ec. de Schrödinger; propagador unitario. Soluciones estacionarias y la ec. de Schrödinger estacionaria (independiente del tiempo). Un formalismo alternativo: la representación de Heisenberg. La ecuación de continuidad para la densidad de probabilidad "local".

[1] Gracias al Sr. Gurgo.

5. 26/03: "Observables"

Las "observables" de la mecánica cuántica. Un operadores es continuo si y sólo si es acotado. Un operador densamente definido esta unívocamente determinado por sus valores esperados (via identidad de polarización). Dispersión. Relaciones de incerteza y condiciones para la igualdad en la desigualdad: Desigualdad de Schrödinger; estados coherentes; en espacial para posición y momento. Teorema de Ehrenfest.

6. 28/03: Sistemas unidimensionales

Ec. de Schrödinger estacionaria para sistemas conservativos con un solo grado de libertad espacial. ¿Que es el espectro de un operador autoadjunto? Discusión y propiedades de las ec. dif. ordinarias de segundo orden en un intervalo: Wronskiano y sus propiedades; simplicidad de autovalores si existen; valores espectrales y soluciones polinomialmente acotadas; estructura cualitativa del espectro del Hamiltoniano cuando el potencial tiene asíntotas.

7. 04/04: Sistemas unidimensionales

Transmisión y reflexión en el escalón: Solución general de la ec. estacionaria de Schrödinger a la izq. y a la derecha del salto. Continuidad de solución y su derivada. Soluciones con interpretación de onda incidente/reflejada y onda transmitida. Flujos de probabilidad asociados. Coeficientes de reflexión y de transmisión y propiedades.

8. 09/04: Sistemas unidimensionales

Transmisión y reflexión en el escalón (continuación). Transmisión y reflexión en general. Hipótesis de "regularidad asintótica" y consecuencias. Coeficientes de reflexión y transmisión (como características del potencial independientes de la dirección de incidencia/reflexión y de transmisión).

9. 11/04: Sistemas unidimensionales

Resonancias en el pozo cuadrado. Método de la matriz de transferencia (o de dispersión). Efecto túnel y resonancias en la barrera cuadrada.
El oscilador armónico: el Hamiltoniano y su positividad; expectativas sobre el espectro: puramente discreto y simple; la gaussiana como autofunción; intento de encontrar A con $H = A * A$; operadores de "creación" y de "aniquilación" (su adjunto); operador número $N = a^*a$; los conmutadores pertinentes; el espacio vectorial complejo de dimensión 4 generado por $a, a*, N$ y la identidad es invariante ante conmutadores.

10. 16/04: Oscilador armónico (continua)

4 propiedades simples de las autofunciones de N; deducción de que el espectro discreto de N son los numeros naturales; simplicidad de los autovalores; autofunciones $\{\phi_n : n \in \mathbb{N}\}$ y comentarios sobre la completitud y la ausencia de

espectro continuo. Fórmulas para $a\phi_n$ y $a * \phi_n$. Análisis de la ec. diferencial y de la solución por el método de Frobenius.

11. 23/04: Sistemas unidimensionales: potenciales periódicos

Potenciales periódicos. El Hamiltoniano H conmuta con la traslación por el período. Implementación unitaria de las traslaciones en $\mathbb{R}^d$ en $L^2(\mathbb{R}^d)$; estos unitarios no tienen autovalores. El Hamiltoniano no tiene autovalores. Estados de Bloch-Floquet; "autofunciones" (no son de módulo cuadrado integrable) del unitario de traslación por el período; la matriz C y las alternativas $|tr(C)|$ mayor, igual o menor que 2; estructura de bandas del espectro (primera vuelta).

