

TEMA I. QUÍMICA QUÀNTICA

$$\Psi(x,t) = \int f(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$$

Expressió general d'una ona.

$$p = \hbar k \quad E = \hbar \omega$$

$$E = T + V$$

$$\Psi(x,t) = \int f(p) e^{i(px - Et)/\hbar} dp$$

DERIVACIONS
PARCIALS

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}; \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}; \quad V(x)$$

SUBSTIT
FORMAL

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

$\Psi(x)g(t)$ ↓ Estats Estacionaris

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi(x) = E \Psi(x) \leftarrow \text{EQ. VALORS PROPIS}$$

$$g(t) = e^{-iEt/\hbar} \leftarrow \text{COMPLEXA ?}$$

$$\Psi$$

ONA PILOT

$$\Psi(\pm\infty) = 0 \quad \text{estats lligats}$$

$$|\Psi|^2 \propto \text{Intensitat}$$

$$|\Psi|^2 < \infty; \quad \text{PROBABILITAT}; \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx = 1$$

NORMALITZACIÓ

PARTÍCULA CAIXA

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x)$$

CONDICIONS
CONTORN

$$\psi(0) = \psi(L) = 0$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} x$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{8mL^2}$$

QUANTIFICACIÓ

- Sistemes massius (clàssics) $n \uparrow$; $\Delta E/E \rightarrow 0$; equiprobabilitat en la caixa
- Sistemes microscòpics $n \downarrow$; $\Delta E/E$ finit; distribució no clàssica de probabilitat

EXPERIMENT DE DIRAC

- MESURA i POSSIBLE INTERACCIÓ AMB EL SISTEMA (reducció funció d'ona)
- VALORS PROPIS, ESTATS PROPIS
- CONJUNT COMPLET: principi superposició $\psi = \sum c_i \phi_i$; $|c_i|^2$ PROBABILITAT
↓

CAIXA: $\sin kx = \frac{1}{2} (e^{ikx} - e^{-ikx})$



$$|C_{\rightarrow}|^2 = |C_{\leftarrow}|^2$$

$$\Downarrow$$

$$\langle P \rangle = 0$$

VALOR MITJÀ

ORTOGONALITAT: $\int \psi_m \psi_n dx = \delta_{mn}$

BATEKIA DE PROPIETATS MATEMÀTIQUES

• valors mitjans $\langle Q \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{Q} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$

- Operadors hermítics $\begin{cases} \rightarrow \text{VALORS PROPIS REALS} \\ \rightarrow \text{FUNCIONS PROPIES ORTOGONALS} \end{cases}$

$$\begin{cases} \int \Phi^* \hat{Q} \psi dx = \int (Q \Phi)^* \psi dx \\ \langle \Phi | Q | \psi \rangle = \langle \psi | Q | \Phi \rangle^* \end{cases}$$

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij}$$

COMPATIBILITAT i REGLES DE COMMUTACIÓ

