

Notes from a course on Quantum Mechanics given
by Feynman in Brasil

Daniele Amati
SISSA-ISAS
Via Bonomea 265
I-34136 Trieste, Italy

Alberto Sirlin
Department of Physics, New York University
4 Washington Place, New York, NY 10003 USA

Abstract

The article presents copies of the notes taken by the authors during a course on Quantum Mechanics given by Feynman in Brasil in 1953. They provide an interesting testimony to Feynman's approach in the teaching of non-relativistic Quantum Mechanics, which emphasized the path-integral formulation and, at the time, was very original and unconventional. A brief description of the course, as well as recollections of several meetings and exchanges the authors had with Feynman over nearly three decades, in both the U.S. and Europe, can be found in Ref. [1].

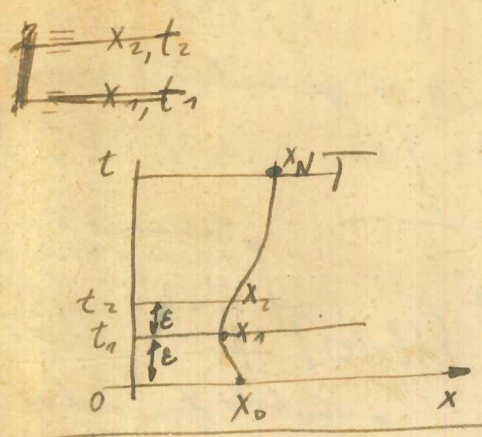
Cálculo de amplitudes de probabilidad

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

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

1º método: Directamente

$$K(x_2, t_2; x_1, t_1) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int \dots \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} S(x_{i+1}, t_{i+1}; x_i, t_i)} \frac{dx_1}{A} \dots \frac{dx_{N-1}}{A} \frac{1}{A}$$



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

Luego $K(x_N, T; x_0, 0) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int \dots \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2\epsilon} [(x_1 - x_0)^2 + (x_2 - x_1)^2 + \dots + (x_N - x_{N-1})^2]} \frac{dx_1}{A} \frac{dx_2}{A} \dots \frac{dx_{N-1}}{A}$

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

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

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

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

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

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

El producto de las integrales da, por tanto:

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

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

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

con $L = \frac{im}{2\hbar E}$

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

Formamos, por conveniencia,

$$A = \sqrt{-\frac{2\pi\hbar E}{im}} = \sqrt{\frac{i\hbar E}{m}}$$

Quede: $K = \sqrt{-\frac{im}{2\pi\hbar T}} e^{\frac{im}{2\hbar T} (x_0 - x_N)^2}$

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

2.º Método (más conveniente). $L = \frac{m}{2} \dot{x}^2$
 $K = \int_{x_1, t_1}^{x_2, t_2} e^{\frac{im}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \dot{x}^2 dt} \mathcal{D}[x(t)]$

Este símbolo es una manera abreviada de escribir el límite de la pag. anterior, supuesta que él existe.

El 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 cuerpo libre tenemos: $\ddot{\bar{x}} = 0$

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

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

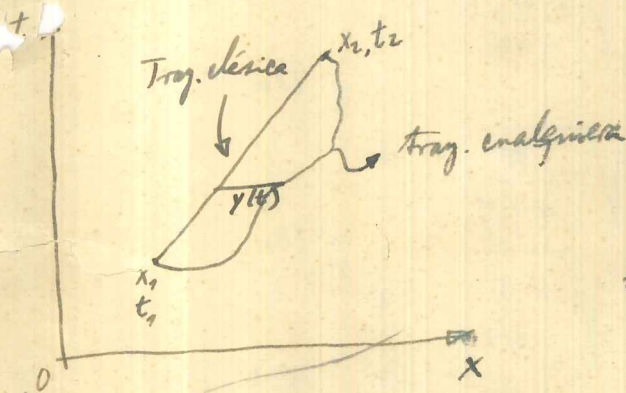
$$K = \int_{y=0 \text{ en } t_1}^{y=0 \text{ en } t_2} e^{\frac{im}{2\hbar} \int_{t_1}^{t_2} (\dot{\bar{x}} + \dot{y})^2 dt} \mathcal{D}[y(t)]$$

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

Pero $\int_{t_1}^{t_2} 2\dot{\bar{x}}\dot{y} dt = 2\dot{\bar{x}} \Big|_{t_1}^{t_2} y - \int_{t_1}^{t_2} \ddot{\bar{x}} y dt$ cero porque $\ddot{\bar{x}} = 0$ por ser la tray. clás.

cero porque y es 0 en los lím.

ver directamente pues siendo un término lineal se il da la primera variación de S a lo largo de $\delta S = 0$.



Efectivamente:

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

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

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

Luego:

$$K = \int e^{\frac{i m}{2 \hbar} \int_{t_1}^{t_2} \dot{x}^2 dt} e^{\frac{i m}{2 \hbar} \int_{t_1}^{t_2} j^2 dt} \mathcal{D}[j(t)] = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x_2 - x_1)^2}{t_2 - t_1}} \int e^{\frac{i m}{2 \hbar} \int_{t_1}^{t_2} j^2 dt} \mathcal{D}[j(t)]$$

tray. $j=0$ en t_1
 $j=0$ en t_2

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

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

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:

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

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

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

$$d(t_3 - t_1) d(t_2 - t_3) \sqrt{\frac{-\pi}{\alpha_1 + \alpha_2}} e^{\frac{\alpha_1 \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \frac{(x_2 - x_1)^2}{2 \hbar}} \quad \text{siendo} \quad \begin{cases} \alpha_1 = \frac{i m}{2 \hbar (t_3 - t_1)} \\ \alpha_2 = \frac{i m}{2 \hbar (t_2 - t_3)} \end{cases}$$

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

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:

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

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

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

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

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

concordante con el obtenido por el primer método.

Puede verse que $\text{Re}(K)$ 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

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

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

$$L = \alpha(t)\dot{x}^2 + \beta(t)\dot{x}x + \gamma(t)x^2 + A(t)\dot{x} + B(t)x + C(t), \text{ mostrar}$$

$$\text{que } K = F(t_2, t_1) e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}}$$

3) Mostrar, en el caso de una partícula libre en 3 dimensiones

$$\text{que } K(\vec{r}_2, t_2; \vec{r}_1, t_1) = \left(\frac{2\pi i \hbar (t_2 - t_1)}{m}\right)^{-3/2} e^{\frac{i m (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)^2}{2\hbar (t_2 - t_1)}}$$

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

$$K(z, t) = F(t_2 - t_1) e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}(z, t)}$$

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 que mostrados. Es, por lo tanto, aplicable en los siguientes casos:

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

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

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

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

3. Partícula cargada colocada en un campo magnético constante:

$$L = \frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^2 + \frac{e}{20} \dot{\vec{x}} \cdot (\vec{h} \times \vec{x})$$

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

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

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_0 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_0 .

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

La amplitud de probabilidad queda:

$$K(2,1) = \int_{\text{todas tray } 1 \rightarrow 2} e^{\frac{i}{\hbar} S} D[x(t)] = \int_{\substack{y=0 \\ \text{en } t_1, t_2}} e^{\frac{i}{\hbar} [S_0 + O(y^2) + \dots]} D[y(t)]$$

En una aproximación semi-clásica podemos suponer que los términos cuyo grado en y es superior al segundo son despreciables.

Queda:

$$K(2,1) = e^{\frac{i}{\hbar} S_0} \int_{\substack{y=0 \\ \text{en } t_1, t_2}} e^{\frac{i}{\hbar} O(y^2)} D[y(t)];$$

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 t_1, t_2 , es decir de x_1, x_2, t_1 y t_2 . Luego: $K(2,1) = F(x_1, x_2, t_1, t_2) e^{\frac{i}{\hbar} S_0}$ En la aproximación semi-clásica en que y es muy pequeño el término $O(y^2)$ es stb. muy pequeño y $F(x_1, x_2, t_1, t_2)$ es una función smooth (muy suave).

Problema. Son emitidas partículas ^{libres} desde un punto con impulsos diversos, con distribución uniforme (la probabilidad de que una partícula tenga impulsos entre p y $p+dp$ es dp — probabilidad proporcional al intervalo, constante de proporción igual a 1).
 Con 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:

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

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

Las partículas que al fin de un tiempo T están entre x y $x+dx$ son aquellas que tienen velocidad entre $\frac{x}{T}$ y $\frac{x+dx}{T}$, luego impulsos entre $\frac{m x}{T}$ y $\frac{m(x+dx)}{T}$; su número es entonces:

$dp_x = \frac{m dx}{T}$. 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:

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

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

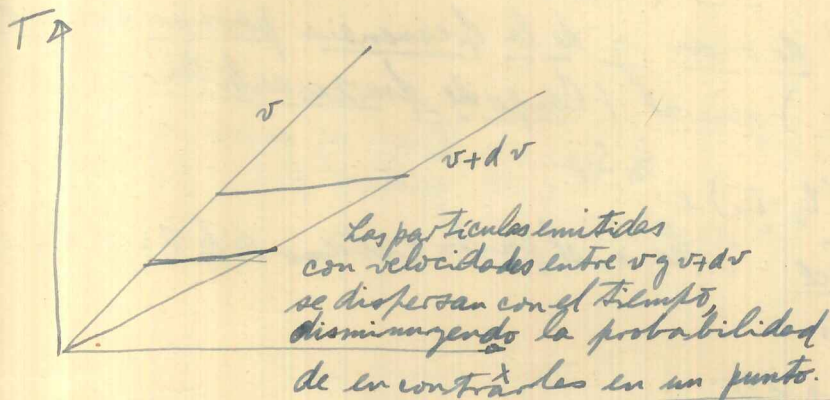
Discusión del valor de la amplitud total de probabilidad para un corpúsculo libre en una dimensión.

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

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.

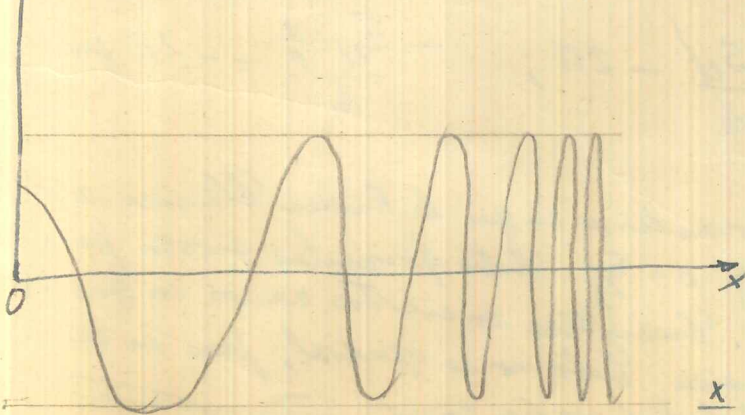
~~Principio de indeterminación~~ Comemos, por ejemplo, la parte real de

$K = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T}\right)^{1/2} e^{\frac{i m x^2}{2\hbar T}}$ y veamos cómo varía con x y con T .

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

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

$\text{Re}(K)$ Variación con x ($T=cte$)



Siendo λ la longitud de onda:

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

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

despreciable

$$\frac{\lambda}{2\pi} = \frac{\hbar}{m x}$$

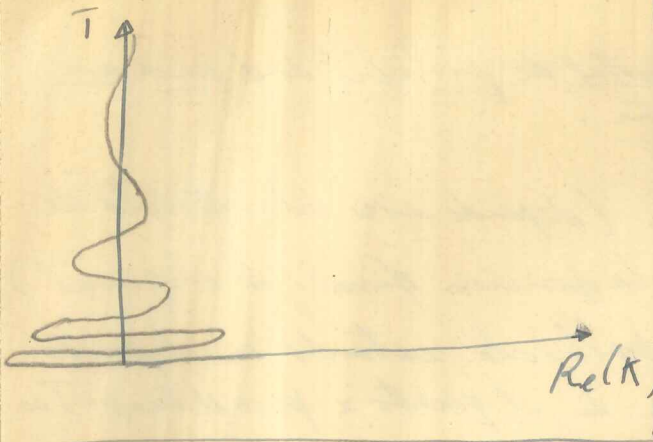
$\frac{x}{T} = \text{veloc. clásica del corpúsculo libre.}$

$$\frac{m x}{T} = p_{cl.};$$

$$\boxed{\frac{\lambda}{2\pi} = \lambda = \frac{\hbar}{p_{cl}}}$$

Fórmula de de Broglie.

Variación con T : ($x = \text{cte}$).



Siendo δ el período:

$$-\frac{m x^2}{2h(T+\delta)} + \frac{m x^2}{2hT} = 2\pi \dots$$

$$\delta \left(1 - \frac{2h 2\pi T}{m x^2} \right) = \frac{2h 2\pi T^2}{m x^2}$$

↳ despreciable

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

E_c = energía cinética = energía total del corpúsculo libre.

$$\delta = \frac{2\pi}{\omega} ; \frac{1}{\omega} = \frac{h}{E} \therefore \boxed{E = h\omega}$$

$\omega = \frac{m x^2}{2h} \frac{1}{T^2}$: la frecuencia disminuye al aumentar T .

Calcular la longitud de onda y de la frecuencia para un caso clásico (S muy grande) general. (Campos de fuerzas arbitrarios)

Tomemos: $K = F(t_2 - t_1) e^{i \frac{h}{\hbar} S_{cl}}$ Proc. en un caso clas. 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.

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

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

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

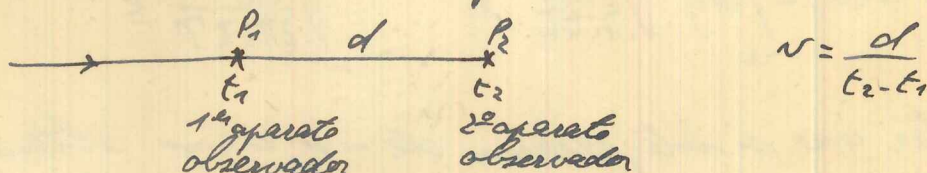
$$\frac{S_{cl}}{\hbar} + \frac{\partial S_{cl}}{\partial t} \frac{1}{\hbar f} = \frac{S_{cl}}{\hbar} - 2\pi ; \quad - \frac{E_{cl}}{\hbar f} = -2\pi \text{ pues } \frac{\partial S_{cl}}{\partial t} = -E_{cl}$$

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

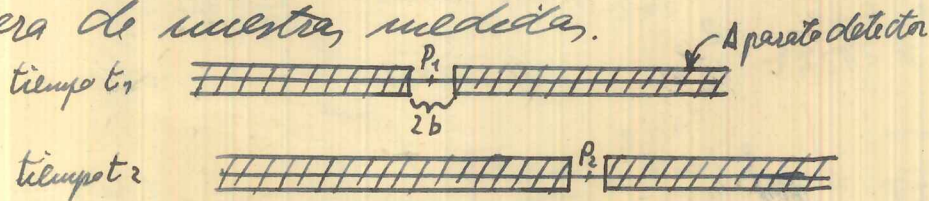
Decimos entonces que en cualquier sistema en que la Física Clásica debe valer debemos tener $E = h\omega$ y $p = \frac{h}{\lambda}$. Estas fórmulas sirven para definir energía e impulso en Mec. Cuántica en ciertos casos en que no hay analogía con la Física Clásica. Esto no es general, pues en los casos en que la amplitud de probabilidad varía como $e^{i S_{cl}/\hbar}$, 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 t_0 en un punto definido del espacio (a una dimensión), y vimos que en momento era completamente desconocida. Vemos ahora que es posible decir sobre una partícula cuya posición, en un dado instante, es conocida con cierta indeterminación (o sea véase 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)

