Introducción: Funciones

- Una función puede definirse como una regla que permite obtener un único número dado un conjunto inicial o **dominio** de existencia de la función $f : A \longrightarrow B, a \longrightarrow f(a)$, donde A es el dominio de la función f, su primer conjunto o conjunto de partida; y B es el **codominio** de f, su segundo conjunto o conjunto de llegada. Por $f(a)$ se denota la regla o algoritmo para obtener la imagen de un cierto objeto arbitrario a del dominio A, es decir, el (único) objeto de B que le corresponde.
- **producto interno** de dos funciones: $(f, g) = < f|g > = \int f^* g d\tau$
- No es **conmutativo**: $< f|g > = \int f^* g d\tau = \left(\int f g^* d\tau\right)^* = < g|f >^*$
- **Norma** N de una función: $< f|f > = N$, por tanto, $\frac{f}{\sqrt{N}}$ será una función **normalizada**.
- Productos internos con constantes, otras dos propiedades interesantes son (donde a es una constante, en general, compleja): $< af|g > = \int a^* f^* g d\tau = a^* \int f^* g d\tau = a^* < f|g >$, $< f|ag > = \int f^* a g d\tau = a \int f^* g d\tau = a < f|g >$
- funciones **ortogonales**: $< f|g > = 0$, hay varios métodos para ortogonalizar funciones, Gram-Schmidt, Householder, Givens, Löwdin,...
- Conjunto **ortonormal** de funciones: $< f_i|f_j > = \delta_{ij}$, donde δ_{ij} es la función delta de Kronecker; $\delta_{ij} = 0$ si $i \neq j$, $\delta_{ij} = 1$ si $i = j$
- **Conjunto completo** de funciones: $\{f_i\}_{i=1,\ldots,n}$, tal que cualquier función de las mismas variables y dominio de existencia puede ser combinación lineal de ellas: $g = \sum_i^n c_i f_i$, los coeficientes c_i se obtienen mediante $< f_i|g > = < f_i|c_1 f_1 + c_2 f_2 + \ldots + c_n f_n > = \sum_j^n c_j < f_i|f_j > = \sum_j^n c_j \delta_{ij} = c_i$

Introducción: Operadores I

- Los **operadores** son unos entes matemáticos que resumen una o varias operaciones que se van a realizar sobre cierta función a la que se aplican, y que, en general, están asociados a variables dinámicas. Ejemplos de operadores son las derivadas: $\widehat{\frac{d}{dx}}$, $\widehat{\frac{\partial}{\partial x}}$, $\widehat{\frac{\partial^2}{\partial x^2}}$
- **Suma** de operadores: $(\widehat{A}+\widehat{B})f = \widehat{A}f + \widehat{B}f$
- **Producto** de operadores: $\widehat{P} = \widehat{A}\cdot\widehat{B}$ tal que $\widehat{P}f = \widehat{A}\cdot\widehat{B}f = \widehat{A}(\widehat{B}f) = \widehat{A}g = h$, este producto, en general, **NO** es conmutativo, por ejemplo: $\widehat{x}\widehat{\frac{d}{dx}}(f) = \widehat{x}f' = xf'$ mientras que: $\widehat{\frac{d}{dx}}\widehat{x}(f) = \widehat{\frac{d}{dx}}(x\cdot f) = f + xf'$
- **Conmutador** de dos operadores se define como: $[\widehat{A},\widehat{B}] = \widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A}$, que será cero si ambos operadores conmutan. Usando el ejemplo anterior tenemos: $[\widehat{x},\widehat{\frac{d}{dx}}]f = \widehat{x}\widehat{\frac{d}{dx}}f - \widehat{\frac{d}{dx}}\widehat{x}f = xf' - (f + xf') = -f$, luego: $[\widehat{x},\widehat{\frac{d}{dx}}] = -1$
- Operador **nulo**: $\widehat{O}\cdot f = 0$
- Operador **unidad**: $\widehat{I}\cdot f = f$
- Operador **inverso**: $\widehat{A}\cdot\widehat{A}^{-1} = \widehat{I}$
- Operador **lineal**:

$$\widehat{A}(f+g) = \widehat{A}f + \widehat{A}g$$
$$\widehat{A}(c\cdot f) = c\cdot\widehat{A}f$$

