

El número de nodos de la función radial es  $n-l$ .

1) que la carga efectiva será menor que  $Z$ .  
 Problema: Siendo  $V = \int \psi^* V \psi d^3R$  ( $n, l$  es normalizado)

$V = -\frac{e^2}{r}$  verificar para cualquier nivel  $-V = -2E$   
 $T + V = E \therefore T = -E$  ( $E < 0$ )

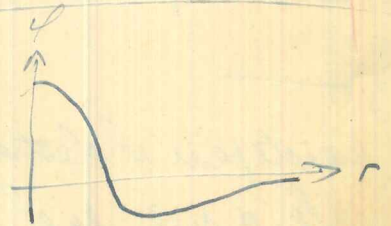
Veremos cual es aprox. el radio de la "órbita" del electrón ( $a$ )

$E_{pot} \approx -\frac{e^2}{a}$   $p \approx \frac{h}{a}$   $E_{cin} = \frac{p^2}{2m} \approx \frac{1}{2m} \frac{h^2}{a^2}$

luego  $-\frac{e^2}{a} + \frac{h^2}{2m a^2}$  debe ser mínimo  $\therefore \frac{e^2}{a^2} - \frac{h^2}{m a^3} = 0$   
 $a \approx \frac{h^2}{m e^2} = a_0$

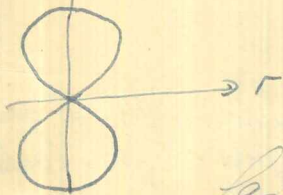
Existe un teorema según el cual  $\psi$  es la función que hace mínimo a algo (ese algo será  $\approx V+T$ )

2° Estado (2S)  $E = -\frac{1}{2} \frac{m e^4}{h^2} \cdot \frac{1}{4}$   
 $\psi_{2s} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{a_0^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$   
 $Z=1$   $T \sim n^2$



Otro estado con la misma energía que el anterior será el 2p

$\psi_{2p} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{a_0^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \cdot \begin{cases} \cos\theta & \Rightarrow z e^{-\frac{r}{2a_0}} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & \Rightarrow (x+iy) e^{-\frac{r}{2a_0}} \\ \sin\theta e^{-i\varphi} & \Rightarrow (x-iy) e^{-\frac{r}{2a_0}} \end{cases}$



Hay una tendencia a quedar fuera del origen.

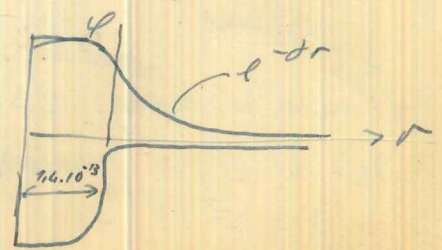
Las soluciones tienden a las clásicas para  $n$  y  $l$  grandes;  $n \approx l$  corresponden a órbitas circulares y  $l \ll n$  corresponden a orb. de grande excentricidad

Para energías  $> 0$  (esp. cont.)  
 las  $\psi$  son funciones hipergeométricas




Los términos exponenciales de las funciones de onda provienen de  
 $\exp\left(\frac{2m(E-V)r}{\hbar^2}\right) = e^{-\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)}r} = e^{-\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)}r} = e^{-\frac{r}{a}}$


En física nuclear para estudiar la interacción neutrón-proton se consideran potenciales que son sensiblemente  $\neq 0$  para  $r < 1.4 \cdot 10^{-13}$  cm

