Sinopsi del Tema 1

1. Evidència corpuscular de la llum: partícules indivisibles (fotons) amb energia $h\nu$.

2. Evidència ondulatòria de les partícules: experiment de Davidson-Germer.

3. Hipòtesi de DeBroglie: una partícula lliure de moment lineal p presenta una ona plana associada de longitud d'ona λ de manera que: $p = \frac{h}{\lambda}$.

4. Equació d'ones de Schrödinger: Inducció de l'equació en base a trobar l'equació mecànica $\frac{p^2}{2m} + V - E = 0$:

$$\underbrace{(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)}_{\hat{\mathcal{H}}(x)} - i\hbar\frac{\partial}{\partial t})\underbrace{\int c(p)e^{i(px-Et)/hbar}dp}_{\Psi(x,t)} = 0 \rightarrow i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}(x)\Psi(x,t)$$

5. Estats estacionaris:

$$\left\{\begin{array}{l} \Psi(x,t) = \phi(x)\cdot f(t) \\ E = cte \end{array}\right. \rightarrow \left\{\begin{array}{l} f(t) = e^{-iEt/\hbar} \\ \hat{\mathcal{H}}(x)\phi(x) = E\phi(x) \end{array}\right.$$

6. Operadors: $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, $\hat{x} = x\cdot$
   Qualsevol magnitud física és una funció de p i de x, per tant, qualsevol operador mecanoquàntic és una funció de $\hat{p}$ i d'$\hat{x}$.

7. Normalització de la funció d'ona: Com la probabilitat de trobar una partícula entre x i $x + dx$ és $P(x) = |\Psi(x,t)|^2 dx$ i volem que la probabilitat total siga la unitat, treballarem amb funcion normalitzades a la unitat: $\int_{-\infty}^{\infty}\Psi(x,t)^*\Psi(x,t)dx = 1$.

8. Experiment de Dirac.

   (a) En mesurar una magnitud A, els únics valors que trobarem són els valors propis del seu operador $\hat{A}$ associat.

   (b) El conjunt $\{\phi_n\}$ de funcions pròpies d'un operador $\hat{A}$ és complet, i.e., qualsevol Ψ la podem escriure $\Psi = \sum_n c_n\phi_n$.

   (c) $|c_n|^2$ representa la probabilitat de trobar l'autovalor a_n en mesurar A en un sistema que està en un estat definit per $\Psi = \sum_n c_n\phi_n$

9. Adjunt $\hat{A}^+$ d'un operador $\hat{A}$: és aquell operador que dóna compliment a:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\phi_i^*\hat{A}\phi_j dx = \int_{-\infty}^{\infty}(\hat{A}^+\phi_i)^*\phi_j dx$$

   .

10. Operador hermític: $\hat{A}$ és hermític si $\hat{A}^+ = \hat{A}$.

11. Els autovalors d'un operador hermític són reals i les autofuncions formen un conjunt ortogonal ($\int_{-\infty}^{\infty} \phi_i^* \phi_j dx = \delta_{ij}$). Els operadors mecanoquàntics associats a magnituds físiques són hermítics.

12. Valors expectació (o mitjanes): $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx$ (suponem Ψ normalitzada). Anàlogament, si tenim un estat Ψ i un operador $\hat{Q}$ amb autofuncions $\{\phi_n\}$ i autovalors $\{q_n\}$, de manera que $\Psi = \sum_n c_n \phi_n$, aleshores, com $|c_n|^2$ és la probabilitat de trobar q_n, resulta que $\langle Q \rangle = \sum_n |c_n|^2 q_n$. Ara be,

$$\int \Psi^* \hat{Q} \Psi dx = \sum_{n,m} c_n^* c_m \int \phi_n^* \hat{Q} \phi_m dx = \sum_{n,m} c_n^* c_m q_m \delta_{n,m} = \sum_n |c_n|^2 q_n = \langle Q \rangle$$

13. Commutació d'operadors: $[\hat{P}, \hat{Q}] = \hat{P}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{P}$. Si dos operadors P i Q commuten existeix almenys un conjunt complet $\{\phi_n\}$ de funcions pròpies comunes. Si, a més a més, aquestes funcions donen compliment a les condicions frontera del nostre sistema, aleshores és possible el coneixement *exacte i simultani* de P i Q. Si no commuten, doncs no serà possible.

14. Postulats (excepte espín)

    (a) L'estat d'un sistema ve determinat per $\Psi(x,t)$. Calculem $\Psi(x,t)$ a partir de l'equació de Schrödinger: $i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}(x) \Psi(x,t)$.

    (b) Cada observable A té associat un operador $\hat{A}$, de manera que en qualsevol estat Ψ normalitzat: $\langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dx$

    (c) Les solucions de l'equació d'autovalors $\hat{\mathcal{H}} \phi_n = E_n \phi_n$ formen un conjunt $\{\phi_n\}$ complet, de manera que qualsevol Ψ es pot escriure $\Psi = \sum_n c_n \phi_n$.

    (d) Els operadors $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ i $\hat{x} = x$, de manera que $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.

    (e) Postulat sobre l'espín que tractarem en la lliçò següent.