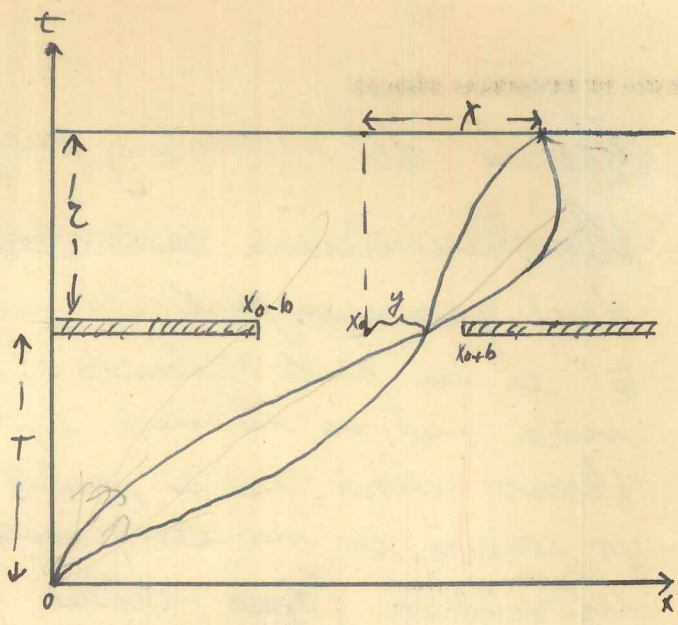
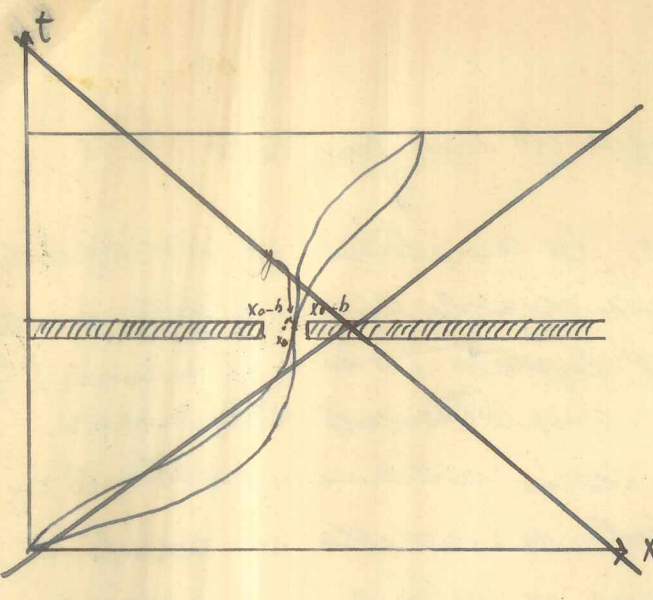


En la M. Q. la observación de una partícula perturba su movimiento. Haremos entonces lo siguiente: en un tiempo t_1 (de hecho en un intervalo ^{de tiempo} arbitrariamente pequeño) se colocan detectores a lo largo de todo el espacio (1 dimensión) excepto en una pequeña región en torno de P_1 ; si los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



Todas las partículas que en el tiempo t_1 estuvieran en la faja de largura $2b$ alrededor de P_1 , podrían llegar a P_2 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



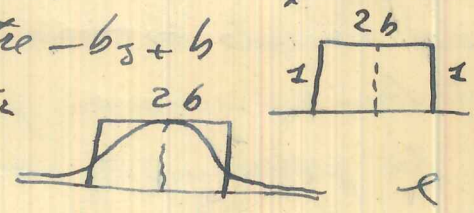
por una faja $x_0 - b, x_0 + b$. Por el principio de combinación de amplitudes totales, tendremos para una partícula que parte de $x=0$ para $t=0$, llegar a $x_0 + x$ en $T + \tau$

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

(Nota 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: reemplazaremos la función de peso 1 entre $-b$ y b

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



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

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

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \tau}} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} \exp\left[\frac{i m x^2}{2 \hbar \tau} + \frac{i m x_0^2}{2 \hbar T}\right] \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[\frac{i m}{2 \hbar \tau} + \frac{i m}{2 \hbar T} - \frac{1}{4b^2}\right] y^2 + \left(\frac{i m x_0}{\hbar \tau} - \frac{i m x}{\hbar T}\right) y \right] dy$$

por la integral I-1 de la tabla:

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

$$\times \sqrt{\frac{\pi}{\frac{1}{4b^2} - \frac{i m}{2 \hbar} \left(\frac{1}{\tau} + \frac{1}{T}\right)}}$$

~~$$K = \frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \dots$$~~

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

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

La probabilidad para que la partícula llegue a x es:

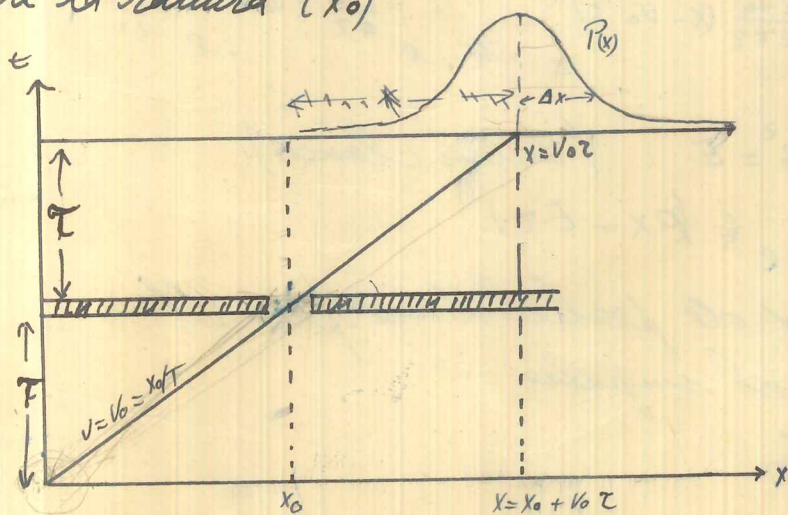
$$P = |K(x)|^2 = \frac{m}{2\pi \hbar} \sqrt{\frac{1}{(T + \tau)^2 + \left(\frac{2T\tau/\hbar} {4b^2 m} \right)^2}} \cdot \exp \left\{ \frac{\frac{m^2}{\hbar^2} \tau^2 (x - v_0 \tau)^2 \left(-\frac{2}{b^2} \right)}{\left(\frac{1}{b^2} \right)^2 + \left[\frac{m}{2 \hbar} \left(\frac{1}{T} + \frac{1}{\tau}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

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

podemos escribir

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

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 ϕ 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 hecho con τ hecho esperado clásicamente* (es lógico que el error aumente al alejar la pantalla).

El segundo término es característico de la mec. cuántica.

$$(\Delta x)_{\text{cuánt.}} = \frac{\hbar \tau}{2 b m}$$

Una variación Δx en la posición de la partícula que llegó

* Geométricamente puede verse que $\Delta x = b \left(1 + \frac{\tau}{T} \right)$ sería 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 $(\Delta p)_{\text{cent.}} = m \frac{(\Delta x)_{\text{cent.}}}{\tau} = \frac{h}{2b}$ (indep. de τ)

Vemos entonces que una incertidumbre $\Delta x = \frac{h}{2b}$ en la determinación de la posición del corpusculo produce una indeterminación en la medida del momento que es inversamente proporcional a Δx :

$$\Delta p \Delta x = \text{cte.}$$

siendo la constante de la magnitud de h

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 también del valor de T ; el momento será conocido con mayor precisión cuanto mayor fuera el valor de T ya que disminuye el valor de $(\Delta x)_{\text{cent.}}$ 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 $T \rightarrow \infty$ (fuente en el infinito) y b grande.

Cuando T es muy grande

$$K \rightarrow \text{cte.} \cdot e^{-\frac{imx^2}{2\hbar\tau}} \cdot e^{-\frac{\frac{m^2}{\hbar^2}(x-v_0\tau)^2}{4\tau}} \rightarrow \text{constante}$$

y si también b es muy grande

$$K \rightarrow \text{cte.} \cdot e^{-\frac{imx^2}{2\hbar\tau}} \cdot e^{-\frac{im}{2\hbar}(x-v_0\tau)^2} = \text{cte.} \cdot e^{-\frac{im}{\hbar}xv_0\tau} \cdot e^{-\frac{im}{2\hbar}v_0^2\tau^2}$$

Con $mv_0 = p$, $\frac{mv_0^2}{2} = E$ (Valores clásicos)

$$K = C \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$$

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

Fin

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 se puede preparar $K(x_1, t_1, x_0, t_0)$ para todas las funciones de onda.

Dado Ψ al tiempo t_1 para todo x_1 , 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

$$\Psi(x_2) = K(x_2, t_2, x_0, t_0)$$

Consideremos ahora el caso en que conocemos $\Psi(x_1, t_1)$ para todo x_1 función que llamaremos $f(x_1)$; $\Psi(x_2, t_2) = K(x_2, t_2, x_0, t_0)$

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

$$= \int K(x_2, t_2, x_1, t_1) f(x_1) dx_1 \quad \text{o de una}$$

manera más concisa:

$$\Psi(t_2) = \int K(t_2) \Psi(t_1) dx_1 \quad (\text{Ecuación de Schrödinger})$$

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

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

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

Le 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.

La ecuación una función f con una dada discontinuidad
dada a en el punto b

$$f(b) = a d(x-b)$$

Ver

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

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

$$d(k^2 - t^2) = \frac{1}{2k} (d(k-t) + d(k+t))$$

Definición $K(z, t) = 0$ para $t_2 < t_1$

$K(z, t)$ satisfará la ecuación

$$\left(-\frac{t}{i} \frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{t^2}{2m} \nabla_{x_2}^2 \right) K(z, t) = i t d(t_2 - t_1) d(x_2 - x_1) d(y_2 - y_1) d(z_2 - z_1)$$

Partícula en campo potencial general

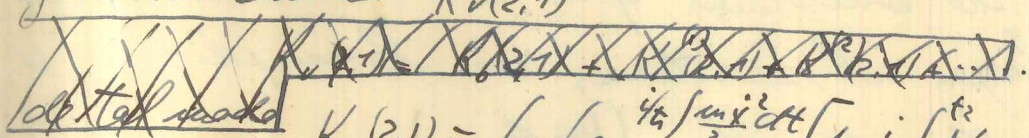
En el caso en que la partícula está sometida a fuerza que derivan de un potencial $L = \frac{m \dot{x}^2}{2} - V(x, t)$ (Una dimensión)

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

$$K_V(x_2, t_2; x_1, t_1) = \int_{D_{X(t)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} [\frac{m \dot{x}^2}{2} - V(x(t), t)] dt}$$

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

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



$$K_V(2,1) = \int_{D_{X(t)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \frac{m \dot{x}^2}{2} dt} \left[1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} V(x(s), s) ds + \frac{1}{2} \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} V ds \right)^2 + \dots \right] D_X$$

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

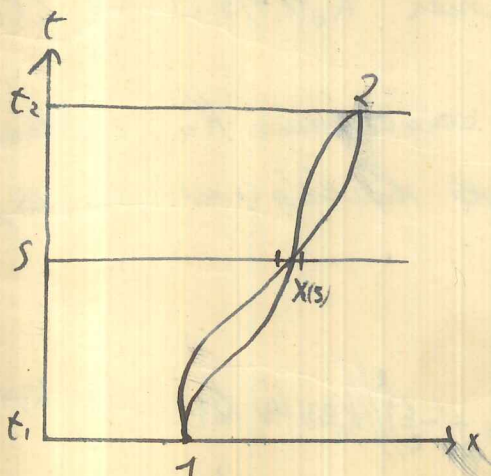
donde $K^{(1)}(2,1) = \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \int_{D_{X(t)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \frac{m \dot{x}^2}{2} dt} \left(\int_{t_1}^{t_2} V(x(s), s) ds \right) D_X$

de tal modo si V es proporcional a una constante d , $K^{(k)}$ será proporcional a d^k

Podremos escribir

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

$$[] = \int_{\text{todas las tray. de } t_1 \text{ a } t_2} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \frac{m \dot{x}^2}{2} dt} V(x(s), s) D_X = \int dx_s V(x_s, s) \int_{\text{todas las tray. que van de } t_1 \text{ a } s} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^s \frac{m \dot{x}^2}{2} dt} D_X =$$



$$= \int dx_s V(x_s, s) \int_{\text{todas las tray. de } t_1 \text{ a } x(s)} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^s \frac{m \dot{x}^2}{2} dt} D_X \int_{\text{todas las tray. de } x(s) \text{ a } t_2} e^{\frac{i}{\hbar} \int_s^{t_2} \frac{m \dot{x}^2}{2} dt} D_X =$$

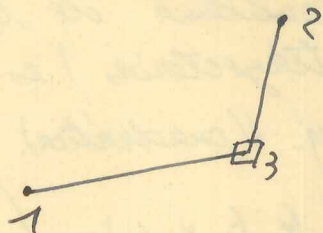
$$= \int K_0(x_2, t_2, x(s), s) V(x(s), s) K_0(x(s), s, x_1, t_1) dx_s$$

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 $s=t_3$ $X(s) = X_3$ $V(X_3, t_3) = V_3$

$$K^{(1)}_{(2,1)} = -\frac{i}{\hbar} \int K_0(2,3) V_3 K_0(3,1) \underbrace{dX_3}_{d\tau_3} dt_3$$

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.

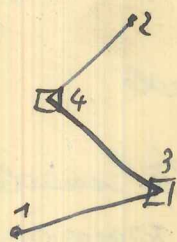




La amplitud, por unidad de volumen y tiempo, para "scatter" sería $-\frac{i}{\hbar} V$; la integral en la expresión de $K^{(1)}_{(2,1)}$ proviene de considerar que todos los elementos $d\tau_3$ contribuyen al scattering con la amplitud $-\frac{i}{\hbar} V$.

De manera análoga resulta (Ver ej.)

$$K^{(2)}_{(2,1)} = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \iint K_0(2,4) V_4 K_0(4,3) V_3 K_0(3,1) d\tau_3 d\tau_4$$

podiendo interpretar $K^{(2)}_{(2,1)}$ como la contribución a $K_V^{(2)}$ de las partículas que ~~se~~ ^{van de ida y} ~~van~~ ^{ven} comportándose como partículas libres antes de dos scatterings. Cabe decir que en la anterior expresión de $K^{(2)}$ está considerada, como es evidente,



tanto la trayectoria  como la ; si quisiera 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 K_0 por K_U y K_V por K_{U+V} .

Ecuación integral para K_V

$$K_V(2,1) = K_0(2,1) - \frac{i}{\hbar} \int K_0(2,3) V_3 K_0(3,1) d\tau_3 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \iint K_0(2,3) V_3 K_0(3,4) V_4 K_0(4,1) d\tau_3 d\tau_4 + \dots$$

$$= K_0(2,1) - \frac{i}{\hbar} \int d\tau_3 K_0(2,3) V_3 \left\{ K_0(3,1) - \frac{i}{\hbar} \int K_0(3,4) V_4 K_0(4,1) d\tau_4 + \dots \right\} \dots$$

$$K_V(2,1) = K_0(2,1) - \frac{i}{\hbar} \int K_0(2,3) V_3 K_V(3,1) d\tau_3$$

Idea intuitiva de la ecuación integral



Podemos llamar 3 al último scattering, en cuyo caso $-\frac{i}{\epsilon} \int K_0(2,3) V(3) K_{\nu}(3,1) d\tau_3$ nos describe el ~~scattering~~ K de una partícula que sufre todos los scatterings característicos al potencial V inclusive el último. El término $K_0(2,1)$ proviene de la probabilidad que la partícula no padea scattering alguno y que por lo tanto no pueda hablar del último de ellos.

