1/6

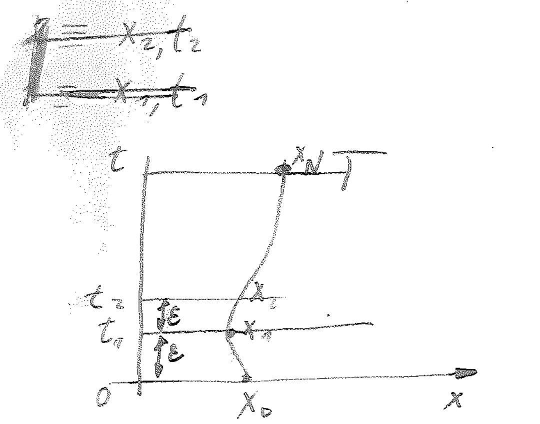
Cálculo de amplitudes de probabilidad

Partícula libre en una dimensión. Calcular la amplitud total probabilidad para $x_1, t_1 \rightarrow x_2, t_2$. $(t_2 > t_1)$

$$L = \frac{m\dot{x}^2}{2}$$

1° método: Directamente

$$K(x_N, T; x_0, 0) = \lim_{\substack{\varepsilon \to 0 \\ N\varepsilon = T}} \iint_{-\infty} \cdots \int e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} S(x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i)} \frac{dx_1}{A} \cdots \frac{dx_{N-1}}{A} \frac{1}{A}$$



Pero $S(x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i) = \frac{m}{2}\int_{t_i}^{t_{i+1}} \dot{x}^2 dt =$

$$\frac{m}{2}\left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon}\right)^2 \varepsilon = \frac{m}{2\varepsilon}(x_{i+1} - x_i)^2$$

Luego

$$K(x_N, T; x_0, 0) = \lim_{\substack{\varepsilon \to 0 \\ N\varepsilon = T}} \iint_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2\varepsilon}\left[(x_1 - x_0)^2 + (x_2 - x_1)^2 + \cdots + (x_N - x_{N-1})^2\right]} \frac{dx_1}{A}\frac{dx_2}{A} \cdots \frac{dx_{N-1}}{A}$$

Llamando $\alpha = \frac{im}{2\hbar\varepsilon}$, las integraciones sucesivas dan (fórmula I de la tabla):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\alpha\left[(x_1 - x_0)^2 + (x_2 - x_1)^2\right]} dx_1 = \sqrt{-\frac{\pi}{\alpha + \alpha}}\, e^{\frac{\alpha}{2}(x_0 - x_2)^2}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\left[\frac{\alpha}{2}(x_2 - x_0)^2 + \alpha(x_3 - x_2)^2\right]} dx_2 = \sqrt{-\frac{\pi}{\alpha + \frac{\alpha}{2}}}\, e^{\frac{\alpha}{3}(x_0 - x_3)^2}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\left[\frac{\alpha}{3}(x_0 - x_3)^2 + \alpha(x_4 - x_3)^2\right]} dx_3 = \sqrt{-\frac{\pi}{\alpha + \frac{\alpha}{3}}}\, e^{\frac{\alpha}{4}(x_0 - x_4)^2}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\left[\frac{\alpha}{4}(x_0 - x_4)^2 + \alpha(x_5 - x_4)^2\right]} dx_4 = \sqrt{-\frac{\pi}{\alpha + \frac{\alpha}{4}}}\, e^{\frac{\alpha}{5}(x_0 - x_5)^2}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\left[\frac{\alpha}{N-1}(x_0 - x_{N-1})^2 + \alpha(x_N - x_{N-1})^2\right]} dx_{N-1} = \sqrt{-\frac{\pi}{\alpha + \frac{\alpha}{N-1}}}\, e^{\frac{\alpha}{N}(x_0 - x_N)^2}$$

El producto de las integrales da, por tanto:

$$K(x_N, T; x_0, 0) = \frac{1}{A^N}\sqrt{-\frac{\pi}{2}}\sqrt{-\frac{\pi}{\alpha + \alpha/2}}\sqrt{\frac{-\pi}{\alpha + \frac{\alpha}{3}}}\sqrt{\frac{-\pi}{\alpha + \frac{\alpha}{4}}} \cdots \sqrt{\frac{-\pi}{\alpha + \frac{\alpha}{N-1}}}\, e^{\frac{\alpha}{N}(x_0 - x_N)^2}$$

$$= \frac{1}{A^N}\sqrt{-\frac{\pi}{\alpha}}^{\,N-1}\sqrt{\frac{1}{2}}\sqrt{\frac{2}{3}}\sqrt{\frac{3}{4}}\cdots\sqrt{\frac{N-1}{N}}\, e^{\frac{\alpha}{N}(x_0-x_N)^2} =$$

$$\frac{1}{A^N}\sqrt{-\frac{\pi}{\alpha}}^{\,N-1}\sqrt{\frac{1}{N}}\, e^{\frac{\alpha}{N}(x_0-x_N)^2} = \left(\frac{1}{A}\sqrt{-\frac{\pi}{\alpha}}\right)^N \sqrt{-\frac{\alpha}{\pi}}\sqrt{\frac{1}{N}}\, e^{\frac{\alpha}{N}(x_0-x_N)^2}$$

con $\alpha = \frac{im}{2\hbar\epsilon}$

$$K = \left(\frac{1}{A}\sqrt{-\frac{2\pi\hbar\epsilon}{im}}\right)^N \sqrt{-\frac{im}{2\pi\hbar\epsilon N}}\; e^{\frac{im}{2\hbar\epsilon N}(x_0-x_N)^2}$$

Tomamos, por conveniencia,

$\boxed{A = \sqrt{-\frac{2\pi\hbar\epsilon}{im}} = \sqrt{\frac{i\hbar\epsilon}{m}}}$ Queda: $\boxed{K = \sqrt{-\frac{im}{2\pi\hbar T}}\; e^{\frac{im}{2\hbar T}(x_0-x_N)^2}}$

La elección hecha para A es para que el límite tenga sentido (cuando $\epsilon \to 0$, $N \to \infty$) y para que valga la expresión $K(3,1) = \int dx_2\, K(2,1)\, K(3,2)$

— x —

2° Método (más conveniente).

$L = \frac{m}{2}\dot{x}^2$

$$K = \int_{\substack{\text{tray. } x_1, t_1 \\ \text{a } x_2, t_2}} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\int_{t_1}^{t_2}\dot{x}^2\, dt}\, \mathcal{D}[x(t)]$$

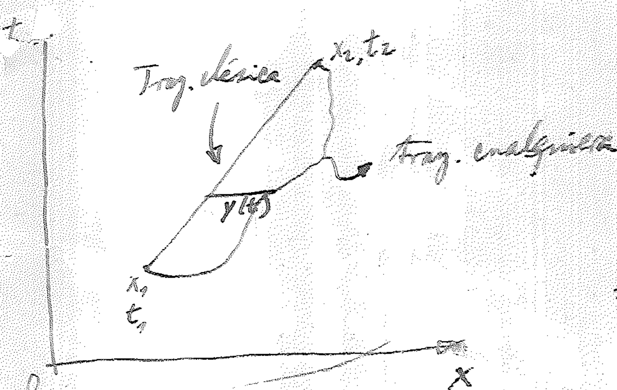
Este símbolo es una manera abreviada de escribir el límite de la pág. anterior, supuesto que él exista

Lo símbolo que indica que la integración es sobre todas las trayectorias.

Hacemos:

$x(t) = \bar{x}(t) + y(t)$ donde $\bar{x}(t)$ es la trayectoria clásica desde x_1, t_1 a x_2, t_2.

$y(t)$ es 0 en t_1 y t_2, pues en esos puntos $x(t)$ coincide con la trayectoria clásica $\bar{x}(t)$.



En nuestro caso del corpúsculo libre tenemos: $\ddot{\bar{x}} = 0$

$\dot{\bar{x}} = \frac{x_2 - x_1}{t_2 - t_1}$; $\bar{x} = x_1 + \frac{x_2 - x_1}{t_2 - t_1}(t - t_1)$

$\dot{x} = \dot{\bar{x}} + \dot{y}$

$$K = \int_{\substack{y=0 \text{ en } t_1 \\ y=0 \text{ en } t_2}} e^{\frac{im}{2\hbar}\int_{t_1}^{t_2}(\dot{\bar{x}}+\dot{y})^2 dt}\, \mathcal{D}[y(t)]$$

$$\int_{t_1}^{t_2}(\dot{\bar{x}}+\dot{y})^2 dt = \int_{t_1}^{t_2}\dot{\bar{x}}^2 dt + \int_{t_1}^{t_2} 2\dot{\bar{x}}\dot{y}\, dt + \int_{t_1}^{t_2}\dot{y}^2 dt$$

Pero $\int_{t_1}^{t_2}\dot{\bar{x}}\dot{y}\, dt = \underbrace{\dot{\bar{x}}\, y\Big|_{t_1}^{t_2}}_{\text{cero porque } y \text{ es 0 en los lím.}} - \underbrace{\int_{t_1}^{t_2}\ddot{\bar{x}}\, y\, dt}_{\text{cero porque } \ddot{\bar{x}}=0 \text{ por ser la tray. clás.}}$

[illegible] ver directamente pues siendo ese término lineal [illegible] él da la primera variación de S a lo largo [illegible] $(\delta S = 0)$.