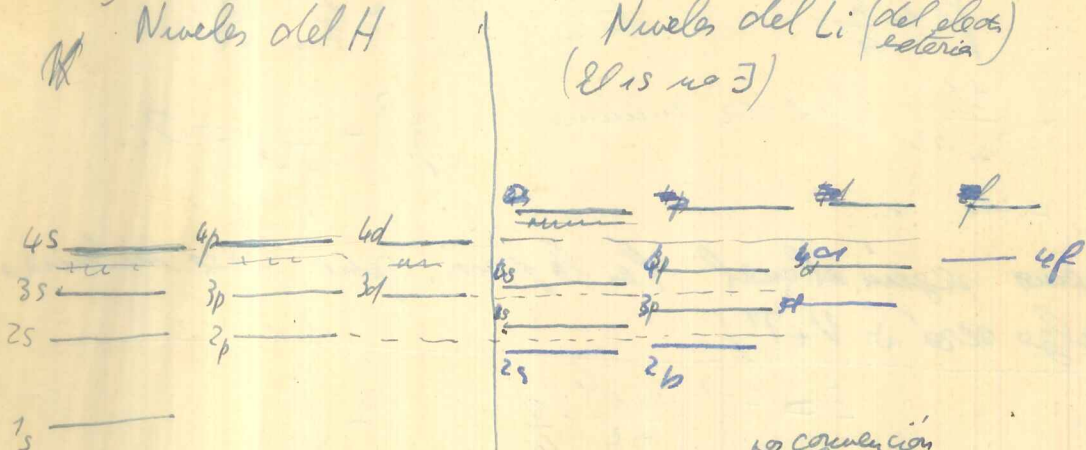


En la derecha  $\psi \approx e^{-\gamma r}$  donde  $\gamma = \sqrt{2m|E|}$   $\approx 413 \cdot 10^{-13}$  cm donde  $E \approx 2.22$  Mev es la energía de binding.

# Metales alcalinos

Li →  tiene 3 electrones; los 1<sup>o</sup> y 2 en el est. fundamental del H, pero el 3<sup>o</sup> en uno excitado (quiere escap.)

Na →  K  
Rb  
Cs  
Fr  
energ. serán menores.  
Niveles del H  
Niveles del Li (del elect. exterior) (ellos no E)  
Li: el electrón tiene gran probabilidad de estar fuera de las otras capas electr. ( $\psi_{1/r} = \frac{1}{r}$ ) entonces sus niveles de energ. debe ser aprox. los del H, pero si hay probab. de entrar las



En el Li se cumple  

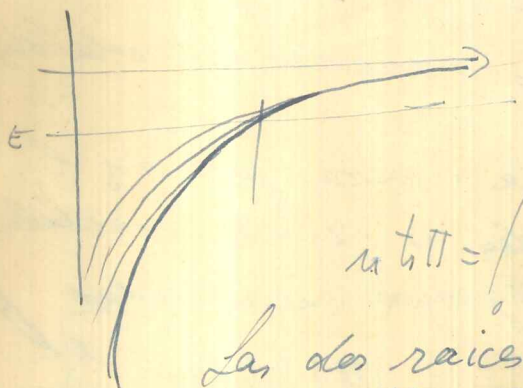
$$-E = \frac{R}{(n + \psi)^2}$$
 donde  $\psi$  es una const. que depende de l. Pado que el estado fund. del electrón del H no

existe para el electrón exterior del Li, por convenienc. el valor  $n=1$  en  $-E = \frac{R}{(n+\psi)^2}$  equivale a  $n=2$  en el H ( $-E = \frac{R}{n_H^2}$ ), en general el n del Li equivale a  $n_H + 1$ .

$\psi_p = 0,9596$        $\psi_d = 0,9974$        $n_{eff} = n + 0,144335 - \frac{0,113}{n^2}$

Esto va bien desde  $n=2$  hasta  $n=47$  (esto ult. significa energ. muy pequeñas)!!

Trataremos de hallar la fórm.  $-E = \frac{R}{(n+\psi)^2}$  por W.K.B.



$$\int_{r_{min}}^{r_{max}} \sqrt{2m(V(r) - E)} dr = n\pi$$

Suprimimos el  $1/2 \pi$  que viene bien para el pot. Coulombiano

$$n\pi = \int_{r_{min}}^{r_{max}} \sqrt{2m\left(\frac{R}{r} - E\right)} dr + \int_{r_{min}}^{r_{max}} \left[ \sqrt{2m(V(r) - E)} - \sqrt{2m\left(\frac{R}{r} - E\right)} \right] dr$$