12. 25/04: Primer parcial

13. 30/04: Sistemas unidimensionales. Potenciales periódicos (continuación). Sistemas confinados

Precisiones sobre la estructura de bandas; Teorema de Birkhoff; construcción de la matriz C.
Las condiciones de borde para sistemas confinados o parcialmente confinados: El Hamiltoniano debe ser autoadjunto; por lo tanto $W(f,g)(a) = W(f,g)(b)$ si $[a,b]$ es el espacio de configuraciones para cualquier par de funciones f,g que esten en el dominio de definición de H; y en el caso $[a,\infty)$, $W(f,g) = 0$ para cualquier par de funciones f,g que esten en el dominio de definición de H. **¡Las condiciones en el borde especifican de que sistema físico se trata!**

14. 07/05: Resultados generales I

Teorema Virial: Si f es autovector de un autoadjunto A entonces el valor esperado de $[A,B]$ para ese autovector f se anula para todo operador B; tomando $A = H$, el Hamiltoniano de un sistema conservativo sin campos EM y $B = \widehat{x}_j\widehat{p}_j$ se obtiene una relación entre el valor esperado para un estado estacionario de la energía cinética y el trabajo (Teorema Virial). Caso particular de un potencial homogeneo.
Cota inferior al autovalor minimal (Cota de Temple): significado y uso. Cotas de solapación de Rayner (para el estado fundamental) y de Eckart (para la proyección al autoespacio de la energía fundamental).
Proyectores (ortogonales): definiciones y propiedades.

15. 09/05: Resultados generales II

Teorema espectral en dimensión finita. Extensión a dimensión infinita (i.e. operadores autoadjuntos con espectros parcialmente continuos). Particiones del espectro: puntual/continuo o bien discreto/esencial.
Algunos resultados sobre el espectro de Hamiltonianos de sistemas no-relativistas sin campos electromagnéticos: Potenciales asintóticamente nulos y energía acotada por debajo; potenciales positivos y asintóticamente infinitos; simplicidad

de la energía fundamental (cuando existe) y postividad del autoestado correspondiente para sistemas de partículas con interacciones de a pares y centro de masa separado.
Simetrias y constantes de movimiento. **¡Si A y B son operadores que conmutan entonces todo autoespacio de A es invariante ante la acción de B!**

16. 14/05: Resultados generales III

Principio Variacional y Teorema Mini-Max: caso de dimensión finita; formulación general; consecuencias. Aplicaciones del Teorema Mini-Max: Metodo variacional de Ritz; matrices básicas; puntos estacionarios como autovalores de la restricción del operador al subespacio generado; etc.

17. 16/05: Simetrias

Unitarios; que son y para que sirven; por ejemplo: la evolución dinámica. Grupos monoparamétricos y Teorema de Stone-von Neumann, generadores.
Implementación unitaria de una transformación ortogonal T de $\mathbb{R}^d$; $T \mapsto U_T$ como representación del grupo $O(d)$; $U_{T^{-1}} = (U_T)^{-1}$ y $U_T U_S = U_{TS}$ (con todo detalle !!!). Ejemplo: separación del centro de masas (calculo detallado).
Implementación unitaria de $L^2(X, dx)$ a $L^2(Y, dy)$ de una transformación biyectiva suave de X en Y. Ejemplo (sin detalles): coordenadas esfericas en $\mathbb{R}^3$.
Principio de Implementación: si conoce (un grupo de) simetrías del espacio de configuraciones de un sistema cuántico entonces implementelas siempre por unitarios en el espacio de Hilbert asociado con el espacio de configuraciones. ¡No se arrepentira!

18. 21/05: Simetrias II

El grupo de dilataciones (homogeneas) y propiedades de escala del espectro del Hamiltoniano; transformación de posición y momento respecto a dilataciones; ejemplos: potenciales de Coulomb, armónico, y –en general– homogeneos.
Criterios para la existencia de estados ligados (una particula en d dimensiones); criterio de integral negativa para el potencial en una dimensión; ejemplo de la guia 6. Principio variacional + desigualdad de Temple: un algoritmo para diagonalizar una matriz 2×2.