Efectivamente:

$$S = \frac{m}{2}\int_{t_1}^{t_2} \dot{x}^2\, dt \; ; \; \delta S_{clás} = m\int_{t_1}^{t_2} \dot{x}\, y\, dt = 0$$

$$\dot{x} = \frac{x_2-x_1}{t_2-t_1}, \quad (\dot{x})^2 = \frac{(x_2-x_1)^2}{(t_2-t_1)^2} = cte$$

$$\int_{t_1}^{t_2} (\dot{x})^2 dt = \frac{(x_2-x_1)^2}{(t_2-t_1)^2}(t_2-t_1) = \frac{(x_2-x_1)^2}{(t_2-t_1)}$$

Luego:

$$K = \int_{\substack{\text{todas}\\ \text{tray. } 1\to 2}} e^{\frac{im}{2\hbar}\int_{t_1}^{t_2}(\dot{x})^2 dt}\, e^{\frac{im}{2\hbar}\int_{t_1}^{t_2}\dot{y}^2 dt}\, \mathcal{D}[y(t)] = e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(x_2-x_1)^2}{t_2-t_1}} \int_{\substack{\text{tray.}\\ y=0 \text{ en } t_1\\ y=0 \text{ en } t_2}} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\int_{t_1}^{t_2}\dot{y}^2 dt}\, \mathcal{D}[y(t)]$$

Esta integral es independiente de los puntos extremos x_2 y x_1. Es una integral en $y(t)$ ~~...~~, función que varía de 0 en t_1 a 0 en t_2. Luego ~~...~~ es función sólo de t_1 y t_2. Luego:

$$\boxed{K(2,1) = F(t_1,t_2)\, e^{\frac{im}{2\hbar}\frac{(x_2-x_1)^2}{t_2-t_1}}} \quad \text{ó} \quad \boxed{K(2,1) = F(t_1,t_2)\, e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}}}$$

Esta función $F(t_1,t_2)$ tiene que depender sólo del intervalo de tiempo $T = t_2-t_1$, y no de los tiempos absolutos t_1 ó t_2. Luego $F = d(t_2-t_1)$.

Veamos cómo determinar esa función d.

Por el principio de combinación de amplitudes:

$$K(2,1) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(2,3)\, K(3,1)\, dx_3 \; ;$$

$$d(t_2-t_1)\, e^{\frac{im}{2\hbar}\frac{(x_2-x_1)^2}{t_2-t_1}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_3\, d(t_3-t_1)\, d(t_2-t_3)\, e^{\frac{im}{2\hbar}\frac{(x_3-x_1)^2}{t_3-t_1}}\, e^{\frac{im}{2\hbar}\frac{(x_2-x_3)^2}{t_2-t_3}} =$$

$$d(t_3-t_1)\, d(t_2-t_3)\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\alpha_1(x_3-x_1)^2+\alpha_2(x_2-x_3)^2}\, dx_3 =$$

$$d(t_3-t_1)\, d(t_2-t_3)\sqrt{\frac{-\pi}{\alpha_1+\alpha_2}}\; e^{\frac{\alpha_1\alpha_2}{\alpha_1+\alpha_2}(x_2-x_1)^2} \quad (\text{por } I,2) \quad \text{siendo} \begin{cases} \alpha_1 = \dfrac{im}{2\hbar(t_3-t_1)} \\ \alpha_2 = \dfrac{im}{2\hbar(t_2-t_3)} \end{cases}$$

$$= d(t_3-t_1)\, d(t_2-t_3)\, e^{\frac{im}{2\hbar}\frac{(x_2-x_1)^2}{t_2-t_1}}\sqrt{\frac{2\pi i\hbar}{m}\frac{1}{\frac{1}{t_3-t_1}+\frac{1}{t_2-t_3}}}$$

Luego:

$$d(t_2-t_1) = d(t_3-t_1)\, d(t_2-t_3)\sqrt{\frac{2\pi i\hbar}{m}\frac{(t_2-t_3)(t_3-t_1)}{(t_2-t_1)}}$$

Hagamos la sustitución:

$$d(t_2-t_1) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar}}\frac{1}{\sqrt{t_2-t_1}}\, C(t_2-t_1)$$

$$d(t_3-t_1) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar}}\frac{1}{\sqrt{t_3-t_1}}\, C(t_3-t_1)$$

$$d(t_2-t_3) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar}}\frac{1}{\sqrt{t_2-t_3}}\, C(t_2-t_3)$$

Obtenemos sustituyendo:

$$c(t_2-t_1)=c(t_3-t_1)c(t_2-t_3) \text{ ó } c\left[(t_2-t_3)+(t_3-t_1)\right]=c(t_2-t_3)c(t_3-t_1)$$

La única función que satisface eso ($d(a+b)=d(a)\cdot d(b)$) es la exponencial. Luego:

$$c(t_2-t_1)=e^{k(t_2-t_1)}\ ;\quad c(T)=e^{kT}\ ;\ k \text{ es cualquiera.}$$

Escojamos $k=0$ (es la elección más simple). Queda:

$$c=1\ ;\quad \boxed{d(T)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}}} \qquad \boxed{K=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}}\, e^{\frac{im}{2\hbar}\frac{(x_2-x_1)^2}{T}}}$$

concordante con el obtenido por el primer método.
Puede verse que $Re(k)$ puede ser escogida igual a 0 y la parte imaginaria sería el nivel 0 de energía. Elegiremos entonces $k=0$ cosa que no quita generalidad.

Problemas

) Si $L=\frac{m}{2}(\dot{x}^2-\omega^2x^2)$ mostrar que usando el mismo método anterior (siendo $\ddot{x}=-\omega^2x$) que $K(x_2,t_2;x_1,t_1)=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar i \operatorname{sen}\omega T}}\, e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}(x_2t_2,x_1t_1)}$

— x —

) Si L es una forma cuadrática de las coordenadas y velocidades conteniendo también términos lineales, o sea

$$L=\alpha(t)\dot{x}^2+\beta(t)\dot{x}x+\gamma(t)x^2+A(t)\dot{x}+B(t)x+C(t),$$ mostrar que $K=F(t_2,t_1)\,e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}}$

— x —

) Mostrar, en el caso de una partícula libre en 3 dimensiones que $$K(\vec{r}_2,t_2;\vec{r}_1,t_1)=\left(\frac{2\pi i\hbar(t_2-t_1)}{m}\right)^{-3/2} e^{\frac{im}{2\hbar}\frac{(\vec{r}_2-\vec{r}_1)^2}{t_2-t_1}}$$

— x —

Nota: Este método para determinación de amplitudes de probabilidad, esto es, obtención de una expresión de la forma

$$K(2,1)=F(t_2-t_1)\,e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}(2,1)}$$ y posterior determinación de la función $F(T)$ usando el principio de combinación de amplitudes es aplicable siempre que la Lagrangiana tenga una forma cuadrática, como fué mostrado. Es, por lo tanto, aplicable en los siguientes caso:

1. Partícula en un campo de fuerza constante en el espacio y en el tiempo.

$$L = \frac{1}{2} m(\dot{\vec{x}})^2 - \vec{F}.\vec{x}$$

2. Oscilador harmónico sujeto a una fuerza constante en el espacio.

$$L = \frac{m}{2}(\dot{\vec{x}}^2 - w^2 \vec{x}^2) - \vec{F}(t).\vec{x}$$

3. Partícula cargada colocada en un campo magnético constante:

$$L = \frac{m}{2}\dot{\vec{x}}^2 + \frac{e}{2c}\dot{\vec{x}}.(\vec{h} \times \vec{x})$$

4. Partícula en un campo de fuerza constante en el espacio, pero variable en el tiempo.

$$L = \frac{1}{2} m(\dot{\vec{x}})^2 - \vec{F}(t).\vec{x}$$

Aproximación semi-clásica.