Las dos raíces en la última de las integrales son separables y distintas solamente en la región  $|V(r)| > |E|$ , podemos entonces quitar las E y extender la integr. a  $\infty$ . Llamando  $\mu = \frac{V_{min}}{E} \int_{r_{min}}^{r_{max}} \sqrt{V - \frac{V_{min}}{E}} dr$

$$\int_{r_{min}}^{r_{max}} \sqrt{2m\left(\frac{R}{r} - E\right)} dr = (n - \mu)\pi$$

por semejanza con el potencial Coulombiano

$$E = \frac{R}{(n - \mu)^2}$$

Problemas Para el Li  $\psi_s = 0,5957$

El nivel de energ. 1S p<sup>o</sup> del Li es = al de los que corresponden:

no al H si fuéramos  $z' = z - \frac{5}{16}$

$\psi = Z|\psi|^2$  (Probable. significa  $\psi_{Li} = z'|\psi_H|^2$ )

Como se det.  $V_3$  con ello  $\mu$  no se puede ser ni lo bien (Feynman le hizo y dio 20% de error)

¡¡¡ ¡¡¡ ¡¡¡

Métodos aproximados para resolver la ecuación de Schrödinger

Método de Perturbaciones

$H = H_s + U$  Suponemos que el Ham. puede ser dividido en dos partes, la parte  $H_s$  (simple) y la parte ~~de~~ de perturbación. Por ejemplo, en el caso del átomo de Hidrógeno  $U$  puede ser la diferencia entre el átomo de Hidrógeno real y el caso Coul. puro, si por ejemplo queremos estudiar la influencia del núcleo finito. Otro ejemplo es el de un oscilador armónico con un término cúbico es decir ~~un~~ un potencial  $U_0 x^2 + \epsilon x^3$



Sea  $H_s \psi^{(s)} = E_n^{(s)} \psi^{(s)}$  la ec. de Schröd. del sistema simple. Sea  $H \psi = E \psi$ , la del sistema completo. Siempre se puede desarrollar  $\psi(x) = \sum_n a_n \psi_n(x)$ ; (suprimimos para simplificar la notación los índices  $(s)$ )

$$\sum_n (H_s + U) a_n \psi_n = E \sum_n a_n \psi_n \text{ pero } H_s \psi_n = E_n \psi_n \dots$$

$$\sum_m a_m U(x) \psi_m(x) = \sum_m (E - E_m) a_m \psi_m \dots$$

$$(E - E_n) a_n = \sum_m U_{nm} a_m \rightarrow \text{fórmula exacta}$$

$$U_{mn} = \int \psi_m^*(x) U(x) \psi_n(x) dx$$

Elemento de matriz de  $U$ , ~~en~~  $m, n$  con respecto al sistema  $\psi_n$ . La solución estará dada por:

$$\text{Det} [(E - E_n) \delta_{nm} - U_{nm}] = 0 \rightarrow \text{num. infinito de soluciones exactas}$$

Supongamos que tenemos un sistema no degenerado e imaginemos que  $U$  es muy pequeño. Supongamos que nuestra  $E$  es aproximad. igual a  $E$  una particular  $E_n$ , digamos  $E_0$  y supondremos que este estado no es degenerado.

$\psi \sim \psi_0$ ;  $E$  cerca  $E_0$ ; entonces  $a_0 \sim 1$  y  $a_n$  muy pequeñas para Aproxim. ~~tenemos despreciado términos de 2º orden en U~~

$$(E - E_n) a_n = \sum_m U_{nm} a_m \approx U_{n0} a_0 \dots \quad a_n = \frac{U_{n0} a_0}{E - E_n}$$

$$\text{Para } n=0: (E - E_0) a_0 = U_{00} a_0$$

Estas dos ecuaciones determinan todo lo  $a_n$  pero no el  $a_0$  que se determina por normalización.