19. 23/05: Rotaciones del espacio tridimensional

"Rotaciones" en una y dos dimensiones. Rotaciones en $\mathbb{R}^3$,

$$D(\mathbf{e}, \phi)\mathbf{x} = \langle \mathbf{e}, \mathbf{x} \rangle + \cos(\phi)(\mathbf{x} - \langle \mathbf{e}, \mathbf{x}\mathbf{e} \rangle) + \sin(\phi)\mathbf{e} \wedge \mathbf{x}$$

donde $\mathbf{e}$ es vector unitario en el eje de rotación y ϕ es el ángulo de rotación. Subgrupos monoparamétricos determinados por $\mathbf{e}$ fijo. Generador de ellos:

$$D(\mathbf{e}, \phi) = e^{\phi(\mathbf{e} \wedge \cdot)} \ , \quad (\mathbf{e} \wedge \cdot)\mathbf{x} := \mathbf{e} \wedge \mathbf{x} \ .$$

Forma explicita de D en términos de las coordenadas cartesianas de $\mathbf{e}$.

20. 28/05: No hay alumnos

21. 30/05: Rotaciones del espacio tridimensional y su implementación unitaria

Rotaciones en $\mathbb{R}^3$ (continua): Relaciones de conmutación para los generadores G_1, G_2, G_3 de las rotaciones: $[G_1, G_2] = G_3$ & p.c.i. (permutación cíclica de los índices); ortogonalidad de las rotaciones y valor de la determinante; grupo de matrices ortogonales $O(3)$ y el subgrupo $SO(3)$ que es isomorfo al grupo de rotaciones. Representación unitaria (por el Principio de Implementación unitaria; i.e., por la fórmula canónica) de $SO(3)$ en $L^2(\mathbb{R}^3)$:

$$\left\{U_{(\mathbf{e},\phi)}\psi\right\}(\mathbf{x}) := \psi(D(\mathbf{e},-\phi)\mathbf{x}) \; .$$

Cálculo del generador de los subgrupos monoparamétricos unitarios $\alpha \mapsto U_{(\mathbf{e},\alpha)}$:

$$U_{(\mathbf{e},\alpha)} = \exp\{-i\alpha\mathbf{e}\cdot\widehat{\mathbf{L}}/\hbar\} \; , \quad \widehat{\mathbf{L}} := \widehat{\mathbf{x}} \wedge \widehat{\mathbf{p}} \; .$$

Fórmulas de transformación ($\widehat{\mathbf{x}}$, $\widehat{\mathbf{p}}$ y $\widehat{\mathbf{L}}$ son operadores vectoriales):

$$\begin{aligned} U^*_{(\mathbf{e},\alpha)}\widehat{\mathbf{x}}U_{(\mathbf{e},\alpha)} &= D(\mathbf{e},\alpha)\widehat{\mathbf{x}} \; , \\ U^*_{(\mathbf{e},\alpha)}\widehat{\mathbf{p}}U_{(\mathbf{e},\alpha)} &= D(\mathbf{e},\alpha)\widehat{\mathbf{p}} \; , \\ U^*_{(\mathbf{e},\alpha)}\widehat{\mathbf{L}}U_{(\mathbf{e},\alpha)} &= D(\mathbf{e},\alpha)\widehat{\mathbf{L}} \; ; \end{aligned}$$

derivada de la última relación:

$$\frac{i}{\hbar}[\mathbf{e}\cdot\widehat{\mathbf{L}}, \widehat{\mathbf{L}}] = \mathbf{e} \wedge \widehat{\mathbf{L}} \; ;$$

relaciones de conmutación para las componentes de $\widehat{\mathbf{L}}$:

$$[\widehat{L}_1, \widehat{L}_2] = i\hbar\widehat{L}_3 \; \&p.c.i. \; , \quad [\widehat{L}_j, \widehat{L}_k] = i\hbar\epsilon_{j,k,\ell}\widehat{L}_\ell \; ;$$

el operador $\widehat{\mathbf{L}}^2 := \widehat{\mathbf{L}}\cdot\widehat{\mathbf{L}}$ es escalar:

$$U^*_{(\mathbf{e},\alpha)}\widehat{\mathbf{L}}^2U_{(\mathbf{e},\alpha)} = \widehat{\mathbf{L}}^2 \; , \quad [\widehat{\mathbf{L}}^2, \widehat{\mathbf{L}}] = \widehat{\mathbf{O}} \; .$$

22. 04/06: Espectro de un "momento angular"