Funciones de onda; ecuación integral

$$\int_1^2 \Psi(2) = \int K_{\nu}(2,1) \psi(x_1) dx_1 \quad (\tau_1 \text{ fija}) \dots$$

$$\Psi(2) = \int K_0(2,1) \psi(x_1) dx_1 - \frac{i}{\epsilon} \int K_0(2,3) V(3) K_{\nu}(3,1) \psi(x_1) d\tau_3 + \left(\frac{i}{\epsilon}\right)^2 \int \dots + \dots$$

Definiendo $\Psi_0(2) = \int K_0(2,1) \psi(x_1) dx_1$ (función de onda sin potencial definida a partir de $\psi(x_1)$).

$$\Psi(2) = \Psi_0(2) - \frac{i}{\epsilon} \int K_0(2,3) V(3) \Psi_0(3) d\tau_3 + \left(\frac{i}{\epsilon}\right)^2 \int K_0(2,3) V(3) K_0(3,4) V(4) \Psi_0(4) d\tau_3 d\tau_4 + \dots$$

Una interpretación intuitiva análoga al desarrollo de K_{ν} 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 ~~de~~ dos o varios obteniendo así los sucesivos términos como contribuciones.

$$\Psi(2) = \Psi_0(2) - \frac{i}{\epsilon} \int d\tau_3 K_0(2,3) V(3) \left\{ \Psi_0(3) - \frac{i}{\epsilon} \int K_0(3,4) V(4) \Psi_0(4) d\tau_4 + \dots \right\}$$

$$\boxed{\Psi(2) = \Psi_0(2) - \frac{i}{\epsilon} \int K_0(2,3) V(3) \Psi(3) d\tau_3}$$

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

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

Calculémoslo ahora:

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

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

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

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

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

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

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

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

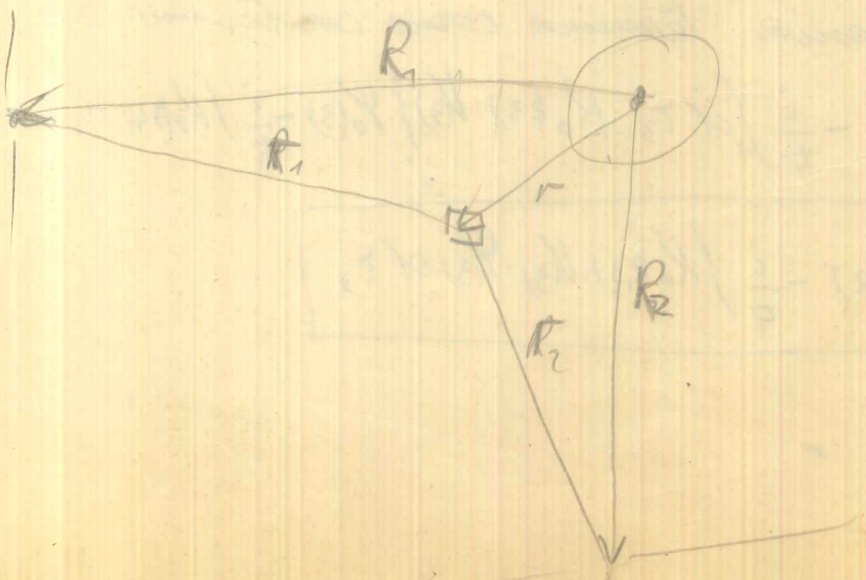
$$-\frac{\hbar}{i} \int \psi_0(1) \delta(2,1) dx_1 = -\frac{\hbar}{i} \psi_0(2) \delta(t_2 - t_1) = 0 \text{ pues } t_1 < t_2.$$

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

A partir de la ecuación:

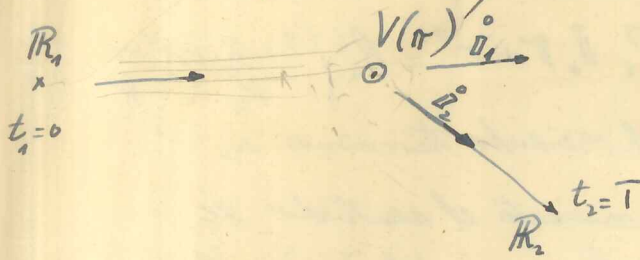
$$\psi(2) = \int K_V(2,1) \psi(1) dx_1 \text{ demostramos análogamente:}$$

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



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

Scattering en la aproximación de Born

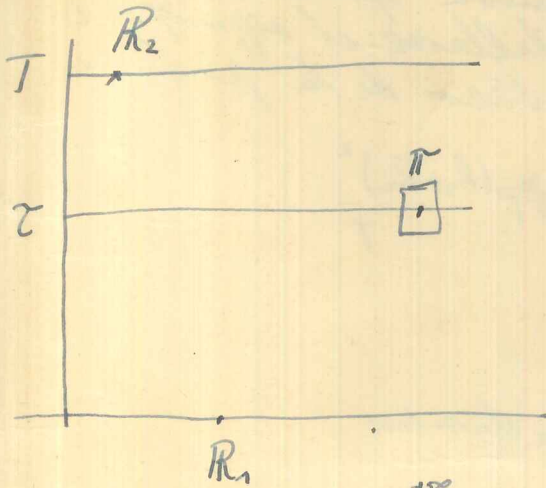


Tenemos una partícula cuya posición conocemos al tiempo $t_1=0$ y queremos saber cuáles la probabilidad de encontrarla en R_2 después de un tiempo T . La partícula

puede ser un electrón que interacciona con un átomo. Haremos la hipótesis que el átomo actúa como un potencial.

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

2) $V \equiv$ tiene efectos pequeños. 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

$$K_v^{(1)}(2,1) = -\frac{i}{\hbar} \int V(\vec{r}) K_0(\vec{r},1) d\vec{r}_3$$

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

$$K_v^{(1)}(2,1) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (T-t)}} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} e^{\frac{i m (R_2 - \pi)^2}{2\hbar (T-t)}} e^{\frac{i m (R_2 - \pi)^2}{2\hbar t}} V(\pi) d\pi dt$$

V no depende de t .

Por la integral I.5:

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

donde $r_1^2 = (R_1 - \pi)^2$; $r_2^2 = (R_2 - \pi)^2$

Osea $r_1 = |R_1 - \pi|$. Supondremos que $V(\pi) \sim 0$ para valores un poco grandes de π . Por tanto podemos suponer π pequeños. Una primera aproximación sería $r_1 = R_1$, ~~siendo~~ estando R_1 y R_2 definidos por:

$R_1 = -\vec{i}_1 R_1$; $R_2 = \vec{i}_2 R_2$, es decir R_1 y R_2 son respectivamente los módulos de R_1 y R_2 . (\vec{i}_1 e \vec{i}_2 son versores).

La aproximación $r_1 = R_1$ podría ser usada en el factor $(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2})$, 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 $\frac{m}{2\hbar T}$ queda grande.

Una aproximación mejor y conveniente es:

$$\boxed{r_1 = R_1 + \vec{a}_1 \cdot \vec{\pi}} \quad \boxed{r_2 = R_2 - \vec{a}_2 \cdot \vec{\pi}}$$

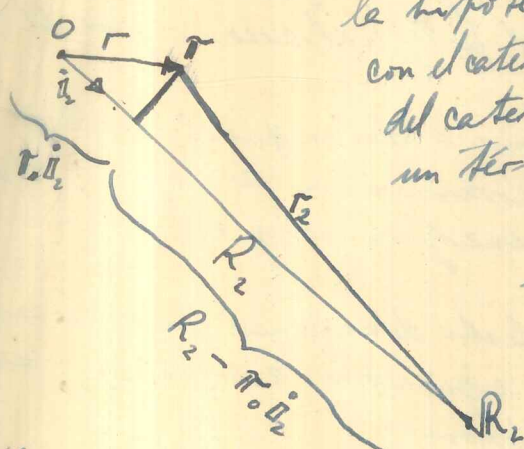
Demostremos analíticamente la primera fórmula:

$$r_1^2 = R_1^2 - 2R_1 \cdot \pi + r^2 = R_1^2 + 2R_1 \vec{a}_1 \cdot \vec{\pi} + r^2 = R_1^2 \left(1 + 2 \frac{\vec{a}_1 \cdot \vec{\pi}}{R_1} + \frac{r^2}{R_1^2} \right) \therefore$$

$$\therefore r_1 = R_1 \left(1 + 2 \frac{\vec{a}_1 \cdot \vec{\pi}}{R_1} + \frac{r^2}{R_1^2} \right)^{1/2}; \text{ despreciando términos en } r^2:$$

$$\boxed{r_1 = R_1 + \vec{a}_1 \cdot \vec{\pi}}$$

Vamos geoméricamente 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 leerse la demostración analítica de esta segunda fórmula y puede hallarse el significado geométrico de la primera.

Con estas aproximaciones se obtiene:

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

$$F = \int e^{\frac{i m}{\hbar T} (R_1 + R_2) (\vec{a}_1 \cdot \vec{\pi} - \vec{a}_2 \cdot \vec{\pi})} V(\vec{\pi}) d^3\vec{\pi}$$

Interpretaremos los resultados con ideas clásicas

Definamos:

$$v = \frac{R_1 + R_2}{T}; \quad m v \vec{a}_1 = \vec{p}_1; \quad m v \vec{a}_2 = \vec{p}_2$$

Naturalmente las magnitudes de estos dos impulsos son iguales.

llamemos $\boxed{q = \vec{p}_1 - \vec{p}_2}$

$$K_v^{(1)}(2,1) = -\frac{i}{\hbar} \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}} \right)^5 \frac{v}{R_1 R_2 T^{3/2}} e^{\frac{i m v^2 T}{2\hbar}} \int e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \cdot \vec{\pi}} V(\vec{\pi}) d^3\vec{\pi}$$

$v(q)$ depende sólo de los momentos inicial y final, no de las posiciones inicial y final.

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

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

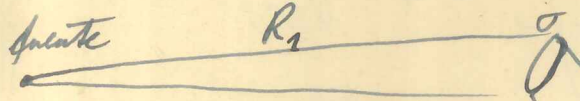
La probabilidad de llegar por cm^3 será: $\left| v(q) \right|^2$ se puede interpretar diciendo que esto es la prob. por cm^3 de partículas incidentes y de emergentes.

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

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

Se ve fácil para una dimensión. La probabilidad de llegar desde $0,0$ a (x,t) era $\frac{m}{2\pi\hbar t} dx$; $p = \frac{mx}{t}$
 $\frac{m dx}{t} = dp$; $\frac{m dx}{2\pi\hbar t} = \frac{dp}{2\pi\hbar}$

Concepto clásico de sección de choque



Sea una fuente de partículas (por ej. ciclotron). Yo abro la fuente y le viro enseguida y supongo que se liberan partículas libres con distrib. uniforme de momentos ya que al instante $T=0$ como sea exactamente la situación de ellas. El número de partículas que al instante t , llega a un elemento de volumen que tiene su base en σ es $\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$ siendo $p = mv$.

Sea $\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$ el número de partículas de impulsos comprendidos entre p y $p+dp$.
 Calculando el número de partículas que pasan por dA entre $T-dT$ y T el número de partículas que llegan a σ , cuyo impulso está comprendido entre p y $p+dp$ será:

$$\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} d\Omega = \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\sigma}{R_1^2} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^3 v^2 dv \frac{\sigma}{R_1^2}$$

v : veloc. de las partículas.

El número de las partículas que, teniendo velocidad entre v y $v+dv$, han sido scattered en σ y pasan en un seg. por A será:

$$d \left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^3 v^2 dv \frac{\sigma}{R_1^2} \frac{dA}{R_2^2}$$

Si T es el tiempo que una partícula de velocidad v tardó en llegar de la fuente a la superf. dA , la partícula con velocidad $v+dv$ habrá recorrido al tiempo T un trayecto adicional $dv \cdot T$.

Luego todas las partículas cuyas velocidades están comprendidas entre v y $v+dv$ que atraviesan dA , estarán al tiempo T en el volumen $dv \cdot T \cdot dA$. Que es el número total de partículas que atraviesan dA al tiempo T entre T y $T+dT$.

$$= \left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^3 v^2 \frac{dv}{T} \frac{dA}{R_1^2 R_2^2} \sigma = \text{Prob. Clás. por seg. de atrar. } dA \text{ por seg.}$$

Para tener probabilidades por unidad de volumen dividimos por $dv \cdot T \cdot dA$:

$$\text{Prob. Clás. por cm}^3 \text{ y por seg.} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^3 \frac{v^2 \sigma}{T R_1^2 R_2^2}$$

Comparando con la probabilidad cuántica:

$$\sigma = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |v(q)|^2 \quad (\text{Aproximación de Born})$$

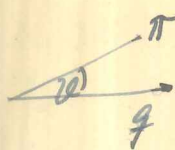
sección de choque diferencial

Es obvio que la probabilidad total debe disminuir cuando R_1 o R_2 aumentan pues entonces disminuye la probabilidad de que una partícula llegue a σ , y la probabilidad de que habiendo llegado a σ atraviese dA , respectivamente.

Aplicaciones de la fórmula.

Sea $V(r)$ un potencial central. $V(\pi) = V(r)$ no depende de la dirección.

$$v(q) = \int e^{i \frac{q \cdot \pi}{\hbar}} V(r) d^3 \pi = \int e^{i \frac{q r \cos \theta}{\hbar}} V(r) r^2 dr d(\cos \theta) d\phi$$



$$= \frac{4\pi \hbar}{q} \int_0^\infty \sin\left(\frac{q r}{\hbar}\right) V(r) r dr = v(q)$$

En este caso v no depende del vector q sino de su módulo.

Caso especial Potencial de Coulomb.

$$V(r) = \frac{Ze^2}{r}; \int_0^\infty \frac{Ze^2}{r} r \sin\left(\frac{q r}{\hbar}\right) dr = -\frac{Ze^2 \hbar}{q} \cos\left(\frac{q r}{\hbar}\right) \Big|_0^\infty$$

El coseno tomado en el infinito es 0 para los físicos.

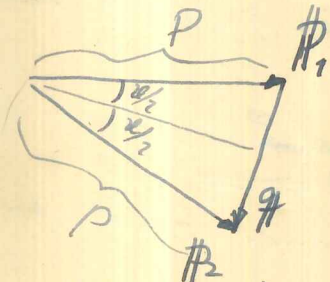
$$V(q) = \frac{4\pi Ze^2 \hbar^2}{q^2}$$

~~La sección de choque en este caso~~
El hecho de salir 0 el $\cos(\infty)$ equivale

a haber supuesto un factor $e^{-\alpha r}$ dentro de la integral, haber integrado y luego haber tomado el límite $\alpha \rightarrow 0$.
La sección de choque en este caso:

$$\sigma = \left(\frac{m}{2\pi \hbar^2}\right)^2 \frac{(4\pi Ze^2 \hbar^2)^2}{q^4} \quad \text{Le llamamos } P = mV$$

$$|q| = 2P \sin \frac{\theta}{2}$$



$$\sigma = \frac{Z^2 e^4}{4 m^2 V^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}}$$

→ potencial Coulombiano.

Observaciones (accidentes)

1) En el caso del potencial Coul. la aprox. de Born en Mecánica Cuántica da resultados exactos.

2) Es el único potencial para el cual la Mec. Clás. da el mismo resultado que la Cuántica.

Ahora se ha encontrado todavía una razón profunda para explicar estos accidentes.

Problemas

1) Sea un potencial $\begin{cases} V=0 & r > d \\ V=V_0 & r < d \end{cases}$



Determinar la sección diferencial y Total de choque.