En primera approx.  $E = E_0 + U_{00}$  ~~importante~~

$U_{00}$  es el valor medio del potencial  $U_{00} = \int \psi_0^*(x) U(x) \psi_0(x) dx$

La fórmula exacta sería la misma si en lugar de  $U_{00}$  usáramos  $\int \psi^* U \psi dx$ . Esto se ve pues nuestro ~~hemos visto en un problema~~

$$\text{que } E - E' = \frac{\int \psi^* (U - U') \psi dx}{\int \psi^* \psi dx} = \frac{\int \psi^* (U - U') \psi dx}{\int \psi^* \psi dx} = E - E'$$

Esta es exacta

Normalización  $\int |\psi|^2 dx = 1 \dots \sum_n \sum_m a_m^* a_n \int \psi_m^* \psi_n dx = \sum_n |a_n|^2 = 1$

$a_n$ : es la amplitud que esté en el estado  $\psi_n$ .

Los  $a_n$  son de primer orden en  $V$  si usamos la fórmula de la primera aproximación  $a_n = \frac{V_{n0}}{E_0 - E_n} a_0$ . En los libros en general aparece:

$$a_n = \frac{V_{n0}}{E_0 - E_n}$$

→ Nosotros usaremos esta fórmula que evidentemente difiere de la que deducimos antes en un término de segundo orden en  $V$ .

La nota también que  $|a_0|^2 = 1 - \frac{1}{2} \sum_n \frac{|V_{n0}|^2}{(E_0 - E_n)^2}$  ~~distorsión de 1~~

$$|a_0|^2 = 1 - \sum_n \frac{|V_{n0}|^2}{(E_0 - E_n)^2} \therefore |a_0| = 1 - \frac{1}{2} \sum_n \frac{|V_{n0}|^2}{(E_0 - E_n)^2}$$

distorsión de 1 en términos de segundo orden.

Segunda Aproximación

Nuestra ecuación exacta era:

$$(E - E_0) a_0 = V_{00} a_0 + \sum_n V_{0n} a_n \text{ (hasta ahora exacta):}$$

$$= V_{00} a_0 + \sum_n \frac{V_{0n} V_{n0}}{E_0 - E_n} a_0 \text{ (hemos reemplazado } a_n \text{ dado por}$$

la primera aproximación, es decir estamos despreciando términos

$$E = E_0 + V_{00} + \sum_{n \neq 0} \frac{V_{0n} V_{n0}}{E_0 - E_n}$$

en  $V^3$  ~~que también están presentes~~

En tercer orden aparecen:

$$\sum_{m \neq 0} \sum_{n \neq 0} \frac{V_{0n} V_{nm} V_{m0}}{(E_0 - E_n)(E_0 - E_m)} - V_{00} \sum_n \frac{V_{0n} V_{n0}}{(E_0 - E_n)^2}$$

En el libro de Gordon y Shortley hay muchos términos calculados.

$$V_{mn} = V_{nm}$$

Hermitianos, entonces ~~entonces~~  $V_{0n} V_{n0}$  es el valor absoluto  $|V_{0n}|^2$

Algunas observaciones sobre la interpretación de  $\sum_{n \neq 0} \frac{V_{0n} V_{n0}}{E_0 - E_n}$

Cuanto mayor es la diferencia de energía entre el nivel inicial y el ~~en~~  $E_n$  menor importancia tiene esa transición en el sentido de que es invers. proporc. a  $E_0 - E_n$ . Si  $E_n > E_0$  el término correspondiente es negativo: es como si  $E_n$  repeliere a  $E_0$ . Es decir si  $E_n > E_0$ , su término correspondiente trata de disminuir más a  $E_0$ ; si  $E_n < E_0$ , trata de aumentarlo.

Cuando se estudia perturbaciones que dependen del tiempo ~~esto~~ esto se entiende mejor pues hay una amplitud por segundo de ir a  $n$  y volver. Esto es proporcional al  $t^2$  de la transición y de que darse y a su vez esto es inversamente proporcional a  $E_0 - E_n$ .

Problemas (los 1<sup>eros</sup> para entregar)

1) Si el núcleo es una esfera de carga uniforme de radio  $a$ :

$$a = \frac{1}{2} \frac{e^2}{mc^2} A^{1/3}$$

cual es la modificación de los niveles del H?

Hacer en 1<sup>er</sup> orden para 1s, 2p, 2s o más general.