El espectro de un trio $\mathbf{J} = (J_1, J_2, J_3)$ de operadores autoadjuntos J_j ($j = 1,2,3$) que satisfacen las relaciones de conmutación $[J_1, J_2] = iJ_3$ y p.c.i. Propiedades algebraicas básicas de $\mathbf{J}^2$, J_3 y $J_\pm := J_1 \pm iJ_2$ y consecuencias: **Los autovalores de $\mathbf{J}^2$ si existen son de la forma $j(j+1)$ donde $j \in \mathbb{N}/2 = \{0, 1/2, 1, 3/2, 2, \cdots\}$ y tienen multiplicidad que es múltiplo de $2j+1$. Si en el autoespacio $\mathcal{E}_{j(j+1)}(\mathbf{J}^2)$ de $\mathbf{J}^2$ al autovalor $j(j+1)$ el operador J_3 –que deja a $\mathcal{E}_{j(j+1)}(\mathbf{J}^2)$ invariante– admite un autovalor entonces los $2j+1$ números $\lambda_n = -j+n$, $n = 0, 1, \cdots, 2j$ son autovalores de J_3 con autofunciones en $\mathcal{E}_{j(j+1)}(\mathbf{J}^2)$; todos estos autovalores tienen la misma multiplicidad y no hay otros autovalores de J_3 restringido a $\mathcal{E}_{j(j+1)}(\mathbf{J}^2)$.**

El momento angular $\widehat{\mathbf{L}}$ en coordenadas esféricas; Laplaciano en coordenadas esféricas; fórmulas utiles.

El operador L_3 y su espectro, $spec(L_3) = \hbar\mathbb{Z}$, con mutiplicidad infinita.

23. 06/06: Segundo parcial

24. 11/06: Descomposición espectral del momento angular $\widehat{\mathbf{L}}$

La restricción de $\widehat{\mathbf{L}}$ a $L^2(S =$ esfera de radio 1 en $\mathbb{R}^3)$. El problema de autovalores – ec. diferencial de las funciones de Legendre asociadas. Relación con los polinomios de Legendre. Armónicos esféricos. Propiedades básicas: (i) $\{Y_\ell^m : \ell \in \mathbb{N}\,,\ m \in \mathbb{M}_\ell\}$ es base ortonormal de $L^2(S)$; (ii) $\widehat{\mathbf{L}}^2 Y_\ell^m = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_\ell^m$ y $\widehat{L}_3 Y_\ell^m = \hbar m Y_\ell^m$;

$$L_\pm Y_\ell^m = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm 1)}\,Y_\ell^{m\pm 1}$$

(iii) $\overline{Y_\ell^m} = (-m) Y_\ell^{-m}$ y propiedad de inversión.
Descomposición de $L^2(S)$:

$$L^2(S) = \bigoplus_{\ell\in\mathbb{N}} \mathcal{E}_\ell$$

en autoespacios $\mathcal{E}_\ell := \{\psi \in L^2(S) : \widehat{\mathbf{L}}^2\psi = \hbar^2\ell(\ell+1)\psi\}$ de $\widehat{\mathbf{L}}^2$;

$$\mathcal{E}_\ell = \{\sum_{m\in\mathbb{M}_\ell} c_{\ell,m} Y_\ell^m \,:\, c_{\ell,m} \in \mathbb{C}\} \cong \mathbb{C}^{2\ell+1}\ .$$

Multiplicidades y $\widehat{\mathbf{L}} \restriction_{\mathcal{E}_\ell}$ es un momento angular irreducible. Forma matricial de los operadores.

Precisiones sobre la ec. de movimiento en la representación de Heisenberg:

$$\boxed{\tfrac{d}{dt}A(t) = \tfrac{i}{\hbar}[H, A(t)] \overset{!}{=} \tfrac{i}{\hbar}([H, A])(t)}\ ;$$

$A(t) := U_t^* A U_t$, $U_t := \exp\{-iHt/\hbar\}$.
Solución del item b) del problema 3 del segundo parcial: ec. de movimiento para el momento angular. Ver la solución en la w-página.