2) Una línea tiene una carga positiva Ze y alrededor un sistema de cargas electrónicas con densidad $\rho(r)$. Demostrar:

$$v(\varphi) = \frac{4\pi h^2 e^2}{g^2} \underbrace{\left(Z - \int e^{i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}} \rho(r) d^3r \right)}_{\text{form factor}}$$

3) Podemos decir que un átomo real tiene un potencial que no es Coulombiano. Una aproximación grossera es:

$$\frac{Ze^2}{r} e^{-r/a} \quad \text{Se demuestra que } a = \frac{h^2}{m e^2 Z^{1/3}}$$

Demstrar que para ese potencial:

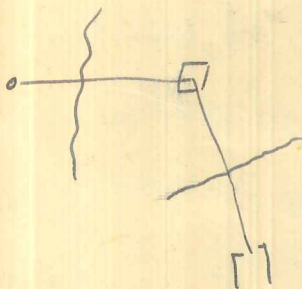
$$v(\varphi) = \frac{4\pi Z e^2 h^2}{g^2 + (h/a)^2} \quad \text{Calcular } \sigma_{\text{total}} = \int \sigma(\vartheta) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$$

Observar y describir para qué ángulos difiere esto del caso de Coulomb.

x

4)

Calcularmos de otro modo el scattering.



$$\Psi_2 = \Psi_0(2) - \frac{i}{\hbar} \int K_0(23) V(3) \Psi_0(3) d\tau_3 = \Psi_0 + \Psi_{\text{scatt.}}$$

En la aprox. de Born.

$$\Psi_2 \approx \Psi_0 - \frac{i}{\hbar} \int K_0(23) V(3) \Psi_0(3) d\tau_3$$

Consideraremos únicamente el $\Psi_{\text{scatt.}}$

$$\Psi(x_2, t_2) = -\frac{i}{\hbar} \int \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t_2 - t_3)}} e^{i \frac{m}{\hbar} (\mathbf{R} - \mathbf{r})^2 / (t_2 - t_3)} V(\mathbf{r}) \Psi_0(3) d^3\tau_3$$

$$\Psi_0(3) = e^{-i \frac{Et_3}{\hbar}} e^{i \mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{x}_3}$$

$$\Psi(x_2, t_2) = -\frac{i}{\hbar} \int \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t_2 - t_3)}} e^{i \frac{m}{\hbar} (\mathbf{R} - \mathbf{r})^2 / (t_2 - t_3)} V(\mathbf{r}) e^{-i Et_3 / \hbar} e^{i \mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{r}} d^3r dt$$

Haciendo $x = \sqrt{t_2 - t_3}$ por I_3 se llega a:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \frac{1}{2\pi\hbar^2} \int V(\mathbf{r}') e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{r}'} \frac{e^{i\sqrt{2mE} r_2}}{r_2} d^3\mathbf{r}'$$

donde $r_2 = |\mathbf{R}_2 - \mathbf{r}'|$

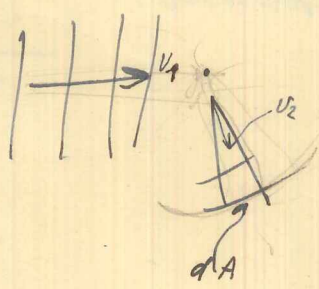
Probl. Muestra que es consistente suponer que si la partícula que entra tiene una energ. definida y el potencial no muda con el tiempo, la energía de la partícula scattered es la misma que la de la part. entrante: $\psi_0 \sim e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$; $\psi \sim e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$

Para distancias grandes. ~~entre la p^o~~ $\left. \begin{array}{l} \sqrt{2mE} = p \\ p_1^2 = p_2^2 \end{array} \right\}$

$$\psi(\mathbf{R}_2, t_2) = \frac{e^{-\frac{iEt_2}{\hbar}} e^{\frac{i p R_2}{\hbar}}}{R_2} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right) \psi(\mathbf{q}) ; \psi(\mathbf{q}) = \int V(\mathbf{r}') e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \cdot \mathbf{r}'} d^3\mathbf{r}'$$

o sea la amplitud para llegar es inversamente proporcional a R_2 .
 Veremos cual es la acción de choque
 $\frac{\text{"Prob."}}{\text{cm}^3} = |\psi|^2 = \frac{1}{R_2^2} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |\psi(\mathbf{q})|^2$

"Prob." = 1 (en el haz incidente)



La corriente = v_1

Nº de colisiones por segundo $v \cdot \sigma$

Nº de partículas que pasan por dA por segundo = $v_1 \sigma \frac{dA}{R_2^2}$

Estas partículas ocupan un volumen $v_2 dA$ luego

densidad = $\frac{\text{Nº de part}}{\text{cm}^3} = \frac{v_1}{v_2} \sigma \frac{1}{R_2^2}$ y comparando en el haz reflejado

$\sigma_T = \frac{v_2}{v_1} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |\psi(\mathbf{q})|^2$ pero $\frac{v_2}{v_1} = 1$ ya que la partícula

incidente tiene igual módulo del momento que la reflejada.

Con esta método obtenemos para σ la misma fórmula que antes.

$\psi_{\text{asympt.}} = e^{ikz} + \frac{e^{ikR}}{R} f(\theta, \varphi)$ donde $f(\theta, \varphi) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(\mathbf{r}') e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}'} d^3\mathbf{r}'$

$R = \frac{p}{\hbar}$ (El término e^{ikz} representa ψ_0); $\sigma = |f(\theta)|^2$

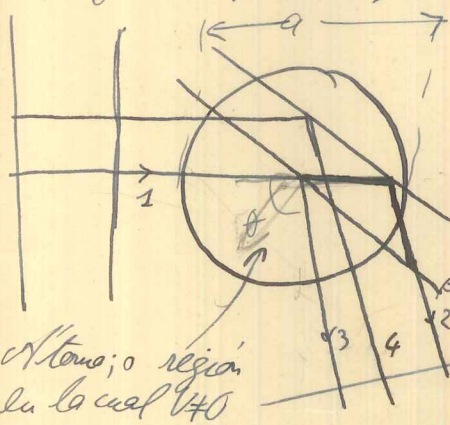
Problemas: Muestra en general (o sea no solo en la capa de Born) que la función de onda debe tener la expresión asintótica antepuesta, aunque la forma de f será bastante más difícil

(Comenzar $\psi_0 = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi_0(\mathbf{x})$; $\psi = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(\mathbf{x})$)

La fórmula
$$\Psi(R_2, t_2) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t_2} \frac{m}{2\pi \hbar^2} \int e^{\frac{i \sqrt{2m} E r_2}{\hbar}} V(r) e^{\frac{i}{\hbar} (P_2 \cdot r)} d^3 r$$

puede ser interpretado como el producto de la amplitud para que la partícula llegue (como part. libre) a π , sea espalh. (amplit. prop. a $V(r)$) y luego pronga como onda esférica hasta π_2 . O sea de cada elemento se espalha esféricamente
$$\frac{e^{i k r_2}}{r_2}$$

Una interpretación intuitiva de la distribución angular (reflejada por $V(\theta)$) es que desde la diferencia de fase con la cual llegan al receptor partícula espalhadas por distintas regiones (\pm valores de π en la integral queda $V(\theta)$), hay interferencia destruyéndose aquellas cuya diferencia de fase es $\frac{1}{2}$.



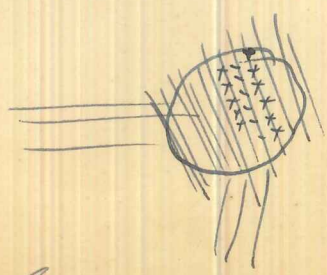
Atorno a região em la cual $V \neq 0$
 4 y 2 tienen igual fase
 3 y 2 " distintas "

Por ejemplo (ver figura) los rayos 2 y 3 provenientes de espalhamientos sobre los planos α y β se destruyen si la diferencia de caminos (parte desplazada más gruesa) es $\frac{1}{2}$. Cuanto más pequeño sea λ y más próximos estarán los planos α y β , mejores serán las series de interferencias destructivas y menor la intensidad notada por el receptor de partículas.

Por otro lado cuanto mejor será θ (entre 0 y $\pi/4$), más se acercarán los planos y menor será la intensidad de partículas. Para $\theta=0$ todos los rayos "estarán en fase" y la intensidad será máxima.

Para que haya efecto angular es evidente que λ debe ser menor que a y por lo tanto cuanto menor será λ mejor será el efecto.

Si λ es muy pequeño tendremos intensidad nula para $\theta = \pi/4$



Estos argumentos no funcionan bien para el potencial

de Coulomb; esto vale a 0 con suficiente rapidez fuera de una región; hay siempre distribución angular (variación con el ángulo).

Problema Muestra que si $\lambda \gg a$ la distribución es siempre independiente del ángulo (no vale en el caso de Bohr)

Para una columna protón-neutrón $r = 1.4 \cdot 10^{-13}$ cm

¿Qué energía se necesitan para notar en este caso una distribución angular?

Loé hay un caso en el cual aún siendo $\lambda \gg a$ hay una distribución que depende del ángulo y es el caso de la ley.

Otra demostración más intuitiva de la ecuación de Schrödinger

En primer lugar consideremos el caso de partículas libres.
 La función de onda es la amplitud total para ir a un punto (cualquiera haya sido la posición de la partícula a un tiempo previo determinado).

La amplitud para llegar de a a $t+\epsilon$ es $e^{\frac{i}{\hbar} S(\dots)}$ o más exactamente $e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon \left[\frac{x_{t+\epsilon} - x_t}{\epsilon}, \frac{x_{t+\epsilon} + x_t}{2} \right]}$

$$\Psi(x, t+\epsilon) = \frac{1}{A} \int e^{\frac{i}{\hbar} L\left(\frac{x-y}{\epsilon}, \frac{x+y}{2}, t\right)} \Psi(y, t) dy$$

Y son las coordenadas al tiempo t ; x al tiempo $t+\epsilon$.
 Para simplificar nos reducimos al caso unidimensional.

$$V=0; L = \frac{m\dot{x}^2}{2} = \frac{m}{2} \left(\frac{x-y}{\epsilon}\right)^2$$

$$\Psi(x, t+\epsilon) = \frac{1}{A} \int e^{\frac{i m}{2\hbar} \frac{(x-y)^2}{\epsilon}} \Psi(y, t) dy$$

La influencia de la mayor contribución provendrá de las cercanías $y=x$ (debemos esperar una ecuación diferencial)...

$$\Psi(x, t+\epsilon) = \frac{1}{A} \int e^{\frac{i m}{2\hbar} \frac{\eta^2}{\epsilon}} \Psi(x+\eta, t) d\eta; \eta = y-x$$

$$\Psi(x+\eta, t) = \Psi(x, t) + \eta \Psi'(x, t) + \frac{\eta^2}{2!} \Psi''(x, t) + \dots$$

$$\Psi(x, t+\epsilon) = \frac{1}{A} \int e^{\frac{i m \eta^2}{2\hbar \epsilon}} \left[\Psi(x, t) + \eta \Psi' + \frac{\eta^2}{2!} \Psi'' + \dots \right] d\eta$$

El término lineal en η se anula por ser impar.

Podemos usar las fórmulas:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}; \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} x^2 dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha^{3/2}} = \frac{1}{2\alpha} \left(\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\right)$$

A nosotros queremos considerar términos de orden ϵ e los sumos.
 Se ve que el término en η^2 se resuelve con la segunda integral y aparte del factor $\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ es de orden ϵ pues α es de orden $\frac{1}{\epsilon}$. El término siguiente, en η^3 aparte del factor $\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ contendría un término en ϵ^2 que despreciamos, etc.

Luego:

$$\Psi(x, t+\epsilon) = \frac{\sqrt{-2\pi i \hbar \epsilon}}{i m} \left[\Psi(x, t) + 0 + \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{2\hbar \epsilon}{-i m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} \right];$$

elegimos como Ψ otra vez $\Psi = A = \sqrt{-2\pi i \hbar \epsilon}$ y deducimos $\left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right]$

Si ahora tenemos un potencial V , $L = T - V$, en la integral que nos daba $\Psi(x, t + \epsilon)$ debemos agregar el factor $e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} V(\frac{x+y}{2})}$ que desarrollado hasta la primera potencia de ϵ es $(1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V)$. Ahora bien $1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(\frac{x+y}{2}) \approx 1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x)$ ya que x e y son muy próximos. Luego ese factor no interviene en el cálculo de las integraciones y desarrollos en serie y hacemos lo mismo que antes llegamos a:

$$\Psi(x, t + \epsilon) = \left[\Psi(x, t) - \frac{\hbar\epsilon}{2im} \frac{d^2\Psi}{dx^2} \right] \left[1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x) \right] =$$

$$\Psi(x, t) - \frac{\hbar\epsilon}{2im} \frac{d^2\Psi}{dx^2} - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x) \Psi(x, t) \therefore$$

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

Problema Si $L = \frac{mv^2}{2} + \frac{e}{c} \nabla \cdot \mathbf{A}(x, y, z, t) - e\phi(x, y, z, t)$

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}; \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$$

mostrar usando el mismo método

$$\boxed{-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi + e\phi \Psi}$$

símbolo para recordar que significa:

$$\equiv -\hbar^2 \nabla^2 - \frac{\hbar}{i} \frac{e}{c} \nabla \cdot (\mathbf{A} \Psi) - \frac{\hbar}{i} \frac{e}{c} \mathbf{A} \cdot \nabla \Psi + \frac{e^2}{c^2} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}) \Psi$$

Esa ecuación no funciona para el electrón pues hay términos del mismo orden debido al spin que no se han tomado en cuenta, pero tal vez funcione para algunas partículas sin spin como el mesón π (creo que dije esto último).

Observaciones sobre la ecuación de Schrödinger

1) La mudanza de Ψ con t se puede interpretar, observando la ecuación de Schr., como debida a dos contribuciones: scattering por potencial $(-\frac{i}{\hbar} V dt)$; variación por el propio movimiento libre natural $(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi)$

2) Regla mnemotécnica

Para recordar la ecuación de Schrödinger se escribe:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi; \quad H = \frac{p^2}{2m} + V; \quad \frac{\hbar}{i} p = \hbar \nabla \quad \text{Esto sólo fun}$$

no es igual a $(\nabla \cdot \nabla)$ donde ∇ es el vector $\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}$.

cióna para coordenadas rectangulares. Para polares, no. Tampoco sirve en el caso relativista.

$$E = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2}; \text{ o } -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \sqrt{m^2 c^4 + \hbar^2 c^2 \nabla^2} \Psi$$

ii) Todavía nadie sabe lo que significa ese operador !!

Propiedades

1) $P(x,t) = \Psi^*(x,t) \Psi(x,t)$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^* + V \Psi^*$$

2) Queremos encontrar un vector $S(x;t)$ tal que $S_n \equiv$ Prob/seg cm^2 que una partícula vaya de izq. a der. - Prob/seg cm^2 que una " " " der. a izq.

Para que haya conservación debe cumplirse:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \nabla \cdot S; \text{ Esa función existe y es:}$$

$$S(x;t) = \frac{\hbar}{2im} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \text{ Mostrar.}$$

3) ~~Para~~ Se tiene) para un cierto volumen del espacio rodeado por una superficie $\frac{d}{dt} \int P dVol = \int S \cdot N d\text{superf.}$



N es la normal a la superficie. Si el Ψ es importancia solo para una limitada región del espacio

$$\int P dVol = \text{const.} \text{ Por conveniencia elígese}$$

$$\int P dVol = 1 \text{ Condición de normalización.}$$

Algunas veces no puede decirse, por ejemplo en el caso de la partícula libre:

$$\Psi = c e^{-\frac{iEt}{\hbar}} e^{i p x / \hbar}$$

4) Como la ecuación de Schrödinger es lineal, si Ψ_1, Ψ_2 son soluciones, $a\Psi_1 + b\Psi_2$ será también solución. Si Ψ_1 representa un estado posible del sistema y Ψ_2 otro estado posible, la superposición es otro estado posible.

5) Caso en que $V(R,t) = V(R); \Psi(R,t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \Psi(R)$

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(R) \Psi; \Psi = f(t) \Psi(R)$$

$$E\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi = H\psi$$

$$\text{Prob} = |\psi|^2 = |\psi(\mathbb{R})|^2$$

$$\text{Una solución es } \psi_1 = e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} \psi_1(\mathbb{R})$$

$$\psi_2 = e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t} \psi_2(\mathbb{R})$$

Si esos son los dos estados posibles para hallar la pro-

babilidad tenemos $|c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2|^2$

Para estado estacionario en que el potencial no de-
pende del tiempo $\boxed{E\psi = H\psi}$

Resolveremos la ecuación de Sch. para una part. a 1 dimensión
con energía definida. En sist. a 1 dimensión no existen
pero se entienden en ellos las ideas físicas y son de más sim-
ple resolución.

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x) \psi \quad (\text{Estado estacionario})$$

1) Partícula libre

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

Lo tomáramos $\psi = A e^{kx}$; $E = -\frac{\hbar^2}{2m} k^2$, la probabilidad

relativa de hallarla en algún lugar $|\psi|^2 = |A|^2 e^{2kx}$ crecería
al aumentar la distancia. Esto podría ser si muy lejos

($x \rightarrow \infty$) tendríamos un potencial que justifique ese aumento
de probabilidad; pero en el caso de la partícula absoluta-
mente libre, esa solución no puede existir.

Si hacemos $\psi = A e^{ikx}$ $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

probab. $|\psi|^2 = |A|^2 = \text{cte}$.

Esta función de onda representa una partícula que va de
derecha a izquierda, para verlo Otra manera de verlo es escribir la función de onda completa $\psi = A e^{-\frac{iEt}{\hbar} + ikx}$ que representa una onda que va de izq. a derecha.

$$J_x = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \frac{\hbar k}{m} |\psi|^2 = \frac{\hbar k}{m} |A|^2$$

y la velocidad de traslación sería $\frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}$, equivalente a la
velocidad clásica.