Para valores de la acción S muy grandes con respecto a $\hbar$, sólo desvíos muy pequeños con respecto a la trayectoria clásica tienen importancia, pues fuera de esa región la fase varía muy rápidamente y la interferencia destruye las posibilidades de realizarse la trayectoria. Haciendo la sustitución $x = \bar{x} + y$:

$$S[x(t)] = S[\bar{x}+y] = \int_{t_1}^{t_2} L(\bar{x}+y, \dot{\bar{x}}+\dot{y}, t)\,dt =$$

$$\int_{t_1}^{t_2} L(\bar{x}, \dot{\bar{x}}, t)\,dt + \int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{\partial L}{\partial \bar{x}} y + \frac{\partial L}{\partial \dot{\bar{x}}}\dot{y}\right)dt + \frac{1}{2!}\int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \bar{x}^2} y^2 + 2\frac{\partial^2 L}{\partial \bar{x}\partial \dot{\bar{x}}} y\dot{y} + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{\bar{x}}^2}\dot{y}^2\right)dt + \dots$$

El término de primer grado en y es 0 por ser S_{cl} un valor extremal. En efecto, por integración por partes, puede verse que el integrando contiene como factor el primer miembro de las ecuaciones de Lagrange $\left(\frac{\partial L}{\partial \bar{x}} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{\bar{x}}} = 0\right)$ y por tanto es 0. El término de orden 0 es S_{cl}.

Llamemos $O(y^2)$ al término de segundo grado.

La amplitud de probabilidad queda:

$$K(2,1) = \int_{\substack{\text{todas} \\ \text{tray } 1\to 2}} e^{\frac{i}{\hbar}S}\,\mathcal{D}[x(t)] = \int_{\substack{y=0 \\ \text{en } t_1 \text{ y en } t_2}} e^{\frac{i}{\hbar}[S_{cl} + O(y^2) + \dots]}\,\mathcal{D}[y(t)]$$

En una aproximación semiclásica podemos suponer que los términos cuyo grado en y e $\dot{y}$ es superior al segundo son despreciables.

Queda:

$$K(2,1) = e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}} \int_{\substack{y=0 \\ \text{en } t_1, t_2}} e^{\frac{i}{\hbar}O(y^2)}\,\mathcal{D}[y(t)]$$

; En general esta integral será una función de $\bar{x}(t)$, como se puede ver mirando el significado de $O(y^2)$. Desde nuestro punto de vista $\bar{x}(t)$ es en último caso una función de 1 y 2, es decir de x_1, x_2, t_1 y t_2. Luego: $K(2,1) = F(x_1, x_2, t_1, t_2)\, e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}}$ En la aproximación semiclásica en que y es muy pequeño el término $O(y^2)$ es tb. muy pequeño y $F(x_1, x_2, t_1, t_2)$ es una función smooth (muy suave).

o mejor

Problema. Son emitidas partículas libres desde un punto con impulsos diversos, con distribución uniforme (la probabilidad de que una partícula tenga impulso entre p y $p+dp$ es dp — probabilidad proporcional al intervalo, constante de proporción igual a 1).
En un tiempo T cualquiera habrá una distribución de partículas en el espacio con densidad ρ. Mostrar que la amplitud de probabilidad $K(x,T)$ es de la forma:

$$K(x,T) = \rho^{n/2}\,(2\pi i\hbar)^{-n/2}\,e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}}$$ siendo n el número de grados de libertad de la partícula.

Habíamos obtenido: $K(x,T) = \sqrt{\dfrac{m}{2\pi i\hbar T}}^{\,n}\, e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}}$

Las partículas que al fin de un tiempo T están entre x y $x+dx$ son aquéllas que tienen velocidad entre $\frac{x}{T}$ y $\frac{x+dx}{T}$, luego impulsos entre $\frac{mx}{T}$ y $\frac{m}{T}(x+dx)$; su número es entonces:
$dp_x = \dfrac{m\,dx}{T}$. Al fin de un tiempo T tenemos entre $x, y, z, \dots$ y $x+dx,\ y+dy,\ z+dz, \dots$ un número de partículas dado por $dp_x\,dp_y\,dp_z \dots = \left(\frac{m}{T}\right)^n dx\,dy\,dz \dots = \left(\frac{m}{T}\right)^n dv$
El número por unidad de volumen es entonces:

$$\rho = \frac{dp_x\,dp_y\,dp_z \dots}{dv} = \left(\frac{m}{T}\right)^n$$

Luego $K = \left(\frac{m}{T}\right)^{n/2} (2\pi i\hbar)^{-n/2} e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}} = \boxed{\rho^{n/2}(2\pi i\hbar)^{-n/2} e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}} = K}$

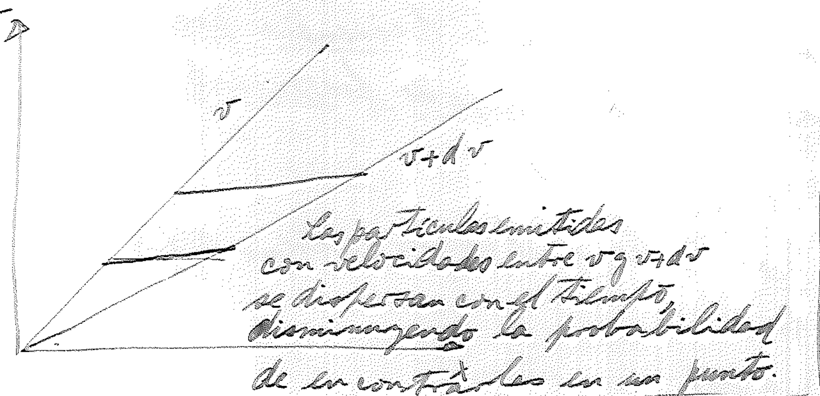
Discusión del valor de la amplitud total de probabilidad para un corpúsculo libre en una dimensión.

$$K(x,T;0,0) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{1/2} e^{\frac{im}{2\hbar}\frac{x^2}{T}}$$

(depende sólo del intervalo de tiempo y de la distancia entre la posición final y la original). La probabilidad para que una partícula estando en el punto $x=0$ para $t=0$, sea encontrada en el punto x para el tiempo T es:

$$P = |\text{amp.}|^2 = \frac{m}{2\pi\hbar T}$$

La probabilidad es independiente de la posición del punto x; depende sólo del tiempo, ~~c~~ variando como $1/T$.



Al tiempo $T=0$ (instante en que la partícula es abandonada en el origen) ~~sabemos~~ con precisión que la partícula está en el origen. A un instante T muy pequeño, la probabilidad de que la partícula se encuentra en un punto cualquiera x, es independiente de x. Ello quiere decir que la partícula puede tener cualquier velocidad, al instante $T=0$, lo que está de acuerdo con el principio de indeterminación de Heisenberg.

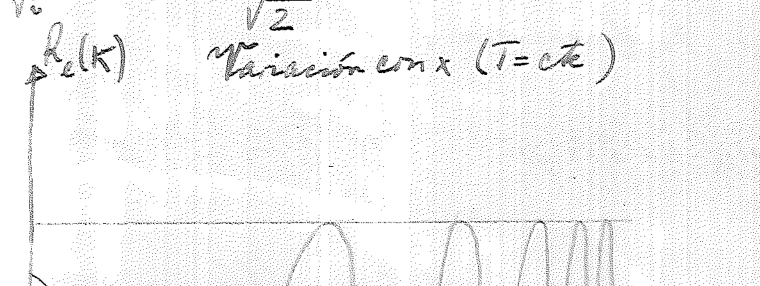
~~Principio de indeterm~~ Tomemos, por ejemplo, la parte real de

$$K = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{1/2} e^{\frac{im}{2\hbar T}x^2}$$

y veamos cómo varía con x y con T.

$$\text{Real}(K) = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{m}{2\hbar T}}\left[\cos\frac{mx^2}{2\hbar T} + \operatorname{sen}\frac{mx^2}{2\hbar T}\right] = \sqrt{\frac{m}{2\hbar T}}\cos\left[\frac{mx^2}{2\hbar T} + \frac{\pi}{4}\right]$$

$$\frac{1}{\sqrt{i}} = \sqrt{-i} = \frac{1-i}{\sqrt{2}}$$



Siendo λ la longitud de onda:

$$\frac{m}{2\hbar T}(x+\lambda)^2 = \frac{m}{2\hbar T}x^2 + 2\pi$$

$$\frac{mx\lambda}{\hbar T} + \underbrace{\frac{m\lambda^2}{2\hbar T}}_{\text{despreciable}} = 2\pi \quad \therefore$$

$$\frac{\lambda}{2\pi} = \frac{\hbar}{\frac{mx}{T}} ;$$

$\frac{x}{T}$ = veloc. clásica del corpúsculo libre.

$\frac{mx}{T} = P_{cl}$; $\boxed{\frac{\lambda}{2\pi} = \lambda\!\!\!^{-} = \frac{\hbar}{P_{cl}}}$ Fórmula de de Broglie.

Variación con T : (x = cte).