Introducción: Operadores II

- **Funciones propias y valores propios**: $\widehat{A} \cdot f = a \cdot f$, entonces se dice que f es función propia (o autofunción) del operador $\widehat{A}$ y a es su valor propio (o autovalor). Por ejemplo: supongamos la función $f = \text{sen}kx$, $\widehat{D} = \widehat{\frac{d}{dx}}$ y $\widehat{D}^2 = \widehat{\frac{d^2}{dx^2}}$, entonces:
$$\widehat{D}f = \frac{d}{dx}\text{sen}kx = k\cos kx, \quad \widehat{D}^2 f = \frac{d^2}{dx^2}\text{sen}kx = -k^2\text{sen}kx = -k^2 \cdot f$$
luego, la función senkx es autofunción del operador derivada segunda con autovalor $-k^2$
- Producto **interno**: $< f|\widehat{A}f >= \int f^* \widehat{A} f d\tau$
- Operador **adjunto**: $< f|\widehat{A}^\dagger f >=< f|\widehat{A}f >^*$, una propiedad de estos operadores es: $< f|\widehat{A}^\dagger g >=< \widehat{A}f|g >=< g|\widehat{A}f >^*$, también otras propiedades son:
$$(\widehat{A} + \widehat{B})^\dagger = \widehat{A}^\dagger + \widehat{B}^\dagger \quad \text{y} \quad (\widehat{A} \cdot \widehat{B})^\dagger = \widehat{B}^\dagger \cdot \widehat{A}^\dagger$$
- Operadores **hermíticos** o **autoadjuntos**: $\widehat{A} = \widehat{A}^\dagger$ tienen la importante propiedad de que sus autovalores son **números reales**. Esto es fácilmente demostrable
$$< f|\widehat{A}f >=< f|af >= a < f|f >$$
$$< f|\widehat{A}^\dagger f >=< \widehat{A}f|f >=< af|f >= a^* < f|f >$$
$$< f|\widehat{A}f >=< f|\widehat{A}^\dagger f > \Longrightarrow a = a^* \Longrightarrow a \text{ es un número real}$$
- Algunas **propiedades importantes de los operadores hermíticos** son:
- si $\widehat{A}f_a = af_a$ y $\widehat{A}f_b = bf_b$ entonces las dos funciones f_a y f_b son ortogonales
- sean $\widehat{A}$ y $\widehat{B}$ hermíticos y f_a y f_b son funciones propias de $\widehat{A}$ con valores propios a y b distintos entre si, y si ambos operadores conmutan entonces $< f_a|\widehat{B}f_b >= 0$
- sean $\widehat{A}$ y $\widehat{B}$ hermíticos y su conmutador nulo, entonces ambos tienen un conjunto completo de funciones propias comunes

Postulados I

Postulado I

El estado de un sistema viene descrito por una función de las coordenadas de posición y de espín de las partículas que forman el sistema y del tiempo. Dicha función recibe el nombre de *función de estado* o *función de onda*, y debe cumplir ciertos requisitos: ser uniforme y continua, sus derivadas primeras deben ser continuas (salvo en los posibles puntos en que el potencial se haga infinito), y la función debe ser de cuadrado integrable (esta condición sólo es exigible en sistemas ligados).

Postulado II

A cada observable del sistema se asocia un operador lineal y hermítico definido en el espacio de las funciones aceptables.

Postulado III

La medida de un observable cualquiera en un sistema sólo puede dar como resultado uno de los autovalores a del operador correspondiente a dicho observable $\widehat{\mathcal{A}}$:

$$\widehat{\mathcal{A}}\Psi = a\Psi$$

Postulado IV

Si el sistema se encuentra en un estado definido por una función de onda, Ψ, que no es autofunción de un operador, $\hat{\mathcal{A}}$, asociado a un observable, a, una medida del observable a dará como resultado un autovalor de $\hat{\mathcal{A}}$, pero no se puede predecir cuál de todos los posibles será. No obstante, si se hacen repetidas mediciones de ese observable, la media de los valores obtenidos vendrá dada por:

$$\bar{a} \equiv < \widehat{\mathcal{A}} > = \frac{\int \Psi^* \widehat{\mathcal{A}} \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau} = \frac{< \Psi | \widehat{\mathcal{A}} | \Psi >}{< \Psi | \Psi >}$$

donde las integrales se extienden a todo el espacio de definición de Ψ.

Postulado V

La evolución de un sistema viene dada por la ecuación:

$$\widehat{\mathcal{H}} \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Esta es la llamada ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.

Postulados III

Postulado VI

El operador mecano-cuántico asociado a una magnitud fisica se obtiene expresando la ecuación clásica correspondiente en términos de las variables de posición y momento y sustituyendo estas variables por los correspondientes operadores, de acuerdo a las siguientes reglas:

$$\text{Posición: } x \longrightarrow \widehat{x} \longrightarrow x\cdot$$

$$\text{Momento: } p_x \longrightarrow \widehat{p_x} \longrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

Postulado VII

La función de onda correspondiente a un sistema de fermiones idénticos (espín semientero) debe ser antisimétrica respecto al intercambio de las coordenadas de dos de ellos *(Principio de Exclusión de Pauli)*. Para un sistema de bosones idénticos (espín entero), debe ser simétrica respecto de dicho intercambio.