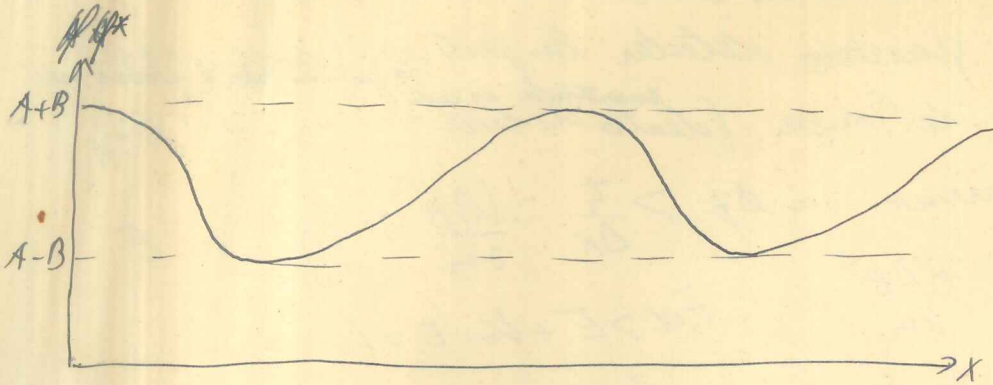
Para una partícula que va de derecha a izquierda
habrá que tomar $\psi = B e^{-ikx}$

Cuando para una energía E , existe más de una solución
diremos que la soluc. es degenerada

La soluc. para energía E es $\psi = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$

$$\psi \psi^* = |A|^2 + |B|^2 + A^* B e^{-2ikx} + B^* A e^{2ikx} \quad \text{y si } A, B \text{ son reales}$$

$$\text{reales} \quad \psi \psi^* = A^2 + B^2 + 2AB \cos kx$$

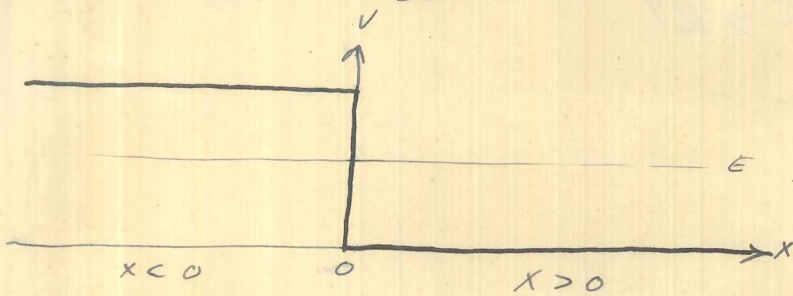


Se demuestra $S = \frac{\hbar^2}{m} (|A|^2 - |B|^2)$

Es evidente que S debe ser indep. de x
 ya que en caso contrario habría
 regiones de las cuales sale más flujo
 del que entra (o viceversa) y con ello varía
 la densidad ^{con el tpo.} en dicha región, no siendo
 con ello estacionario el fenómeno

La idea que la probabilidad muda con la distancia es extraña,
 lo que pasa es que no se suman la probab. de las dos alternativas
 (para hallar la partic. \leftarrow o la \rightarrow) sino las respectivas amplitudes.

2º) Estudiaremos el caso



$x > 0: -\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + 0\psi = E\psi \Rightarrow \psi = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$

$x < 0: -\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V_0\psi = E\psi \Rightarrow \psi = C e^{-Kx} + D e^{Kx}$

donde $K = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}$

Por lo pronto $C=0$ para que la probab. no crezca indefinidamente con
 la distancia. Para determinar las otras constantes, imponemos

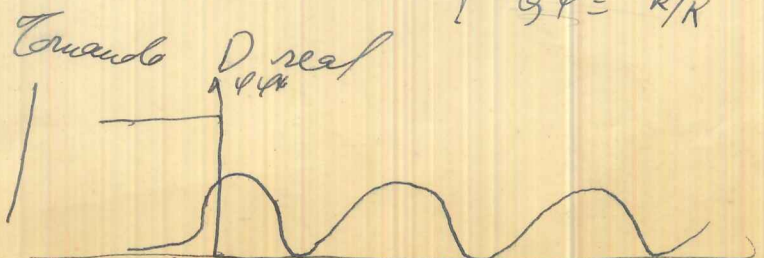
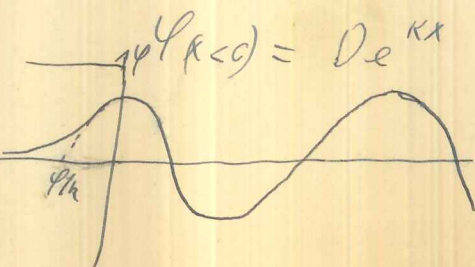
que ψ y ψ' sean continuas en el origen. De este modo?

ψ será continua (—), ψ' tendrá la forma \lrcorner , y ψ'' \lrcorner de
 tal modo que la discontinuidad de ψ'' podrá eliminarse en la
 ecuación de Schr. con la discant. de V.

$\psi_c \Rightarrow A+B=D$; $\psi'_{cont} \Rightarrow ikA - ikB = KD$

En resumida cuenta tenemos 2 ecuac. con 3 incogn., luego podemos
 expresar ^{dos de} todas ellas en función de la otra que queda como constan-
 te arbitraria. $A = \frac{D}{2} (1 - \frac{iK}{k})$; $B = \frac{D}{2} (1 + \frac{iK}{k})$; $|A|^2 = |B|^2$

$\psi(x > 0) = D \cos kx + \frac{K}{k} D \sin kx = F \sin(kx + \phi)$ | $F = D \sqrt{1 + \frac{K^2}{k^2}}$
 $\tan \phi = k/K$

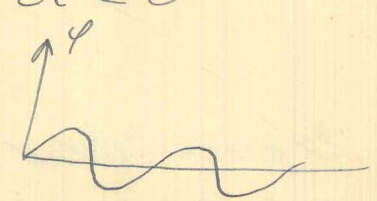


¿Qué pasa con la energía de las partículas que encuentran a la izquierda y la izquierda del origen? Parecerían tener una energía cinética negativa. Lo que pasa es que si queremos detectar la partícula ^{encontrada es en el} ~~tenemos que~~ ^{ya que más lejos de probar de} buscarla muy cerca del origen (dentro de una distancia $\Delta x \approx \frac{1}{k}$):

al ~~medir~~ introducimos un $\Delta p > \frac{\hbar}{\Delta x} \therefore \frac{(\Delta p)^2}{2m} > \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = V_0 - E$
 o sea $E_{despido} > E_{antes} + \frac{(\Delta p)^2}{2m}$; $\bar{E} > E + V_0 - E = V_0$

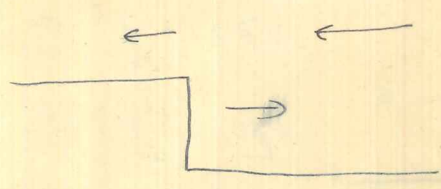
o sea al detectar la partícula la hallamos con energía cinética positiva; milagro, no la medimos ^{no} ~~ella~~ ^{se} sabemos donde está y hay cierta probab que tenga $E_c < 0$

$\lim_{V_0 \rightarrow \infty} \psi(0) \rightarrow 0$



Problemas

¿Qué pasa si $E > V_0$?



must solve the simult. eqs.

$\sqrt{\frac{E}{V_0}} = \sin \varphi$
 $ka + 2\varphi = n\pi$

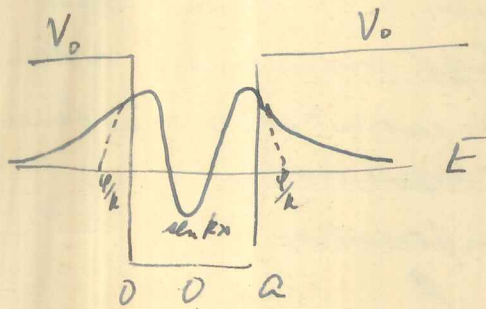
$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$; $ka + 2\varphi = n\pi$

dividing:

$\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} a = \frac{n\pi - 2\varphi}{\sin \varphi} \therefore \sin \varphi = \frac{n\pi - 2\varphi}{\gamma}$

$\gamma = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} a$ For each n , this determines φ .

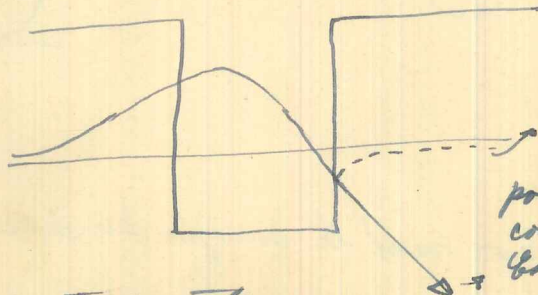
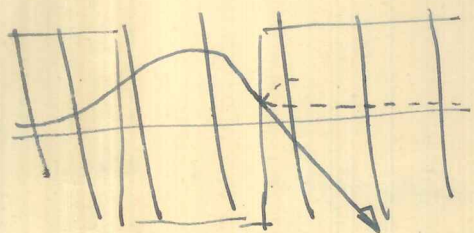
Una característica esencial en los problemas estacionarios de Schrödinger es que la energía sólo puede tomar ciertos valores especiales para que el problema se satisfaga. Veamos un ejemplo.



En la primera parte oscilada exponencialmente, se comporta luego como $\sin kx$ y luego decae exponencialmente.

En Mec. Clásica, en general, la energía puede tomar cualquier valor, eventualmente, en función de una constante. Si elegimos ~~de~~ otro ~~manera~~ valor de la energía en el mismo

problema cuántico puede ser que ~~no~~ ^{no} tengamos solución. Por ejemplo ~~en~~ ^{basados} la energía:

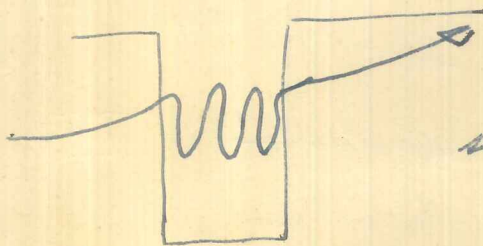


Esta solución no puede ser tomada por cuestiones de continuidad. Esta solución no sirve.

Puede ser que ~~al~~ ^{al} ~~de~~ ^{de} ~~la~~ ^{la} ~~energía~~ ^{energía} tampoco tengamos solución:

La mudanza de fase está dada por $ka + 2\phi = n\pi$.

Y tenemos $\tan \phi = \frac{k}{K}$; $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$; $K = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}$



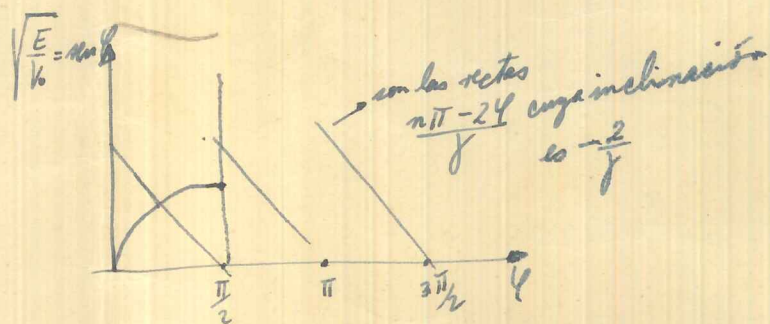
$$\sin \phi = \frac{k}{K} = \frac{\sqrt{\frac{E}{V_0 - E}}}{\sqrt{1 + \frac{E}{V_0 - E}}} = \sqrt{\frac{E}{V_0}} = \sin \phi$$

$$ka + 2\phi = n\pi$$

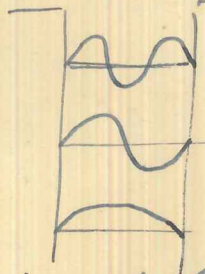
$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$ Definimos $\gamma = \sqrt{\frac{E}{V_0}} = \frac{ka}{\gamma} \therefore \gamma = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} a$. Nuestra ecuación

$ka + 2\phi = n\pi$ queda: $\gamma \sin \phi + 2\phi = n\pi \therefore \sin \phi = \frac{n\pi - 2\phi}{\gamma}$

Resolvemos esta ecuación gráficamente.



Para $V_0 \rightarrow \infty$ $\sin \phi = \sqrt{\frac{E}{V_0}} = 0 \therefore \phi = 0$



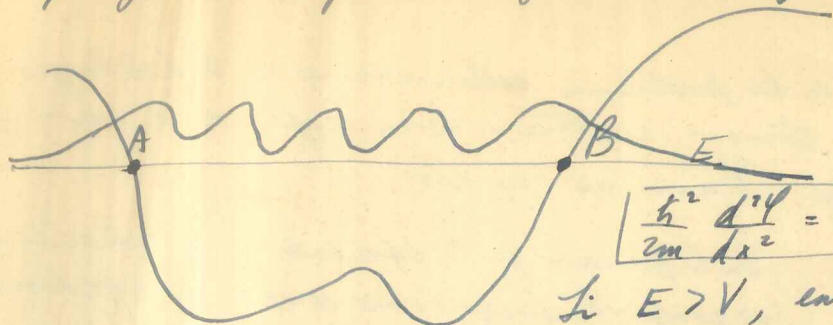
$\phi = 0$. Aumentando la energía crece la frecuencia.

Cuando $V_0 \rightarrow 0$, $\gamma \rightarrow 0 \therefore$ las inclinaciones de las rectas tienden a ∞ .

En el gráfico sólo consideramos el uno en el primer cuadrante. La solución $\phi = 0$ no tiene sentido físico, salvo en el caso en que $V_0 = \infty$, en cuyo caso todas las rectas dibujadas se confunden con el eje ϕ . Para $V_0 = 0$, las rectas tienen ~~de~~ inclinación ∞ y hay una solución $\sin \phi = \frac{n\pi}{2}$. En una dimensión hay siempre niveles energéticos. En 3 dimensiones puede no haberlos.

Supongamos un potencial general.

Clásicamente la partícula solo podría andar entre A y B.



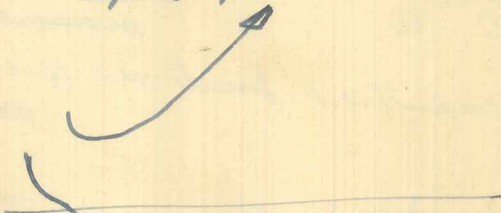
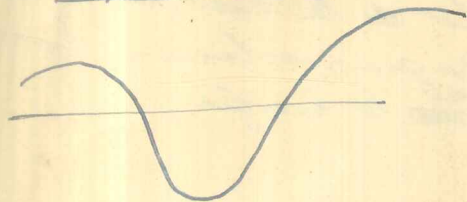
$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = -(E-V)\psi$$

Si $E > V$, entonces ψ'' y ψ tienen signo opuesto: las curvas ψ resultantes son de tipo sinusoidal es decir cóncavas hacia el eje.

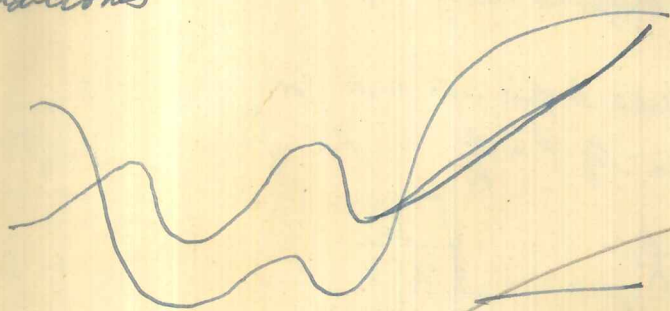
Si $E < V$, las curvas ψ son convexas hacia el eje, tipo exponencial.

tipo sinusoidal

tipo exponencial



Si elegimos mal la energía puede ser que no satisficamos las dos condiciones



(y luego es buena la WKB)
 Estas desig. se cumplen si p es grande y tanto p como p' varían poco en una longitud de onda lo que equiv. a decir que $|E-V(x)|$ es grande y V y V' varían poco en λ

Una manera de ver la aprox. de WKB es: Si $V = \text{cte}$ sería indicado decir $\sigma = \int \sqrt{2m(E-V_0)} dy$ si V no es una constante (pero lent. variable)

podríamos $\sigma = \sigma_0 + \delta\sigma$ de $\sigma_0 = \int \sqrt{2m(E-V_0)} dy$ (Hacia donde es pequeño)

Reempl. en $\frac{1}{2m} \left(\frac{d\sigma}{dx}\right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\sigma}{dx^2} = E - V(x)$ tendríamos

$$\frac{\hbar^2}{m} \frac{d\sigma_0}{dx} \frac{d\delta\sigma}{dx} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\sigma_0}{dx^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d\delta\sigma}{dx}\right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\delta\sigma}{dx^2} = 0$$

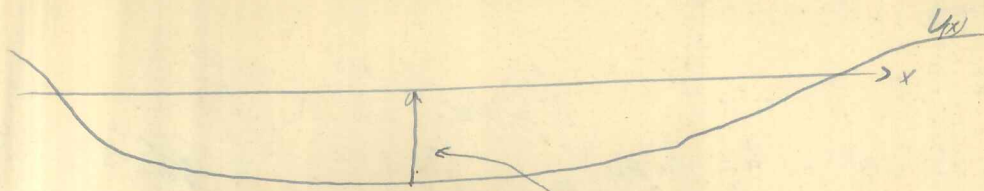
Al despreciar los últimos dos términos se obtiene $\sigma_1 \approx \int \hbar p(x)$, pero para despreciarlos debe cumplirse $\hbar \frac{d\sigma_1}{dx} \ll \frac{d\sigma_0}{dx}$ y $\hbar \frac{d^2\sigma_1}{dx^2} \ll \frac{d^2\sigma_0}{dx^2}$

Reempl. la relación σ_0 y σ_1 se obtiene

$$\hbar \frac{p''}{p'} - \frac{\hbar^2}{p} \frac{p'''}{p''} = \frac{p'(x+N) - p'(x)}{p''(x)} - \frac{\hbar}{p} \ll 1$$

$$\frac{\hbar}{p} p' \ll p \implies \hbar \frac{p'}{p} = \frac{p(x+N) - p(x)}{p} \ll 1$$

Queremos ahora ordenar la ecuación de un caso canónico.
 Si tuviéramos un potencial del tipo de la figura



podríamos esperar que ^{cuando} $V(x)$ la partícula estaría cerca
 por un momento $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$ y $\psi \approx e^{\frac{i}{\hbar} p(x) \cdot x}$

Veremos que esto será válido cuando V varíe poco en
 una longitud de onda.