Siendo τ el período:

$$-\frac{mx^2}{2\hbar(T+\tau)} + \frac{mx^2}{2\hbar T} = 2\pi \quad \therefore$$

$$\tau\underbrace{\left(1 - \frac{2\hbar 2\pi T}{mx^2}\right)}_{\text{despreciable}} = \frac{2\hbar 2\pi T^2}{mx^2}$$

$$\tau = \frac{2\pi\hbar}{\frac{1}{2} m \frac{x^2}{T^2}} = \frac{2\pi\hbar}{\frac{1}{2} m v_{cl}^2} = \frac{2\pi\hbar}{E_c}$$

E_c = energía cinética = energía total del corpúsculo libre.

$\tau = \frac{2\pi}{\omega}$; $\frac{1}{\omega} = \frac{\hbar}{E}$ $\therefore$ $\boxed{E = \hbar\omega}$

$\omega = \frac{mx^2}{2\hbar}\frac{1}{T^2}$: la frecuencia disminuye al aumentar T.

Cálculo de la longitud de onda y de la frecuencia para un ~~los~~ caso clásico (S muy grande) general. (Campo de fuerzas arbitrario)

Tenemos: $K = F(t_2 - t_1)\, e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}}$ Porq. si en un ... general $F(t_2 - t_1) = 1$

El factor de fase es $\frac{S_{cl}}{\hbar}$. Sea x_2 el punto extremo de la trayectoria.

$$\frac{S_{cl}(x_2 + \lambda)}{\hbar} = \frac{S_{cl}(x_2)}{\hbar} + 2\pi$$

Suponiendo que S varíe lentamente (lo que es verdad en las proximidades de la trayectoria clásica): $S_{cl} \gg \frac{\partial S_{cl}}{\partial x_2}\lambda$. Debido a la lenta variabilidad de $S_{cl}(x_2)$ despreciaremos los términos que contienen derivadas segundas y superiores.

$$\cancel{\frac{S_{cl}(x_2)}{\hbar}} + \frac{\frac{\partial S_{cl}}{\partial x_2}\lambda}{\hbar} = \cancel{\frac{S_{cl}(x_2)}{\hbar}} + 2\pi \quad ; \text{ como } \frac{\partial S}{\partial x_2} = p_{x_2} = p:$$

$$\frac{p\lambda}{\hbar} = 2\pi \quad \therefore \quad \boxed{\bar{\lambda} = \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{\hbar}{p}} \qquad \boxed{\lambda = \frac{h}{p}}$$

Para $S_{cl} \gg \frac{\partial S}{\partial t}\frac{1}{f}$ f = frecuencia:

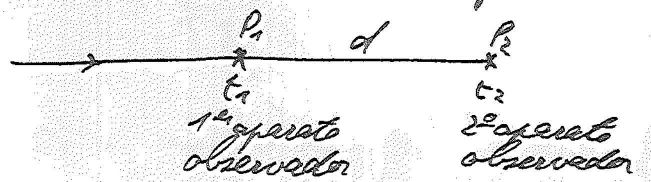
$$\cancel{\frac{S_{cl}}{\hbar}} + \frac{\frac{\partial S_{cl}}{\partial t}\frac{1}{f}}{\hbar} = \cancel{\frac{S_{cl}}{\hbar}} - 2\pi \; ; \qquad -\frac{E_{cl}\frac{1}{f}}{\hbar} = -2\pi \text{ pues } \frac{\partial S_{cl}}{\partial t} = -E_{cl}$$

$$\therefore \boxed{E_{cl} = \hbar\omega}$$

Decimos entonces que en cualquier sistema en que la Física Clásica debe valer debemos tener $E = \hbar\omega$ y $p = \hbar/\bar{\lambda}$. Estas fórmulas sirven para definir energía e impulso en Mec. Cuántica en ciertos casos en que no hay analogía con la Física Clásica. Esto no es general, pues en los casos en que la amplitud de probabilidad varía como , por ejemplo, no es posible definir la longitud de onda o la frecuencia (y por lo tanto el impulso y energía). Hay otra definición, más general, que incluye ésa.

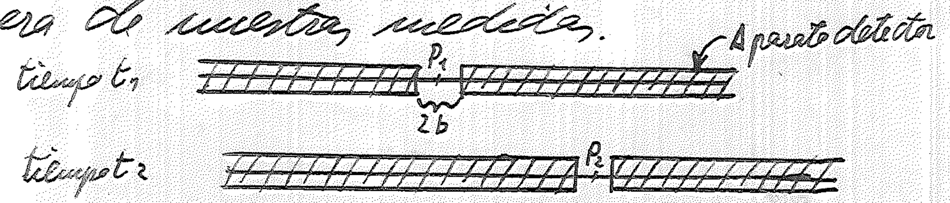
Medida del momento y energía de una partícula libre.

Hemos ya considerado ~~hasta ahora~~ la amplitud de probabilidad $K(x,t)$ para una partícula abandonada en un dado instante en un punto definido del espacio (a una dimensión), y vimos que su momento era completamente desconocido. Veremos ahora qué es posible decir sobre una partícula cuya posición, en un dado instante, es conocida con cierta indeterminación (o sea sábese que se halla en una pequeña región). En mecánica clásica, para medir el momento de un cuerpo libre, medimos el tiempo empleado por el cuerpo para ir de un punto P_1 a otro P_2 situado a una distancia conocida del primero (tiempo de vuelo)



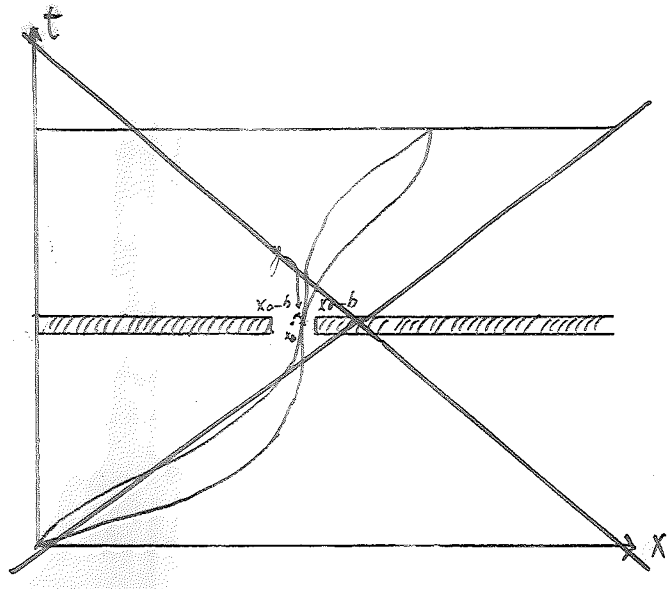
$$v = \frac{d}{t_2 - t_1}$$

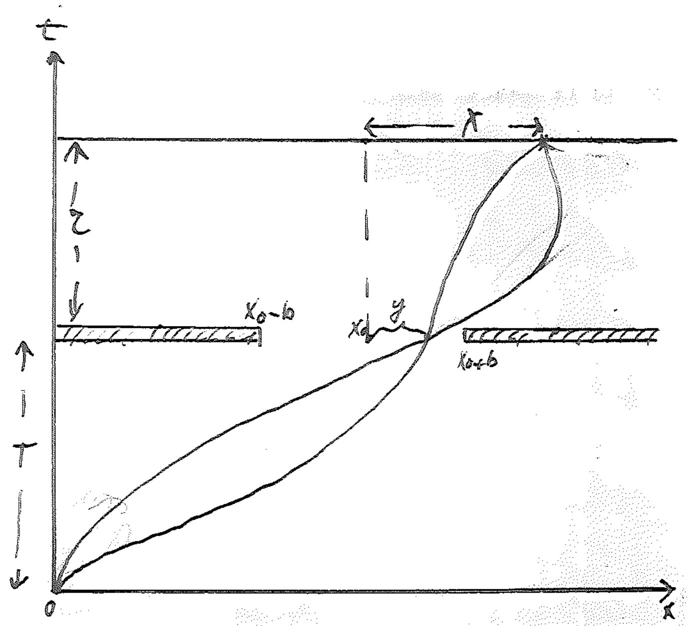
En la M. Q. la observación de una partícula perturba su movimiento. Haremos entonces lo siguiente: en un tiempo t_1 (de hecho en un intervalo de tiempo arbitrariamente pequeño) se colocan detectores a lo largo de todo el espacio (1 dimensión) excepto en una pequeña región en torno de P_1; si los detectores no acusaran presencia de partícula ella estaría en las proximidades de P_1. Lo mismo haremos en el tiempo t_2 para P_2. Si la partícula fuera detectada en cualquiera de las 2 observaciones, quedará fuera de nuestras medidas.



Todas las partículas que en el tiempo t_1 estuvieran en la faja de largura 2b alrededor de P_1, podrán llegar a P_2 ~~en~~ al tiempo t_2 siguiendo cualquier trayectoria de la M. Q. Calcularemos la amplitud de probabilidad total.