Procederemos en forma un poco más general, escribiendo

$\psi = e^{\frac{i}{\hbar} \sigma(x)}$ tendremos que ψ estará definido por

$$\frac{\sigma(x+\lambda)}{\hbar} = \frac{\sigma(x)}{\hbar} + 2\pi \quad \therefore \quad \frac{\sigma(x+\lambda) - \sigma(x)}{\hbar \lambda} = \frac{2\pi}{\lambda} \approx \frac{1}{\lambda} \frac{d\sigma(x)}{dx}$$

o sea $\frac{d\sigma}{dx} = \frac{\hbar}{\lambda} = p$

(Esto es un poco más general que la forma $\psi = A e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x}$ que
 involucra decir $\frac{\sigma}{x} = p$ en lugar de $\frac{d\sigma}{dx} = p$)

Tendríamos $\sigma(x) = \int^x \sqrt{2m(E - V(y))} dy$

si adaptamos la forma clásica de p .

*Alina, como en
 que p debe ser
 lent. var*

Conjugaremos $\psi = e^{\frac{i}{\hbar} \sigma(x)}$ con la idea que σ es gran
 pero lentamente variable.

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{i}{\hbar} \frac{d\sigma}{dx} e^{\frac{i}{\hbar} \sigma} \quad ; \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{i}{\hbar} \frac{d^2\sigma}{dx^2} e^{\frac{i}{\hbar} \sigma} - \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{d\sigma}{dx}\right)^2 e^{\frac{i}{\hbar} \sigma}$$

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{d\sigma}{dx}\right)^2 - \frac{i}{\hbar} \frac{d^2\sigma}{dx^2} = (E - V(x))$$

si suponemos \hbar mucho menor que las demás cosas $\left\{ \frac{d^2\sigma}{dx^2}, \frac{d\sigma}{dx} \right\}$
 podemos $\sigma = \sigma_0 + \hbar \sigma_1 + \hbar^2 \sigma_2 + \dots$

en la anterior ecuación y no considerando los términos que contienen
 \hbar tendremos en 1^{er} aprox. $\frac{1}{2m} \left(\frac{d\sigma_0}{dx}\right)^2 = E - V(x)$

Substituyendo nuevamente $\sigma = E \hbar^{\nu} \sigma_0$ en $\frac{1}{2m} \left(\frac{d\sigma}{dx}\right)^2 - \frac{i}{\hbar} \frac{d^2\sigma}{dx^2} = E - V(x)$
 y despreciando los cuadrados y potencias superiores de \hbar

... = x ...

tiene $\frac{\hbar}{m} \frac{d\sigma_0}{dx} \frac{d\sigma_1}{dx} - \frac{i\hbar}{2m} \frac{d^2\sigma_0}{dx^2} = 0 \dots$

$\frac{d\sigma_1}{dx} = \frac{i}{2} \frac{d(\frac{d\sigma_0}{dx})}{\frac{d\sigma_0}{dx}} \therefore \sigma_1 = \frac{i}{2} \ln(p(x) \dots)$ (que no interesa)

de llamamos $p(x) = \frac{d\sigma_0}{dx}$

substituyendo $\sigma = \sigma_0 + \hbar\sigma$ (Aprox. W.K.B.)

$\psi = A e^{\frac{i}{\hbar} (\sigma_0(x) + \hbar \frac{i}{2} \ln p(x))} = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} e^{i \int \sqrt{2m(E-V(x))} dx}$
 $= \frac{A}{\sqrt{2m(E-V(x))}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int \sqrt{2m(E-V(y))} dy\right]$
 $= \frac{A}{\sqrt{p}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int p(y) dy\right]$

(que hace $\frac{d\sigma_0}{dx} = \sqrt{2m(E-V(x))}$
o sea admite la igualdad $\frac{d\sigma_0}{dx} = p$ en 1ª aprox.)

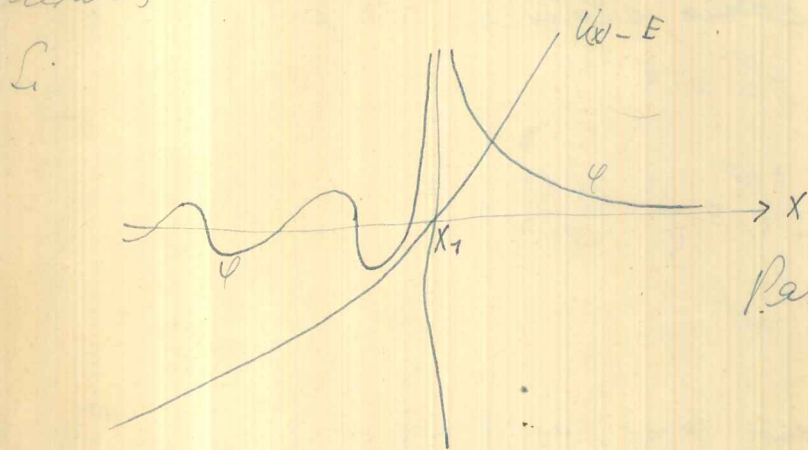
Con dos soluciones: provenientes de $\pm \sqrt{\dots}$ o sea

$e^{+i \int \sqrt{\dots}} \text{ y } e^{-i \int \sqrt{\dots}}$ y en genl. habrá que considerar una combinación lineal

$|\psi|^2 = \frac{A^2 dx}{p(x)} \approx \frac{dx}{v(x)}$ cosa lógica cláricamente (ver un expli.)

Para que sea aplicable la aprox. W.K.B el factor $\frac{A}{\sqrt{\dots}}$ no debe variar mucho en una longitud de onda.

Si $E > V(x)$ obtiene una función oscilatoria y si $E < V(x)$ puede obtenerse una exponencial con convenientes combinaciones lineales de las dos soluciones,



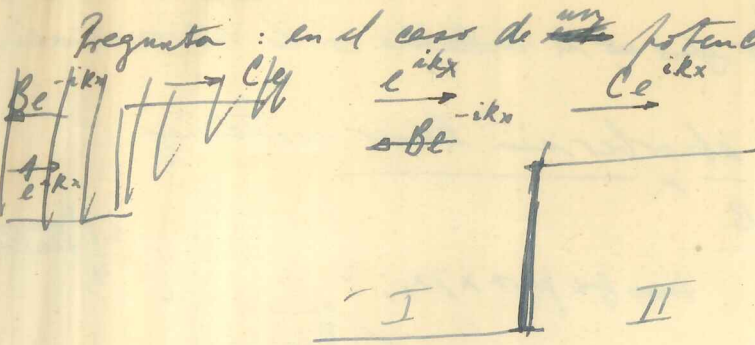
Si W.K.B. no funciona en $x = x_1$; allí $E = V$ y sería $\psi = 0$. Coincide con lo que demostró.

Para $x > x_1$
 $\psi = \frac{A}{\sqrt{2m(E-V)}} \exp\left[-\int_{x_1}^x \sqrt{2m(V(y)-E)} dy\right]$

Si $x < x_1$
 $\psi = \frac{A}{\sqrt{2m(E-V)}} 2 \cos \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} \sqrt{2m(E-V(y))} dy + \frac{\pi}{4}$

Problemas: mostrar porque aparece el $\frac{\pi}{4}$

En el caso particular $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + kx\psi = 0$ (debe ser = E)
 Puede resolverse exact. y de la solución de Benard 13. Ver que para x grande la relación se acerca bastante a la W.K.B. (no seguro).



Frecuencia: en el caso de ~~un~~ potencial como este, si definimos el coeficiente de reflexión como $|B|^2$ y el de transmisión como $|C|^2$, no se obtiene igualdad. Esto se debe a que el coeficiente de reflexión y el de transmisión deben medir las energías que pasan por cm^2 y por segundo y no la probabilidad de encontrarse en una región. En la zona II tendremos una velocidad $v_2 < v_1$. Las energías reflejadas y transmitidas serán respectivamente $|B|^2 v_1$ y $|C|^2 v_2$ y esto debe ser igual, es decir $|B|^2 v_1 = |C|^2 v_2$.

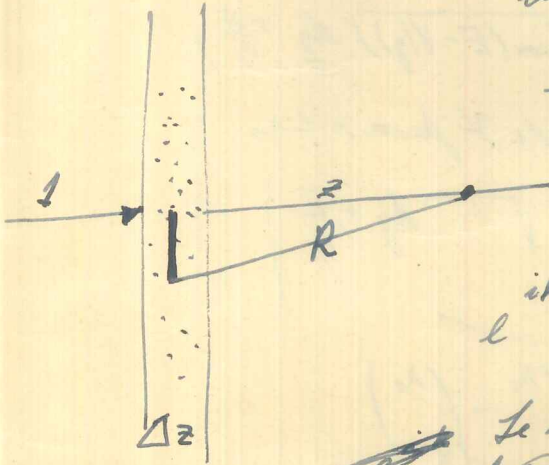
~~aparentemente el coeficiente de reflexión~~

medir las energías que pasan por cm^2 y por segundo y no la probabilidad de encontrarse en una región. En la zona II tendremos una velocidad $v_2 < v_1$. Las energías reflejadas y transmitidas serán respectivamente $|B|^2 v_1$ y $|C|^2 v_2$ y esto debe ser igual, es decir $|B|^2 v_1 = |C|^2 v_2$.

Ejemplo de cálculo aparte

Tendremos una solución de la forma:

$$\frac{e^{ikr}}{r} f(\theta) + e^{ikz}; \quad f(\theta) \rightarrow f(0)$$



La amplitud que llega directamente por cm^3 será: n^2 de est. por cm^3

$$e^{ikz} + \int \frac{e^{ikR}}{R} f(0) N \Delta z 2\pi p dp$$

Se supone que todas las deflexiones son casi de ángulo 0 de modo que en lugar de $f(\theta)$ tenemos $f(0)$.

tenemos $f(0)$;

$$= e^{ikz} + 2\pi N \Delta z f(0) \int \frac{e^{ik\sqrt{p^2+z^2}}}{\sqrt{p^2+z^2}} p dp = e^{ikz} \left(1 - \frac{2\pi N(\Delta z) f(0)}{ik} \right)$$

Podemos siempre imaginar que $f(\theta)$ decrece rápidamente al aumentar θ o que la densidad de la materia de la capa decrece al alejarnos del punto de incidencia. También se ha supuesto que Δz es muy grande frente a la distancia interatómica y muy pequeño frente a la longitud de onda de la partícula incidente de modo que todos los átomos que están a una distancia p contribuyen igualmente al scattering.

Podemos imaginar que esta materia tiene un índice de refracción n . $\lambda_{mat} = \lambda/n$; $\lambda_{vac} = \lambda = \frac{v}{k}$; $e^{i\frac{\Delta z}{\lambda_{mat}}}$ es la retardación = $e^{i\frac{n\Delta z}{\lambda}}$. Si no hay materia tendremos $e^{i\frac{\Delta z}{\lambda}}$, la relación será $e^{i\frac{\Delta z}{\lambda}(n-1)}$. Tendremos $e^{ikz} + e^{ikz} \left(1 + ik(\Delta z)(n-1) \right) = e^{ikz} \left(1 - \frac{2\pi N(\Delta z) f(0)}{ik} \right)$

este $f(0)$ en general no es real. Si n es complejo representa un decrecimiento de la amplitud (absorción).

$$\therefore (n-1) = \frac{2\pi N f(0)}{k^2}$$

$$\text{absorción por cm} = k \frac{2\pi N}{k^2} I(f(0))$$

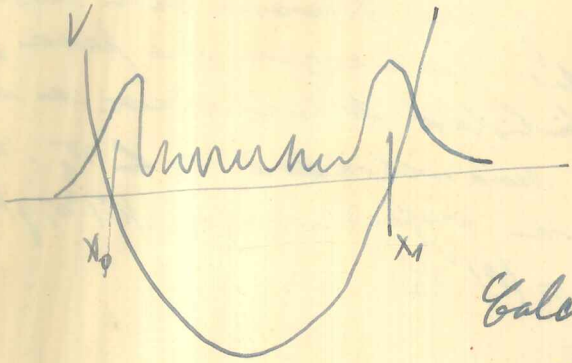
La amplitud que va a fuera: $\left[\frac{2m(E-V)}{\hbar^2} \right]$

$\int |F(x)|^2 dx = 2\pi \text{Im} F(0)$ $F(x)$ es de orden primero del potencial; $|F(x)|^2$ es de segundo orden en V (es por eso que no se entendía con la aproximación de Born).

No hay materia que pueda absorber sin hacer scattering.

Seguimos con el método W.K.B

Vimos que para $x > x_1$; $\psi = \frac{A^{(real)}}{\sqrt{2m(E-V)}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x \sqrt{2m(V-E)} dy}$
 no importa que sea superposición.



$x < x_1$; $\psi = \frac{2A}{\sqrt{2m(E-V)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} \sqrt{2m(E-V)} dy + \frac{\pi}{4}\right)$

Calculando exactamente por el mismo método

para $x < x_0$: $\psi = \frac{A'}{\sqrt{2m(V-E)}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} \sqrt{2m(V-E)} dy}$

para $x > x_0$: $\psi = \frac{2A'}{\sqrt{2m(E-V)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{2m(E-V(y))} dy + \frac{\pi}{4}\right)$

Ahora bien, ψ para $x > x_0$ debe ser igual a ψ para $x < x_1$.

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{\dots} dy + \frac{\pi}{4} = n\pi + \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{\dots} dy + \frac{\pi}{4} \right)$$

$$\checkmark = \pm \left(\int_{x_0}^{x_1} - \int_x^{x_1} \right)$$

Una $A = A'$ y que para
 iguales en x_0 , los
 que igual los x_1 y los
 amplitudes

Lo tomamos el signo + habría algo incomprendible por un lado quedaría una función de x igual a una constante. Tomando el signo - se va la función de x y así puede determinarse n . Queda:

$$\int_{x_0}^{x_1} \sqrt{2m(E-V(y))} dy = (n - \frac{1}{2}) \pi \hbar \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Conviene observar que para deducir esta fórmula hemos ~~impuesto~~ usado $\cos(n\pi - \alpha) = \cos \alpha$ (esto es cierto si n es par). Si n es impar tendríamos $\cos(n\pi - \alpha) = -\cos \alpha$; esto se arregla inmediatamente diciendo que si n es par, $A' = A$; y si n es impar $A' = -A$, llegándose siempre a la fórmula dada.

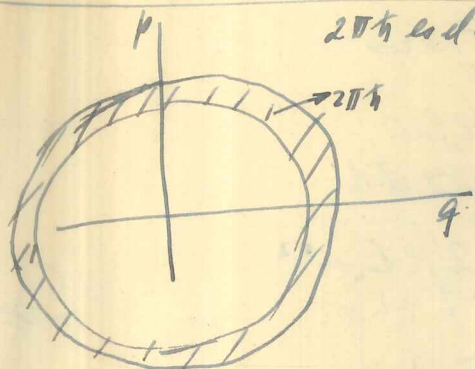
La fórmula recuadrada de un método aproximado para determinar los autovalores de energía: ~~tentando~~ diferentes E y viendo si se satisface. Ya Sommerfeld tenía una fórmula para determinar E . Esa fórmula es exacta para el oscilador armónico y para el átomo de hidrógeno si olvidamos el $1/2$. Pero la autofunción no es exacta para el oscilador armónico. Este método es en general bueno si el número de oscilaciones de la autofunción es grande. En el dibujo representativo del potencial, el W.K.B. da bien la función de onda por el centro pero no usa de los estados n_0 y n_1 .

La fórmula obtenida puede escribirse en la forma:

$$\oint p dq = 2\pi\hbar \left(n - \frac{1}{2}\right)$$

Área en el espacio de las fases.

Si el número de oscilaciones es muy grande, en una aproximación semi-clásica podemos decir cuantos estados hay en un área.



$2\pi\hbar$ es el área entre dos estados.

Problema: Resolver el caso con $V = -\frac{e}{|x|}$;

$\psi \rightarrow 0$ como x para $x \rightarrow 0$.

Hallar E_n y comparar con N.K.B.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi\right) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial\psi}{\partial t}; \text{ Ves indep. de } t.$$

$$H\psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial\psi}{\partial t}$$

Una solución especial es $= e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \psi_n(x)$

$$H\psi_n = E_n \psi_n$$

La solución general es una combinación lineal de soluciones especiales.

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$$

Algunas veces E es continua y el símbolo se reemplaza por una integral.

$$P(x,t) = \sum_n \sum_m c_n^* c_m \psi_n^*(x) \psi_m(x) e^{i(E_n - E_m) \frac{t}{\hbar}}$$

La probabilidad muda con el tiempo y tiene frecuencia dada por diferencia de energías (es independiente de una constante absoluta).

$$\int P(x,t) dx = 1 = \sum_n \sum_m c_n^* c_m e^{\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m)t} \int \psi_n^* \psi_m dx$$

¿Cómo puede ser que el miembro izquierdo sea constante (=1) y el derecho dependa del tiempo? Se tiene:

$$\int \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = 0 \quad \text{si } m \neq n \quad \rightarrow \text{Ley de ortogonalidad (suma ley)}$$

$$\int P(x,t) dx = \sum_n c_n^* c_n \int \psi_n^* \psi_n dx = \sum_n c_n^* c_n$$

Por conveniencia se toma $\int \psi_n^* \psi_n dx = 1$ \rightarrow Normalización (Conveniencia).

Interpretación: $|c_n|^2$ es la probabilidad que el sistema tenga energía E_n .

$$P(x,t) = \sum_n c_n^* c_n \psi_n^*(x) \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n - E_n)t}$$

Supondremos que la energía notiene relaciones con la frecuencia del movimiento clásico pero que la diferencia de energías ($E_n - E_m$) tiene relaciones con ella (p.ej. un múltiplo de ella) $\frac{1}{\hbar} (E_n - E_m) \approx \omega$ cuando n es muy grande.

p.ej. en el oscil. armón.

$$E_n = h\nu_0 \left(n + \frac{1}{2}\right), \text{ o sea en este caso } \frac{1}{h}(E_{n+1} - E_n) = \nu_0$$

es exacta

En el caso de pozo de potencial

infinito $E_n = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$, el período clá-
sico sería $\frac{2a}{v} \therefore \omega = \frac{2\pi v}{2a} = \frac{\pi}{a} \sqrt{2E_n}$

pero $\frac{E_{n+1} - E_n}{h} = \frac{h^2 \pi^2}{2m a^2} (2n+1) \approx \frac{h^2 \pi^2}{2m a^2} 2\sqrt{2E_n} \frac{1}{h} = \frac{\pi}{a} \sqrt{\frac{2E_n}{m}}$

Problemas: Muestran $\frac{1}{h}(E_{n+1} - E_n) \approx \omega$ en general si se determinan las E con W.K.B. la serie es creciente $E_{n+1} - E_n \ll E_n - E_{n-1}$

Problemas si $\bar{x}(t) = \int x \psi^* \psi dx$ mostrar $\ddot{\bar{x}} = -\omega_0 \bar{x}$ para el oscil. armónico

$$\psi = \sum c_n \psi_n(x) e^{-\frac{i}{h} E_n t} \quad \int \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \delta_{nm}$$

Las c_n no pueden ser obtenidas a partir del hamilt. sola-
mente. Calcularemos las c_n a partir de la condición

para $t=0$: $\psi(x,0) = f(x)$

$$f(x) = \sum c_n \psi_n(x) \therefore c_n = \int f(x) \psi_n^*(x) dx$$

Teor. $\delta(x-y) = \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(y)$

Dem. $\int \sum_n \psi_n^*(x) \psi_n(y) f(x) dx = \sum_n c_n \psi_n^*(y) = f(y) = \int \delta(x-y) f(x) dx$

Después de algún tiempo

$$\psi(x,t) = \sum c_n \psi_n(x) e^{-\frac{i}{h} E_n t} = \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(y) f(y) e^{-\frac{i}{h} E_n t}$$

pero $\psi(x,t) = \int K(x,t; y,0) f(y) dy$ \therefore si H no depende del

tiempo $K(x_2) = \sum_n \psi_n(x_2) \psi_n^*(x_1) e^{-\frac{i}{h} E_n (t_2 - t_1)}$ para $t_2 > t_1$
= 0 para $t_2 < t_1$

Problemas. Verifican $\left(-\frac{h}{i} \frac{\partial}{\partial t_2} - H_2\right) K(x_2, t_2; x_1, t_1) = \delta(x_2 - x_1) \delta(t_2 - t_1)$

Las ideas centrales de la interpretación de la fórm. anterior (1) no

son: 1) $\psi_n(x)$ = amplitud de estar en x si la energía es E_n (al instante $t=0$)

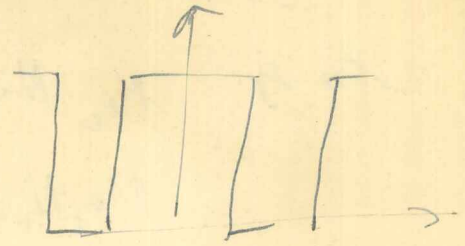
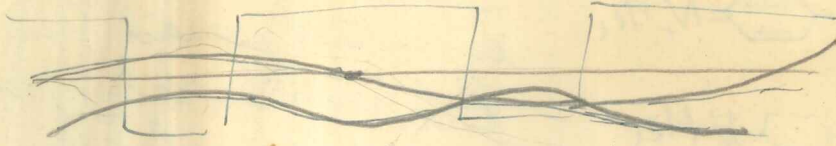
2) $\psi_n^*(x)$ = amp. de estar en un estado de energía E_n si la posición es x

3) Para una energía dada, las amplitudes varían con $e^{-\frac{i}{h} E_n t}$

ver also Herzberg page 67.

Resonancia

Consideremos los casos de menor energía



$$\psi_{sim} = (\psi_1 + \psi_2) \frac{1}{\sqrt{2}} \quad ; \quad \psi_{ant.} = (\psi_1 - \psi_2) \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$E_s = E_1 - \Delta$$

$$E_A = E_1 + \Delta$$

ψ_1 ψ_2 autof. como en el otro pero no existiera

Si inicialmente sabemos que $\psi = \psi_1$

$$\psi(t) = a \psi_s e^{-i \frac{E_s}{\hbar} t} + b \psi_A e^{-i \frac{E_A}{\hbar} t}$$

(las otras soluciones no interesan) \rightarrow las corresp. a otros autovalores

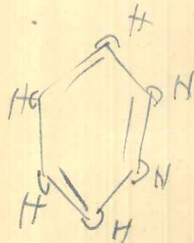
$$\psi_0 = \psi_1 = a \psi_s + b \psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_s + \psi_A) \quad \therefore \quad a = b = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\psi(t) = \frac{1}{2} (\psi_1 + \psi_2) e^{-i \frac{E_1 - \Delta}{\hbar} t} + \frac{1}{2} (\psi_1 - \psi_2) e^{-i \frac{E_1 + \Delta}{\hbar} t}$$

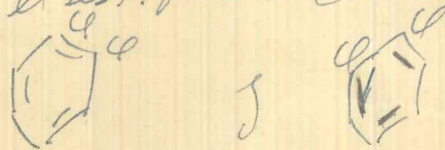
$$= e^{-i \frac{E_1}{\hbar} t} \left(\cos\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right) \psi_1 + i \sin\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right) \psi_2 \right)$$

$$Prob. de ser $\psi_1 = \cos^2\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right) \quad P_{\psi_2} = \sin^2\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right) \quad ; \quad P_{\psi_1} + P_{\psi_2} = 1$$$

Benzeno



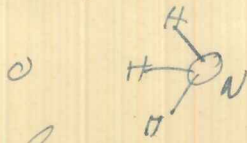
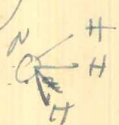
Al substituir los H por dos Cl el sist. puede convertirse en



Todos los C son equivalentes

Dice que lo que pesa es como si la "banda doble" o "ruler" y la razon indicaran (ψ_n) un par de electrones. Lo que pesa es que el autovalor es degenerado (no)

Otro ej. es el NH_3



para pasar de uno a otro tiene

que pasar una barrera

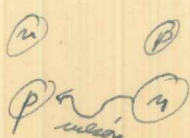
ambos representan el estado

simetrico

la frecuencia

es dada por 1,42 cm (bien determ.)

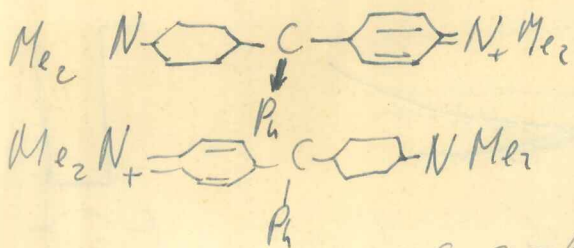
Otro ej.



La energ. del sist. depende de la distancia entre el n y el p

La penetración sería (med) del tipo $\frac{1}{r} e^{-\frac{4\pi r}{\lambda}}$, fuerza de intercambio de iones

Otro ej.



La frecuencia del movimiento es bastante pequeña (visible)

Esta absorción de luz produce la coloración, hecho casi general en los colorantes.



pero las profundidades son casi iguales, muda el color de la sustancia.

Temas a seguir

- 1º) pin, princ. de sect. de Pauli, Relat., Electrod. etc
- 2º) Aplicación, Alabé., Altos, químico
- 3º) Extensiones formales

Conexiones con el punto 2º)

Varias variables

Para determinar la trayectoria de un punto tenemos que dar clásicamente $x^{(1)}(t), x^{(2)}(t), \dots, x^{(n)}(t)$; ~~esta~~ puede ser definido como la trayectoria de un punto en un espacio de n dimensiones.

$$Amp. = \sum_{\text{todas variables}} c^{i S(\text{todas var.})} = \sum_{x^{(1)}(t)} \sum_{x^{(2)}(t)} \dots \sum c^{i S(\text{función del sistema})}$$

Si queremos calcular la amplitud para que la configuración representada por \cdot se convierta en la representada por \times tendremos:

$$K(x_2^{(1)}, x_2^{(2)}, \dots, x_2^{(n)}; x_1^{(1)}, \dots, x_1^{(n)}; t)$$

Este 2 indica configuración \times (final). El 1, configuración \cdot (inicial).

$\Psi = \Psi(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(n)}; t)$
 Ψ es la amplitud para hallar las partículas en la determinada configuración descrita por las coordenadas, es decir es la amplitud para que la primera se encuentre entre $x^{(1)}$ y $x^{(1)} + dx^{(1)}$ la segunda entre $x^{(2)}$ y $x^{(2)} + dx^{(2)}$ etc. $|\Psi|^2$ es la probabilidad que las partículas tengan esa posición por unidad de volumen (del espacio $x^{(1)} \dots x^{(n)}$). Aquí no hay simetría entre posición y tiempo ya que figuran muchas x y un solo t .

Ejemplo: 2 partículas ligadas por un resorte en una línea.

$$L_{clás} = \frac{m^{(1)} (\dot{x}^{(1)})^2}{2} + \frac{m^{(2)} (\dot{x}^{(2)})^2}{2} - \frac{k}{2} (x^{(1)} - x^{(2)})^2$$

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi; H = -\frac{\hbar^2}{2m^{(1)}} \frac{\partial^2}{\partial x^{(1)2}} - \frac{\hbar^2}{2m^{(2)}} \frac{\partial^2}{\partial x^{(2)2}} + \frac{k}{2} (x^{(1)} - x^{(2)})^2$$

Otro ejemplo: Supongamos n partículas (c/u en un espacio de 3 dimensiones) con masas m_n , cargas z_n que interaccionan una con otra con un potencial coulomb. solamente:

$$H \Psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(R_1, R_2, \dots, t) \text{ donde } H = -\sum \frac{\hbar^2}{2m_n} \nabla_n^2 - \sum_{n \neq m} \frac{e^2 z_n z_m}{|R_n - R_m|}$$

Ec. de Schrödinger.

$$\nabla_n^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_n^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_n^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_n^2}$$

En esa ecuación contenemos una gran cantidad de problemas de la naturaleza (casi todos los fenómenos naturales conocidos). Se excluyen la luz, las energías relativistas, etc.

En M. Q. funciona el teorema del centro de gravedad.

Por ejemplo en el caso de 2 partículas

- 1
- 2

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, t) = H \Psi$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \right) + V(r_{12})$$

$$r_{12} = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}$$

Introducimos: $x = x_1 - x_2$; $y = y_1 - y_2$; $z = z_1 - z_2$

$Mx = m_1 x_1 + m_2 x_2$ donde $M = m_1 + m_2$, etc... $r_{12} = r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$

Para substituir variables:

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial x}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial z} + \dots = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{m_1}{M} \frac{\partial}{\partial X}$$

$$y \frac{\partial}{\partial x_2} = -\frac{\partial}{\partial x} + \frac{m_2}{M} \frac{\partial}{\partial X}$$

$$H \Psi = \left\{ \frac{\hbar^2}{2} \left[\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{m_1 + m_2}{M^2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \dots \right] + V(r) \right\} \Psi =$$

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} (x, y, z, X, Y, Z, t) = \left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \right) + V(r) \right\} \Psi$$

$\mu =$ masa reducida $= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ (para masas muy diferentes es

aprox. igual a la más liviana; si las dos son aproximadamente iguales entonces es aprox. la masa de una de ellas dividida por 2. Buscaremos una solución especial.

Ensayaremos $\Psi(x, y, z, X, Y, Z, t) = \psi(x, y, z, t) \Phi(X, Y, Z, t)$

siendo ψ y Φ soluciones respectivamente de:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Phi &= -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{X,Y,Z}^2 \Phi \\ -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{x,y,z}^2 \psi + V(r) \psi \end{aligned} \quad \left| \begin{array}{l} \text{En nuestro caso el} \\ \text{Hamil. tiene las variables} \\ \text{completamente separadas.} \end{array} \right.$$

La primera ecuación es la de una partícula libre, no refleja el movim. libre del centro de gravedad. La otra es de el movim. relativo de las partículas independientemente del movim. del centro de gravedad. Si los 2 movim. tienen energías definidas el mov. total tiene $E = E_1 + E_2$. La función general será la superposición de ψ y Φ .

Problema Si $H = H_a + H_b$ donde H_a contiene solo variables x_a y H_b , variable x_b (independientes de x_a), entonces $-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H \Psi$; $\Psi = \Psi_a \Psi_b$ donde

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi_a = H_a \Psi_a \quad -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi_b = H_b \Psi_b; \text{ y si } H_a \text{ y } H_b \text{ son independientes del tiempo y si } H_a \rightarrow E_{m,a} \text{ y } H_b \rightarrow E_{m,b} : E = E_{m,a} + E_{m,b}$$

Esto es importante pues puede haber sistema en poca interacción o ninguna y entonces se aplica esto, siendo la solución el producto de las soluciones.