Partículas son emitidas en el instante $t=0$ de un punto $x=0$. En el tiempo T ellas pueden pasar



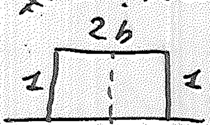


por una faja x_0-b, x_0+b. Por el principio de combinación de amplitudes totales, tendremos para una partícula que partiendo de $x=0$ para $t=0$, llega a x_0+X en $T+\tau$

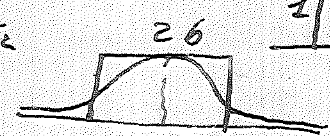
$$K(X,\tau)=\int_{-b}^{b} dy \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}}\, e^{\frac{im}{2\hbar\tau}(X-y)^2}\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}}\, e^{\frac{im}{2\hbar T}(x_0+y)^2}$$

(Notar que si integráramos de $-\infty$ a $+\infty$ obtendríamos el K de una part. libre que va de 0,0 a x_0+X, $T+\tau$)

El cálculo de la anterior expresión es matemáticamente muy complicado; por ello haremos un cambio: cambiaremos la función de peso 1 entre $-b$ y $+b$



por una función de Gauss $e^{-\frac{y^2}{4b^2}}$



e integraremos de $-\infty$ a $+\infty$ obteniendo

$$K=\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{y^2}{4b^2}}\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}}\, e^{\frac{im}{2\hbar\tau}(X-y)^2}\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}}\, e^{\frac{im}{2\hbar T}(x_0+y)^2}\, dy =$$

$$=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}}\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}}\exp\left[\frac{imX^2}{2\hbar\tau}+\frac{imx_0^2}{2\hbar T}\right]\cdot\int^{+\infty}\exp\left[\left(\frac{im}{2\hbar\tau}+\frac{im}{2\hbar T}-\frac{1}{4b^2}\right)y^2+\left(\frac{imx_0}{\hbar T}-\frac{imX}{\hbar\tau}\right)y\right]dy$$

por la integral I-1 de la tabla:

$$K=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}}\cdot\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}}\cdot\exp\left[\frac{imX^2}{2\hbar\tau}+\frac{imx_0^2}{2\hbar T}\right]\cdot\exp\left[-\frac{\left(\frac{im}{\hbar T}x_0-\frac{im}{\hbar\tau}X\right)^2}{4\left(\frac{im}{2\hbar\tau}+\frac{im}{2\hbar T}-\frac{1}{4b^2}\right)}\right]*$$

$$*\sqrt{\frac{\pi}{\frac{1}{4b^2}-\frac{im}{2\hbar}\left(\frac{1}{\tau}+\frac{1}{T}\right)}}\qquad\therefore$$

$$\cancel{K=\frac{m/2\pi i\hbar}{\hbar\tau}}$$

$$K = \sqrt{\frac{m/2\pi i\hbar}{T+\tau-\frac{2T\tau\hbar}{4b^2 im}}} \cdot e^{\frac{imx^2}{2\hbar\tau}}\, e^{\frac{imv_0^2T}{2\hbar}} \exp\left[\frac{\frac{m^2}{\hbar^2\tau^2}\,(x-v_0\tau)^2}{4\left(\frac{m}{2\hbar}\right)\left(\frac{1}{T}+\frac{1}{\tau}\right)i-\frac{1}{b^2}}\right]$$

donde $v_0 = \frac{x_0}{T}$ (velocidad clásica).

La probabilidad para que la partícula llegue a x es:

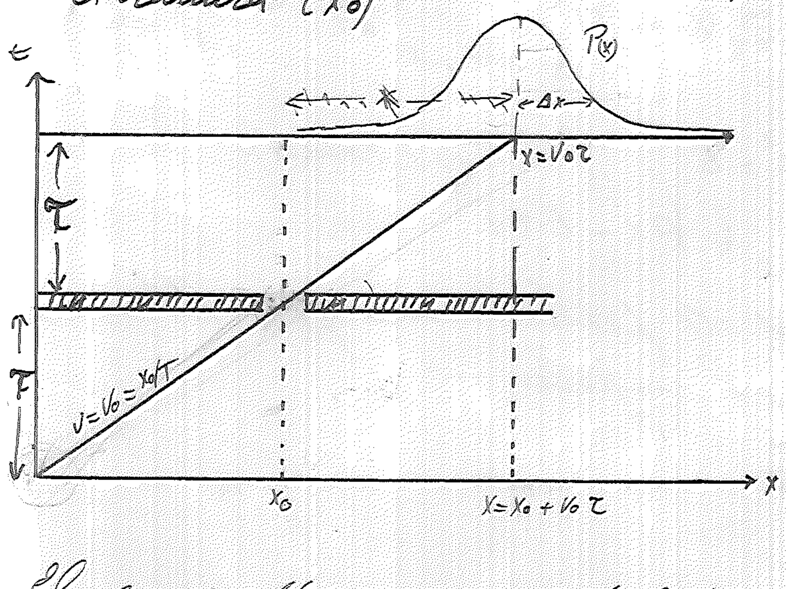
$$P = |K(x)|^2 = \frac{m}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{1}{(T+\tau)^2+\left(\frac{2T\tau\hbar}{4b^2m}\right)^2}} \cdot \exp\left\{\frac{\frac{m^2}{\hbar^2\tau^2}(x-v_0\tau)^2\left(-\frac{2}{b^2}\right)}{\left(\frac{1}{b^2}\right)^2+\left[4\frac{m}{2\hbar}\left(\frac{1}{T}+\frac{1}{\tau}\right)\right]^2}\right\}$$

y llamando $$(\Delta x)^2 = b^2\left(1+\frac{\tau}{T}\right)^2+\frac{\hbar^2\tau^2}{4b^2m^2}$$

podemos escribir

$$P = \frac{m}{2\hbar\pi T}\sqrt{2\pi}\cdot b\cdot\frac{1}{\sqrt{2\pi(\Delta x)^2}}\, e^{-\frac{(x-v_0\tau)^2}{2(\Delta x)^2}}$$

La probabilidad que la partícula llegue a x es del tipo gaussiano y tiene su máximo en $x = v_0\tau$ que corresponde a la trayectoria clásica ~~y~~ que pasa por el centro de la ranura (x_0)



El ancho de la curva de Gauss, puede ser caracterizado por el valor de Δx.
$(\Delta x)^2$ es la suma de dos términos; el primero crece con $\frac{\tau}{T}$ hecho esperado clásicamente* (es lógico que el error aumente al alejar la pantalla).

El segundo término es característico de la mec. cuántica.

$$(\Delta x)_{cuant.} = \frac{\hbar\tau}{2bm}$$

A una variación Δx en la posición de la partícula que llegó

* Geométricamente puede verse que $\Delta x = b\left(1+\frac{\tau}{T}\right)$ será ~~el~~ exactamente el error esperado clásicamente.

a la pantalla proveniente de la ranura, corresponde una variación en la velocidad $\Delta v = \frac{\Delta x}{\tau}$

y una variación $\Delta p = m\,\Delta v = m\frac{\Delta x}{\tau}$ en el momento.

Luego $(\Delta p)_{\text{cuant.}} = \frac{m (\Delta x)_{\text{cuant}}}{\tau} = \frac{\hbar}{2b}$ (indep. de τ)

Vemos entonces que una incertidumbre $\delta_x = \hbar b$ en la determinación de la posición del corpúsculo produce una indeterminación en la medida del momento que es inversamente proporcional a δ_x :

$$\delta p\, \delta x = \text{cte.}$$

siendo la constante de la magnitud de $\hbar$

Problema: Mostrar que la probabilidad para que la partícula llegue a la pantalla es independiente de τ.

La incertidumbre en la determinación del momento de una partícula (que depende del ancho de la ranura como $\frac{1}{b}$) depende todavía del valor de T: el momento será conocido con mayor precisión cuanto mayor fuera el valor de T ya que entonces disminuye el valor del ~~(Δx)~~ primer término de $(\Delta x)^2$ y con ello disminuye $(\Delta p)^2 = \left(\frac{m\Delta x}{\tau}\right)^2$.

Tendremos luego un momento bien determinado cuando $T \to \infty$ (fuente en el infinito) y b grande.

Cuando T es muy grande

$$K \to \text{cte.}\, e^{\frac{imx^2}{2\hbar\tau}}\, e^{\frac{\frac{m^2}{\hbar^2\tau^2}(x - v_0\tau)^2}{\frac{2m}{\hbar\tau}i - 1/b^2}}$$ → [illegible]

const respecto a x y τ

y si también b es muy grande

$$K \to \text{cte}\; e^{\frac{imx^2}{2\hbar\tau}}\, e^{-\frac{im}{2\hbar\tau}(x - v_0\tau)^2} = \text{cte.}\, e^{\frac{im}{\hbar\tau}x v_0 \tau} \cdot e^{-\frac{im}{2\hbar\tau}v_0^2\tau^2}$$

Con $m v_0 = p$, $\frac{m v_0^2}{2} = E$ (Valores clásicos)

$$K = C\, e^{\frac{i}{\hbar}(px - E\tau)}$$

valor de la amplitud de probabilidad para el caso en que se conoce bien el impulso.