Un problema que puede ser separable clásicamente puede ser separable cuánticamente y además la misma mudanza de variables provocará la separación. Demostración:

La amplitud = $\sum \sum \dots \sum e^{iS[x]}$; si por sustitución podemos separar x en x_a y x_b esto es equivalente a:

$$S[x] = S_a[x_a(t)] + S_b[x_b(t)]$$

$$\sum_{x_a} \sum_{x_b} \dots \sum e^{\frac{i}{\hbar} (S_a + S_b)} = \sum_{x_a} e^{\frac{i}{\hbar} S_a} \sum_{x_b} e^{\frac{i}{\hbar} S_b}; \text{ Es decir } \Pi = \Pi_a \Pi_b$$

~~El problema~~ Problema. Determinar las funciones de onda y niveles de energía para el oscilador armónico de 3 dimensiones.

$$V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \text{ (Es separable).}$$

Problema. Supongamos que tenemos clásicamente N partículas con coordenadas $x^{(i)}$ muy cerca del equilibrio. En el equilibrio el potencial es mínimo: quedan, cerca del equil, los términos cuadráticos.

$$V = \sum_{ij} a_{ij} x^{(i)} x^{(j)}; T = \sum_i \frac{m_i}{2} \dot{x}_i^2$$

Existen coordenadas (llamadas normales) que son combinaciones lineales $q_k = \sum_j A_{kj} x_j$ que tienen la propiedad que respecto a ellas el movimiento se ve reducido a un movimiento oscilatorio armónico.

Mostrar que si el sistema cuántico puede ser descrito por potenciales cuadráticos, los niveles de energía son simplemente $\sum_{r=1}^n \hbar \omega_r (n_r + \frac{1}{2})$; n_r número entero.

Este problema da la teoría de vibraciones de moléculas poliatómicas.

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\psi) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r})$$

$$\text{Si } V(x,y,z) = V(r)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - V(r)\psi = E\psi$$

La función ψ que tiene que ser es clásicamente simétrica; hay que recordar que solamente ψ y ψ^* tiene propiedad sentido físico

Entonces ahora determinar los niveles de energía.

Pasando a coord. esféricas

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\psi) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta})$$

Laplaciano $\nabla^2 = R(r) Y(\theta, \phi)$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \cdot Y) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} = -\lambda(\lambda+1) Y$$

$$Y = \Theta(\theta) \Phi(\phi)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = -\mu \Phi$$

$$\Phi = e^{im\phi}$$

m debe ser entero por el argumento según el cual debe ser para que Φ sea 2π periódico igual al argumento ϕ en 2π , ya que de otro contrario la serie sería infinita lo que no contradice ningún argumento físico. El razonamiento es que cuando m entero las cosas van bien y únicamente pueda deducirse a partir de la ecuación para Θ .

$$\frac{1}{\sin \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \Theta \right) + \frac{m^2}{r^2 \sin^2 \theta} \Theta = -\lambda(\lambda+1) \Theta$$

(posibl. no pueda resolverse si θ no es entero)

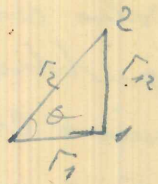
Las soluciones para Y son

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = \left[\frac{2^{l+1} (l-m)!}{4\pi (l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}$$

dónde $P_l^m(u) = \cos^m \theta \frac{d^m P_l(u)}{du^m}$ donde $u = \cos \theta$

y $P_l(u)$ son los polinomios de Legendre

Estos cumplen $\frac{1}{r_2} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \theta) \frac{r_1^l}{r_2^{l+1}}$ ($r_2 > r_1$)



solución $P_0 = 1$; $P_1 = \cos \theta$; $P_1^1 = \sin \theta$

$P_2 = \frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2}$; $P_2^1 = 3 \sin \theta \cos \theta$ (seno) $P_2^2 = 3 \sin^2 \theta$

Laplace $\lambda(\lambda+1) \frac{1}{r^2} =$ cuadrado del mom. angular orbital total
 $m \frac{1}{r^2} =$ componente " " " " según z.

(m es un entero que va de $-l$ a l)
 Estas denominaciones tomanse las de la M. C. en el límite clásico.

$R(r)$ satisfacen $\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[E - V(r) - \frac{l(l+1)}{2mr^2} \right] R = 0$

luego por $m=0$ agnd

Para potenciales esféricamente simétricos $V(r)$;
 $\Psi = R(r) Y(\theta, \phi)$. Aparecen los números cuánticos l y m .

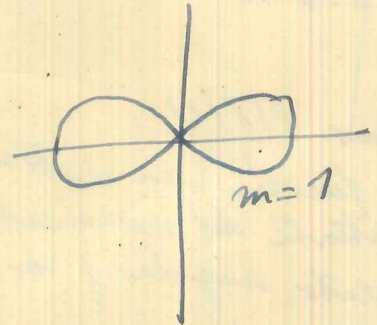
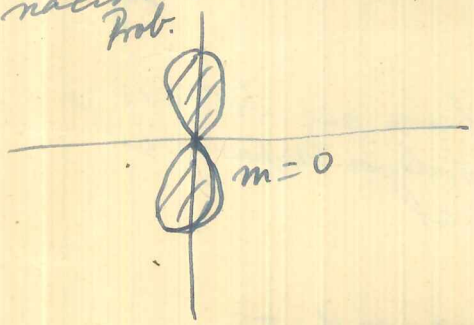
$l=0$ s-state | Ψ sym. Esph. orbital ang. mom = 0
 $l=1$ p-state | Ψ : tres estados:
 $\cos \theta \Rightarrow m=0$
 $\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\phi} \Rightarrow m=+1$
 $\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\phi} \Rightarrow m=-1$ | estados 3 veces degenerados

La ecuación radial era

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} (r R(r)) + \left\{ (E - V(r)) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R = 0$$

E no depende de m sino solo de l : es decir si se sabe cuánto vale l se sabe cuánto vale E , independientemente de m .

Si introducimos coordenadas cartesianas aquellas tres autofunciones son: $\frac{z}{r}$; $\frac{x+iy}{r\sqrt{2}}$; $\frac{x-iy}{r\sqrt{2}}$; ~~son~~ parecen que todos dependen del eje z elegido pues ~~se~~ fijado el vector momento total ~~se~~ el valor de m dependerá del eje z . Supongamos que elegimos un nuevo eje z' . Para $m=0$, la autofunción sea $\frac{z'}{r} = a \frac{x}{r} + b \frac{y}{r} + c \frac{z}{r}$; esto quiere decir que esta autofunción puede expresarse como una combinación lineal de las otras anteriores. Con respecto a cualquier eje, el estado es una combinación lineal de los tres originales.

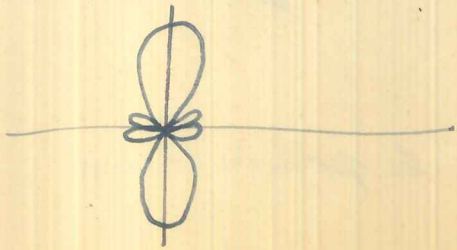


$l=2$ d-state | 5 estados $m = \begin{cases} +2 \\ +1 \\ 0 \\ -1 \\ -2 \end{cases}$

Para $m=0$ la autof. $\dots \frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2}$

Problema: las autof. son $\frac{1}{r^2}$ por: $x^2, y^2, z^2, x^2 - y^2, x^2 - z^2$

$l=3, 4, 5, \dots$ f, g, h, i, j, ... estado | Hay $2l+1$ estados pues de va de $+l \dots 0 \dots -l$



Propiedades generales

1) $\Psi(x, y, z)$; Muestramos: $x \rightarrow -x$: $\Psi(-x, -y, -z)$ (inversión)
 $y \rightarrow -y$
 $z \rightarrow -z$

Si el Hamilt. no muda cambiando ~~el~~ por inversión:

$H(-x, -y, -z) = H(x, y, z)$; $\Psi(-x, -y, -z) = +1 \Psi(x, y, z) \rightarrow$ Paridad ~~depende~~
 $\psi = -1 \Psi(x, y, z)$ Parity

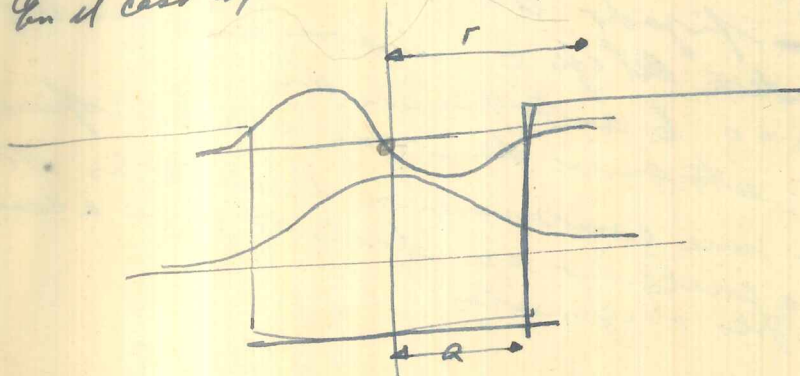
2) Para una partícula: si l es par, la paridad es par.
 si l es impar, " " " impar.

Si hay muchas partículas puede ser que esto no se cumpla.

3)
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} (rR) + \left(E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) rR = 0 \right]$$

Es la misma ec. que en el caso unidimensional salvo el término $\frac{l(l+1)}{r^2}$ y que $u = rR$ debe ser 0 para $r=0$, para que R sea finita en $r=0$.

En el caso esférico: $V = V_0$ para $r < a$; $V = 0$ para $r > a$



Tal vez no exista estado estacionario, es decir solución.

4) Explicación del término $\frac{l(l+1)}{r^2}$:
 Clásicamente si las fuerzas son centrífugas el mom. ang. total M es una constante del movimiento. Podemos separar en movimiento angular y en radial.



La fuerza $F = \frac{m v_{\perp}^2}{r} = \frac{M^2}{m r^3}$ pues $M = m v_{\perp} r$

El potencial del que deriva esa fuerza es $V = \frac{M^2}{2m r^2}$; luego $M^2 = \hbar^2 l(l+1)$

5) Si $V(r)$ no crece tanto como $\frac{1}{r^2}$ para $r \rightarrow 0$ o si $r^2 V(r) \rightarrow 0$ muy cerca del origen, entonces podemos determinar la función de onda

$\frac{d^2}{dr^2} (rR) + \frac{l(l+1)}{r^2} (rR) = 0$ esta ecuación admite: $u = r^{l+1}$
 $u = r^{-l}$

$R = r^l$ importante

Si $l = 0$ (autoq. esférica simétrica) existe la posibilidad de encontrar la partícula en el origen.

s-state $l=0$ $\psi \rightarrow \text{cte}$
 $r \rightarrow 0$

p. " $l=1$ $\psi \rightarrow r$
 $r \rightarrow 0$

d. state $l=2$ $\psi \rightarrow r^2$
 $r \rightarrow 0$

Cuanto mayor es el momento angular, la partícula tiende a quedar más lejos del origen.

Problema: si el núcleo no es puntiforme puede afectar el estado s pero casi nada el p y d.

See Schiff: (Square-Well).

Problema: resolver ~~matrices~~ las ec. de Schr. para el oscilador armón. en coords. esféricas y hacer una compar. con los autoval. que resultan en cartesianas.

Propiedad 6) Para un autovalor $E_{n,l}$; $U_{n,l} = r R_{n,l}$.

$$\int U_{n,l}^* U_{n,l} dr = \delta_{nn'} ; \int R_{n,l} R_{n',l} r^2 dr = \delta_{nn'}$$

\rightarrow porque aparece el r^2

$$\int \psi^* \psi r^2 dr d\varphi d(\cos \theta)$$

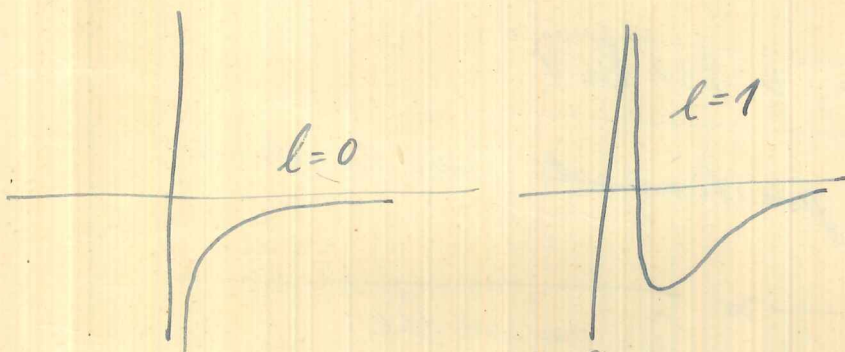
$$= \int R^* R \gamma^* \gamma r^2 dr d\varphi d(\cos \theta) = \int R^2 r^2 dr \int |\gamma|^2 d\varphi d(\cos \theta)$$

n : número de nodos de la función radial.

Caso especial

Átomo Hidrógeno:

$$\left[V = -\frac{Ze^2}{r} \right] ; -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} U + \left(E - \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) U = 0$$



$$E_{n,l} = -\frac{Z^2 e^2}{2a_0 n^2}$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2} = \text{Bohr radius} = 0.529 \text{ \AA}$$

La energía del primer nivel del Hidrógeno:

$$\frac{e^2}{2a_0} = \text{Rydberg } 13.6 \text{ volts} ; E_{n,l} \text{ no depende de } l:$$

¡cuidado!: sólo se ve en el caso $V = 1/r$.

$$R_{nl} = - \left\{ \frac{(2Z)^3 (n-l-1)!}{n! 2n (n+l)!} \right\}^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\rho} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$$

$$\rho = \frac{2Zr}{na_0} ; L_n^m(x) = \frac{d^m}{dx^m} L_n(x)$$

$$\frac{1}{1-t} e^{-\frac{xt}{1-t}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} L_n(x) t^n$$

generators

$L_n(x) = (D-1)^n x^n$; D es derivada respecto de x .

$L_2(x) = (D-1)^2 x^2 = (D^2 - 2D + 1)x^2 = 2 - 4x + x^2$

Observaciones sobre el Cálculo de Ctes. Atómicas

Conviene usar volts y cm.

1) $\frac{e^2}{hc} = \frac{1}{137.035}$

no tiene dimensiones (todavía no se sabe bien por qué)

2) $a_0 = \frac{h^2}{me^2} = 0.52917 \text{ \AA} \sim 0.53 \text{ \AA}$

→ radio de Bohr.

Multipl. aquellos dos se obtiene:

3) $\frac{h}{mc} = 3.8615 \times 10^{-11} \text{ cm}$

Compton wave length para el electrón.

Multipl. 1/3 se obtiene el radio clásico del electrón.

4) $r = \frac{e^2}{mc^2} = 2.82 \times 10^{-13} \text{ cm}$
 $2.8178 \times 10^{-13} \text{ cm}$

$r_d = \alpha r_{comp} = \frac{e^2}{mc^2}$

5) Energías: $\frac{e^2}{2a_0} = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 2 \text{ Ryd} = 27.2 \text{ volts}$

$\frac{e^2}{2a_0} = \text{Rydberg} = 13.6 \text{ volts}$

6) Multipl. 5 por $(137)^2 = \frac{\hbar^2 c^2}{e^4}$ obtenemos:

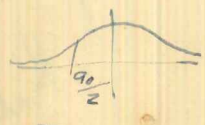
$mc^2 = 0.511 \text{ MeV}$

7) $M = 1.836 m$; $Mc^2 = 0.931 \text{ BeV}$

m masa protón

Con esto puede hacerse prácticamente todos los cálculos atómicos.

$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi} a_0} e^{-r/a_0}$ (solución) para el hidróg. $\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi} a_0^3} e^{-r/a_0}$

en este caso la probab. de hallar el electrón en el origen es máxima. Para tener una idea intuitiva de la velocidad del electrón en el átomo consideramos que su distribución es  los momentos son del orden de magnitud $p \sim \frac{\hbar}{a_0} \therefore v \sim \frac{\hbar}{a_0 m} = \frac{zc}{137}$

Para el H $(\frac{v}{c})^2 \sim 10^{-4}$ y el error de considerar $E = -\frac{me^2}{2\hbar^2}$ es pequeño

de $(\frac{mv}{\hbar})$. Para el uranio no podrá decirse lo mismo, pero puede usar estos métodos para los electrones externos.