Fin

 Función de Onda

Definición: $\psi(x,t)$ es la amplitud total para que una partícula llegue a x al tiempo t cualquiera sea el origen de las partículas. ~~Vale decir que debido que~~ ~~$K(x_i,t_i,x,t)$ para todas las fuentes de partículas.~~

~~Dado ψ al tiempo t_1 para todo x, podemos calcular $\psi(x_2,t_2)$ para cualquier tiempo posterior ($t_2 > t_1$)~~

En el caso en que la partícula estuviera exactamente en x_0 al instante t_0 $\quad \psi(x_2 t_2) = K(x_2 t_2, x_0, t_0)$

Consideraremos ahora el caso en que conocemos $\psi(x_1,t_1)$ para todo x_1 función que llamaremos $f(x_1)$; $\psi(x_1,t_1) = K(x_1,t_1,x_0,t_0)$

$$\psi(x_2,t_2) = \int K(x_2,t_2,x_1,t_1)\, K(x_1,t_1,x_0,t_0)\, dx_1 =$$

$$= \int K(x_2,t_2,x_1,t_1)\, f(x_1)\, dx_1$$ o de una manera más concisa: $\psi(2) = \int K(2\,1)\, \psi(1)\, dx_1$ (Ecuación de Schroedinger)

Observemos que para conocer lo que sucede después de t_1, basta conocer $f(x_1)$ y no interesa cual es la naturaleza de nuestro sistema para $t < t_1$. Todo lo que pasará después de t_1 dependerá del pasado solamente por intermedio de $f(x_1)$.

Delta de Dirac

Se define como $\int \delta(x) f(x)\, dx = f(0)$

Tenemos $\int \delta(x-a)\, f(x)\, dx = f(a)$

Se define $\int \delta'(x-a)\, g(x)\, dx = -g'(a)$

Tenemos todavía $\int \delta(x-a)\, \delta(x-b)\, dx = \delta(a-b)$

$$x\,\delta'(x) = -\delta(x)$$

$\delta(x^2)$ no tiene sentido ya que no podemos dar una definición única.

Si tenemos una función f con una dada discontinuidad dada a en el punto b

$$f'(b) = a\,\delta(x-b)$$ Ver

$\delta(ax) = \frac{1}{a}\delta(x)$; $\delta(F(x)) = \sum_i \frac{1}{|F'(x_i)|}\delta(x-x_i)$

donde x_i son los ceros de $F(x)$: $F(x_i) = 0$

$$\delta(k^2 - t^2) = \frac{1}{2k}\left(\delta(k-t) + \delta(k+t)\right)$$

Definición $K(2,1) = 0$ para $t_2 < t_1$

$K_0(2,1)$ satisfará la ecuación

$$\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{x_2}^2\right)K_0(2,1) = i\hbar\,\delta(t_2-t_1)\,\delta(x_2-x_1)\,\delta(y_2-y_1)\,\delta(z_2-z_1)$$

1/VII

Partícula en campo potencial general

En el caso en que la partícula está sometida a fuerzas que derivan de un potencial $L = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x,t)$ (Una dimensión)

El problema de hallar K_V (o sea sumar $e^{\frac{i}{\hbar}S}$ sobre todas las trayectorias) es en general difícil; en algunos casos (por ej. V cuadrática) el problema es fácilmente resoluble.

$$K_V(x_2,t_2;x_1,t_1) = \int\!\!-\!\!\int e^{\frac{i}{\hbar}\int\left[\frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x(t),t)\right]dt}\,\mathcal{D}x(t)$$

donde $x(t_2)=x_2$; $x(t_1)=x_1$

Comenzaremos suponiendo que la influencia de V es pequeña y desarrollaremos $K_V(2,1)$

~~de tal modo~~

$$K_V(2,1) = \int\!\!-\!\!\int e^{\frac{i}{\hbar}\int\frac{m\dot{x}^2}{2}dt}\left[1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_1}^{t_2} V(x(s),s)\,ds + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_1}^{t_2} V\,ds\right)^2 + \cdots\right]\mathcal{D}x$$

o sea $K_V(2,1) = K_0(2,1) + K^{(1)}(2,1) + K^{(2)}(2,1) + \cdots$

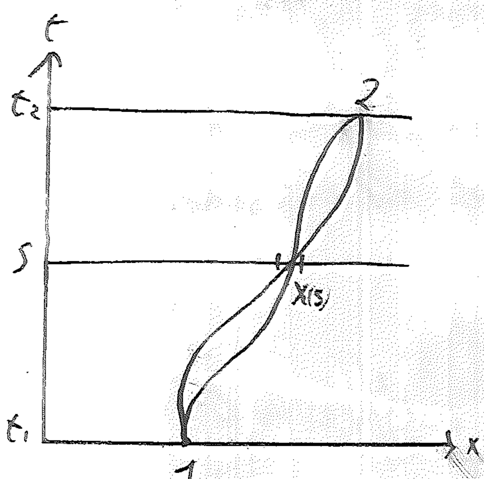
donde $K^{(\nu)}(2,1) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{\nu}\frac{1}{\nu!}\int\!\!-\!\!-\!\!\int e^{\frac{i}{\hbar}\int\frac{m\dot{x}^2}{2}dt}\left(\int V(x(s),s)\,ds\right)^{\nu}\mathcal{D}x$

de tal modo si V es proporcional a una constante α, $K^{(\nu)}$ será proporcional a α^{ν}

Podremos escribir

$$K^{(1)}(2,1) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_1}^{t_2} ds\,[\quad]$$ donde

$$[\quad] = \underbrace{\int\!\!-\!\!\int}_{\text{todas tray. de 1 a 2}} e^{\frac{i}{\hbar}\int\frac{m\dot{x}^2}{2}dt}\, V(x(s),s)\,\mathcal{D}x = \int dx_s\, V(x(s),s) \underbrace{\int\!\!-\!\!\int}_{\text{todas tray. que van de 1 a 2 pasando por } x_s} e^{\frac{i}{\hbar}\int\frac{m\dot{x}^2}{2}dt}\,\mathcal{D}x =$$



$$= \int dx_s\, V(x(s),s)\underbrace{\int\!\!-\!\!\int}_{\text{todas tray. de 1 a } x(s)} e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_1}^{s}\frac{m\dot{x}^2}{2}dt}\,\mathcal{D}x \cdot \underbrace{\int\!\!\int}_{\text{todas tray. de } x(s) \text{ a } 2} e^{\frac{i}{\hbar}\int_{s}^{2}\frac{m\dot{x}^2}{2}dt}\,\mathcal{D}x =$$

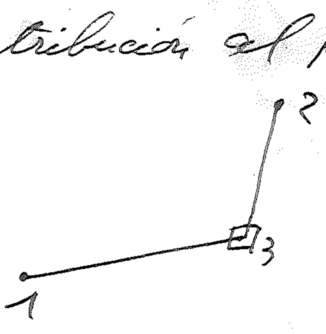
$$= \int K_0(x_2 t_2, x(s), s)\, V(x(s),s)\, K_0(x(s), s, x_1 t_1)\, dx_s$$

De este modo en [ ] consideramos antes la suma sobre todas las trayectorias que pasan por un intervalo $dx(s)$ para luego sumar sobre los intervalos.

Llamando $s = t_3$ $\quad x(s) = x_3$ $\quad V(x_3, t_3) = V_3$

$$K^{(1)}(2,1) = -\frac{i}{\hbar}\int K_0(2,3)\, V(3)\, K_0(3,1)\, \underbrace{dx_3\, dt_3}_{d\tau_3}$$

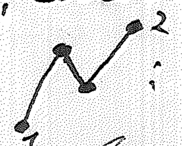
Podemos interpretar $K^{1}(2,1)$ como la contribución al K_V de las trayectorias que sufrieron un solo "scattering" en x_3 debido al potencial, comportándose fuera de x_3 como trayectorias de partículas libres

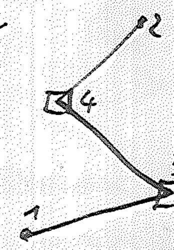


La amplitud, por unidad de volumen y tiempo, para "espallar" sería $-\frac{i}{\hbar}V$; la integral en la expresión de $K^{(1)}(2\,1)$ proviene de considerar que todos los elementos $d\tau_3$ contribuyen al scattering con la amplitud $-\frac{i}{\hbar}V$.

De manera análoga resulta (Ver ej.)

$$K^{2}(2,1) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \iint K_0(2,4)\, V(4)\, K_0(4,3)\, V(3)\, K_0(3\,1)\, d\tau_3\, d\tau_4$$

pudiendo interpretar $K^{(2)}_{(2\,1)}$ como la contribución a $K^{(2)}_V$ de las partículas que ~~se~~ ~~han~~ comportándose como partículas libres salvo dos scatterings. Cabe decir que en la anterior expresión de $K^{(2)}$ está considerada, como es evidente, tanto la trayectoria  como la ; si quisiéramos excluir aquellas en que habría que volver para el pasado habría que multiplicar por $\frac{1}{2}$ la expresión de $K^{(2)}$ o, lo que es equivalente, imponer $K_0(2,1) = 0$ si $t_2 < t_1$.



Si tuviéramos $L = \frac{m\dot{x}^2}{2} - U - V$ y conociéramos K_U, valdrían todas las fórmulas anteriores donde habría que reemplazar los K_0 por K_U y K_V por K_{U+V}

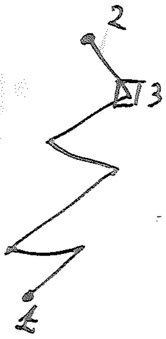
<u>Ecuación integral para K_V</u>

$$K_V(2\,1) = K_0(2\,1) - \frac{i}{\hbar}\int K_0(2,3)\, V(3)\, K_0(3\,1)\, d\tau_3 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \iint K_0(2,3)\, V(3)\, K_0(3,4)\, V(4)\, K_0(4\,1)\, d\tau_3\, d\tau_4 + \cdots$$

$$= K_0(2,1) - \frac{i}{\hbar}\int d\tau_3\, K_0(2,3)\, V(3) \left\{ K_0(3\,1) - \frac{i}{\hbar}\int K_0(3,4)\, V(4)\, K_0(4\,1)\, d\tau_4 + \cdots \right\} \therefore$$

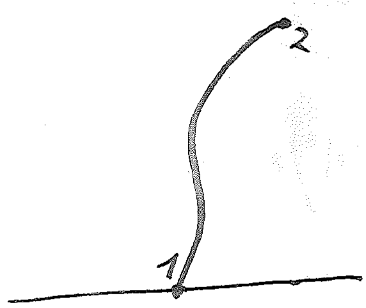
$$\boxed{K_V(2,1) = K_0(2,1) - \frac{i}{\hbar}\int K_0(2,3)\, V(3)\, K_V(3\,1)\, d\tau_3}$$

Idea intuitiva de la ecuación integral



Podemos llamar 3 al último scattering, en cuyo caso $-\frac{i}{\hbar}\int K_0(2,3)\,V(3)\,K_V(3,1)\,d\tau_3$ nos describirá el ~~[illegible]~~ K de una partícula que sufre todos los scatterings característicos al potencial V incluimos el último. El término $K_0(2,1)$ proviene de la posibilidad que la partícula no sufra scattering alguno y que por lo tanto no pueda hablarse del último de ellos.

Funciones de onda; ecuación integral



$$\psi(2)=\int K_V(2,1)\,f(x_1)\,dx_1 \qquad (t_1 \text{ es fijo}) \therefore$$

$$\psi(2)=\int K_0(2,1)\,f(x_1)\,dx_1-\frac{i}{\hbar}\iint K_0(2,3)\,V(3)\,K_0(3,1)\,f(x_1)\,d\tau_3\,dx_1+\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2\int\cdots+\cdots$$

Definiendo $\psi_0(2)=\int K_0(2,1)\,f(x_1)\,dx_1$ (función de onda sin potencial definida a partir de $f(x_1)$.)

$$\psi(2)=\psi_0(2)-\frac{i}{\hbar}\int K_0(2,3)\,V(3)\,\psi_0(3)\,d\tau_3+\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2\iint K_0(2,3)\,V(3)\,K_0(3,4)\,V(4)\,\psi_0(4)\,d\tau_4\,d\tau_3+\cdots$$

Una interpretación intuitiva análoga al desarrollo de K_V puede ser dada para la fórmula anterior: para llegar de 1 a 2 puede llegarse directamente (contribución igual a $\psi_0(2)$), mediante un scattering ~~[illegible]~~ dos o varios obteniendo así los sucesivos términos como contribuciones.

$$\psi(2)=\psi_0(2)-\frac{i}{\hbar}\int d\tau_3\,K_0(2,3)\,V(3)\left\{\psi_0(3)-\frac{i}{\hbar}\int K_0(3,4)\,V(4)\,\psi_0(4)\,d\tau_4+\cdots\right\}\therefore$$

$$\boxed{\psi(2)=\psi_0(2)-\frac{i}{\hbar}\int K_0(2,3)\,V(3)\,\psi(3)\,d\tau_3}$$

Habíamos visto que $K_0(2,1)$ cumple la ecuación:

$$\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_2}-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2\right)K_0(2,1)=-\frac{\hbar}{i}\,\delta(t_2-t_1)\,\delta(x_2-x_1)\,\delta(y_2-y_1)\,\delta(z_2-z_1)$$

Calculemos ahora:

$$\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_2}-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2\right)K_V(2,1)=\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_2}-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2\right)\left\{K_0(2,1)-\frac{i}{\hbar}\int K_0(2,3)V(3)K_V(3,1)\,d\tau_3\right\}$$

$$-\frac{\hbar}{i}\,\delta(2,1)-\frac{i}{\hbar}\int V(3)K_V(3,1)\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_2}-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2\right)K_0(2,3)\,d\tau_3\,;$$

$$\delta(2,1)=\delta(t_2-t_1)\,\delta(x_2-x_1)\,\delta(y_2-y_1)\,\delta(z_2-z_1)$$

$$=-\frac{\hbar}{i}\,\delta(2,1)+\int V(3)\,K_V(3,1)\,\delta(2,3)\,d\tau_3=-\frac{\hbar}{i}\,\delta(2,1)+V(2)K_V(2,1)$$

$$\therefore\ \boxed{\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_2}-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2-V(2)\right)K_V(2,1)=-\frac{\hbar}{i}\,\delta(2,1)}$$

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_2}-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2\right)K_0(2,1)=-\frac{\hbar}{i}\,\delta(2,1)}$$

Tenemos: $\psi_0(2)=\int K_0(2,1)\,\psi_0(1)\,dx_1$

$$\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_2}-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2\right)\psi_0(2)=\int\psi_0(1)\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_2}-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2\right)K_0(2,1)\,dx_1=$$

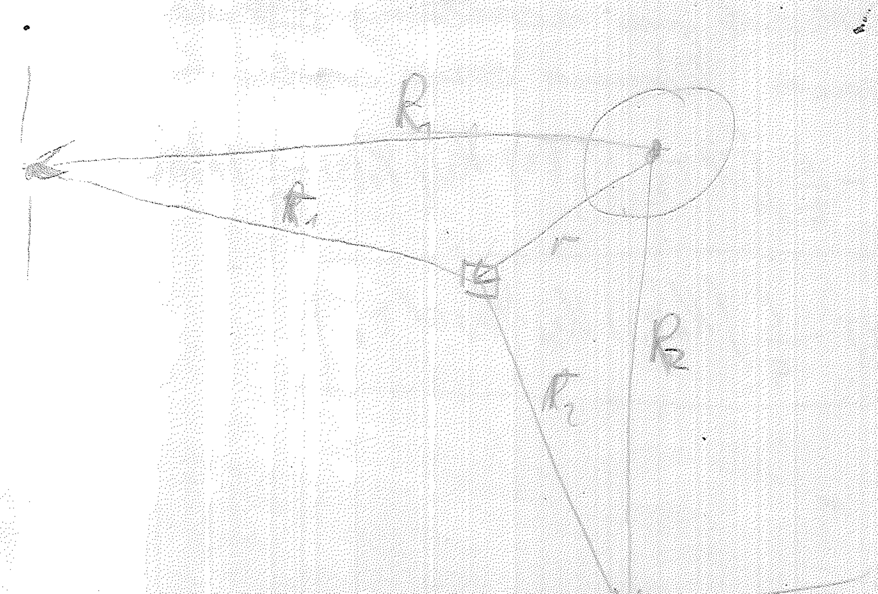
$$-\frac{\hbar}{i}\int\psi_0(1)\,\delta(2,1)\,dx_1=-\frac{\hbar}{i}\,\psi_0(2)\,\delta(t_2-t_1)=0 \text{ pues } t_1<t_2.$$

Luego $\boxed{\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_2}-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2\right)\psi_0(2)=0}$

A partir de la ecuación:

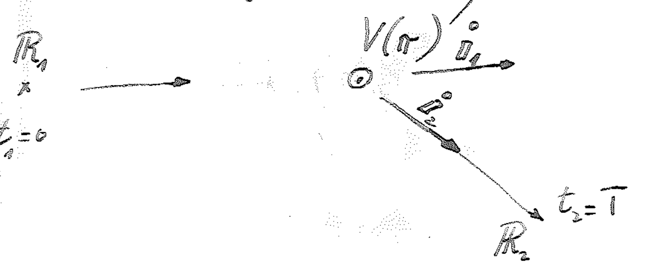
$\psi(2)=\int K_V(2,1)\,\psi(1)\,dx_1$ demostramos análogamente:

$$\boxed{\left\{-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t_2}-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2-V(2)\right\}\psi(2)=0}$$



El origen de coordenadas es el centro del potencial, es decir $\mathbf{r}=0$

Scattering en la aproximación de Born

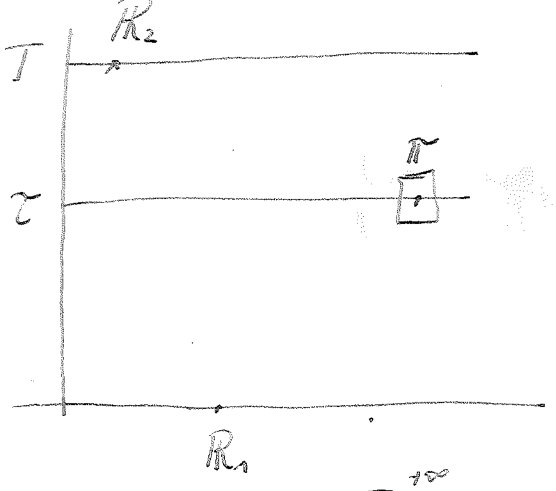


Tenemos una partícula cuya posición conocemos al tiempo $t_1=0$ y queremos saber cuál es la probabilidad de encontrarla en $\mathbf{R}_2$ después de un tiempo T. La partícula puede ser un electrón que interacciona con un átomo.

Haremos la hipótesis que el átomo actúa como un potencial.

1) átomo = potencial fijo ~~en~~ en el espacio (es decir el átomo es tan pesado que no se mueve y el potencial creado por él no depende del tiempo).

2) V = tiene efecto pequeño. Vamos a decir que el electrón sufre un solo scattering. (Aproximación de Born). Estas dos hipótesis son buenas para energías muy altas.



El hecho de suponer un solo scattering equivale a estudiar sólo el término

$$K_V^{(1)}(2,1) = -\frac{i}{\hbar}\int K_0(2,3)\,V(3)\,K_0(3,1)\,d\tau_3$$

Reemplazando $K_0(2,3)$ y $K_0(3,1)$ (amplitudes de probabilidad para la partícula libre tenemos:

$$K_V^{(1)}(2,1) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^T\int_{-\infty}^{+\infty}\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(T-\tau)}}\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\tau}}\,e^{\frac{im}{2\hbar}\frac{(\mathbf{R}_2-\mathbf{r})^2}{T-\tau}}\,e^{\frac{im}{2\hbar}\frac{(\mathbf{R}_1-\mathbf{r})^2}{\tau}}\,V(\mathbf{r})\,d^3\mathbf{r}\,d\tau$$

V no depende de τ.

Por la integral I.5:

$$K_V^{(1)}(2,1) = -\frac{i}{\hbar}\left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar}}\right)^5\frac{1}{\sqrt{T^3}}\int\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)e^{\frac{im}{2\hbar T}(r_1+r_2)^2}\,V(\mathbf{r})\,d^3\mathbf{r}$$

donde $r_1^2=(\mathbf{R}_1-\mathbf{r})^2$; $r_2^2=(\mathbf{R}_2-\mathbf{r})^2$

Osea $r_1=|\mathbf{R}_1-\mathbf{r}|$. Supondremos que $V(\mathbf{r})\sim 0$ para valores un poco grandes de $\mathbf{r}$. Por tanto podemos suponer $\mathbf{r}$ pequeño. Una primera aproximación será $r_1=R_1$ ~~siend~~ estando R_1 y R_2 definidos por: $\mathbf{R}_1=-\mathring{\mathbf{I}}_1R_1$; $\mathbf{R}_2=\mathring{\mathbf{I}}_2R_2$, es decir R_1 y R_2 son respectivamente los módulos de $\mathbf{R}_1$ y $\mathbf{R}_2$. ($\mathring{\mathbf{I}}_1$ e $\mathring{\mathbf{I}}_2$ son versores).

La aproximación $r_1=R_1$ podría ser usada en el factor $\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)$ pero no basta en la fase, es decir en el cálculo del exponencial, pues una pequeña variación de r_1 allí puede afectar muchísimo el resultado si el factor $\frac{m}{2\hbar T}$ fuera grande.

Una aproximación mejor y conveniente es:

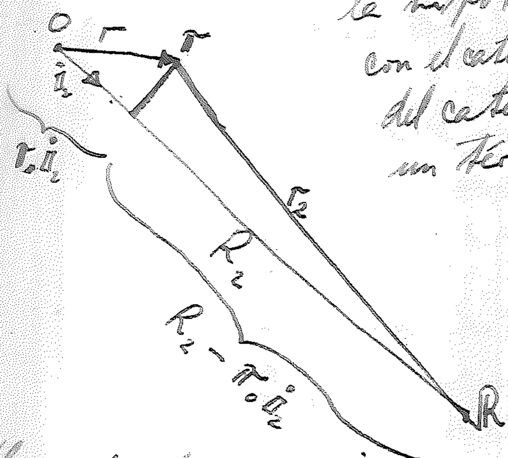
$\boxed{r_1 = R_1 + \mathring{I}_1 \cdot \mathbb{r}}$ $\boxed{r_2 = R_2 - \mathring{I}_2 \cdot \mathbb{r}}$

Demostremos analíticamente la primera fórmula:

$$r_1^2 = R_1^2 - 2\mathbb{R}_1 \cdot \mathbb{r} + r^2 = R_1^2 + 2R_1\, \mathring{I}_1 \cdot \mathbb{r} + r^2 = R_1^2\left(1 + \frac{2}{R_1}\mathring{I}_1\cdot\mathbb{r} + \frac{r^2}{R_1^2}\right) \therefore$$

$$\therefore\ r_1 = R_1\left(1 + \frac{2}{R_1}\mathring{I}_1\cdot\mathbb{r} + \frac{r^2}{R_1^2}\right)^{1/2};$$ despreciando términos en r^2:

$\boxed{r_1 = R_1 + \mathring{I}_1 \cdot \mathbb{r}}$ Veamos geométricamente el sentido de la segunda fórmula (ver dibujo). Es obvio que en dicha aproximación identificamos la hipotenusa del triángulo rectángulo con el cateto mayor, despreciando el cuadrado del cateto menor, es decir despreciando un término del orden de r^2.



Naturalmente, puede hacerse la demostración analítica de esta segunda fórmula y puede hallarse el significado geométrico de la primera.

Con estas aproximaciones se obtiene:

$$K_v^{(1)}(2,1) = -\frac{i}{\hbar}\left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar}}\right)^5 \frac{1}{\sqrt{T^3}}\left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right) e^{\frac{im}{2\hbar T}(R_1+R_2)^2}\, F$$

$$F = \int e^{\frac{im}{\hbar T}(R_1+R_2)(\mathring{I}_1\cdot\mathbb{r}_1 - \mathring{I}_2\cdot\mathbb{r})}\, V(\mathbb{r})\, d^3\mathbb{r}$$

Interpretaremos esos resultados con ideas clásicas

Definamos:

$v = \dfrac{R_1 + R_2}{T}$; $m v \mathring{I}_1 = \mathbb{P}_1$; $m v \mathring{I}_2 = \mathbb{P}_2$

Naturalmente las magnitudes de estos dos impulsos son iguales.

Llamemos $\boxed{\mathbb{q} = \mathbb{P}_1 - \mathbb{P}_2}$

$$K_v^{(1)}(2,1) = -\frac{i}{\hbar}\left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar}}\right)^5 \frac{v}{R_1 R_2 T^{3/2}}\, e^{\frac{imv^2T}{2\hbar}} \underbrace{\int e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbb{P}_1-\mathbb{P}_2)\cdot\mathbb{r}}\, V(\mathbb{r})\, d^3\mathbb{r}}_{v(\mathbb{q})}$$

$v(\mathbb{q})$ depende sólo de los ~~momentos~~ impulsos inicial y final, no de las posiciones inicial y final.

$$\boxed{v(\mathbb{q}) = \int e^{\frac{i}{\hbar}\mathbb{q}\cdot\mathbb{r}}\, V(\mathbb{r})\, d^3\mathbb{r}}$$

Se ve que $v(\mathbb{q})$ es la transformada de Fourier de $V(\mathbb{r})$.

La probabilidad de llegar por cm^3 será:

$$\boxed{P = \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^5 \frac{v^2}{R_1^2 R_2^2}\, |v(\mathbb{q})|^2}$$

Se puede interpretar diciendo que esta es la Prob. por cm^3 de partículas incidentes y de ~~emitent~~ emergentes.

Como φ en 3 dimens. ... K tiene dimens. de $\frac{1}{L^3}$ $\therefore P \sim \frac{1}{L^6}$