2) Oscilador armónico  $\frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 (1 + \epsilon x)$ .  
 Hallar los niveles de energía hasta segundo orden.  
 $E_n = \hbar \omega_0 (n + \frac{1}{2}) + ?$

3) Primer orden: en relatividad la energía cinética es:  
 $\epsilon \sqrt{m^2 c^2 + p^2} - mc^2 = K.E$  (energía cinética).

Para el Hidróg.  $p^2$  es muy pequeño. ~~se~~  
 $K.E \approx \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m^3 c^2}$ ; hallar la modificación de energías del H por relatividad.

$p^2 = -\hbar^2 \nabla^2$ ;  $p^4 = \hbar^4 \nabla^2 \nabla^2$  (hipótesis).

Trabajar para 1s, 2s, 2p (se puede usar nuestra teoría aun en el caso degenerado en este caso especial pues cuando se anula el denominador se anula también el numerador en mayor orden).

4) Efecto Zeemann

$$H\psi = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} A \right) \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} A \right) \psi + V\psi$$

$$V\psi = -\frac{e}{2mc} \left( A_0 \frac{\hbar}{i} \nabla \psi + \frac{\hbar}{i} \nabla_0 (A\psi) \right) + \frac{1}{2m} \frac{e^2}{c^2} (A_0 A) \psi$$

$\uparrow$   
 $B$   $A_x = \frac{1}{2} B y$ ;  $A_y = -\frac{1}{2} B x$  En primer orden:  
 $\Delta E = \frac{e B \hbar m}{2mc}$

Efecto Zeem. normal es accidental.  $\mu_B$  const. magnética

5)  $\Delta E(1s)$  en 2<sup>do</sup> orden; en (1s)  $\Delta E \approx 0$  en 1<sup>er</sup> orden.

Estudio de la constante dieléctrica del H y polarizabilidad del H.

La energía en el vacío es:  $V_{vac} = \frac{1}{8\pi} E^2$

en la materia:  $V_{mat} = \frac{1}{8\pi} \epsilon E^2$   
cte. dieléctrica

$$\delta E_{energía} = \frac{\epsilon - 1}{8\pi} E^2 = N \text{ átomos por un volumen } \delta E$$

variación de la energía por átomos.

$\delta E = \frac{1}{2} \alpha E^2$ ; por definición:  $\alpha =$  Polarizabilidad del átomo.

$\epsilon - 1 = 4\pi n \alpha$ ; hallando  $\alpha$  determinar  $\epsilon$ .

El ~~campo~~ <sup>Ham. para</sup> dirigido según z será:  $H = H_s + e E_0 z$

$\delta E$  es además la energ. del átomo según  $\psi$  (para  $E=0$ )

energ. con mat. =  $\frac{e}{8\pi} E^2 =$  energ. en vacío + en. at. =  $\frac{E^2}{8\pi} + \text{en. at.}$

$\therefore$  en. at. =  $\frac{\epsilon - 1}{8\pi} E^2 = \delta E$

$$\Delta E = U_{00} + \sum_n \frac{U_{0n} U_{n0}}{E_0 - E_n}$$

$$H = H_{hid} + e E z \quad ; \quad \text{Definiremos } \alpha \text{ como}$$

$$\Delta E = \frac{1}{2} \alpha E^2$$

$$\text{Leido } \int \psi_0(r) z \psi_0(r) d^3r = 0 \quad \text{el primer término de perturbaciones sea nula. Tomaremos el segundo que valdrá}$$

lo que equivale a decir  $\alpha = 2e^2 \sum \frac{z_{0n} z_{n0}}{E_0 - E_n}$

$$e^2 E^2 \sum_n \frac{z_{0n} z_{n0}}{E_0 - E_n}$$

Hebrá que calc. por lo pronto todos los  $z_{n0}$  y luego efectuar la suma

$$\psi_{n,l,m} = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad \text{y escribiremos}$$

$$z_{n0} = z_{n,l,m;1,0,0} = \int \psi_{n,l,m} z \psi_{1,0,0} d^3R \quad \text{Le usaremos obtener integrales nulas debe ser } m=0 \text{ y } l=1, \text{ la primera condición es evidente, la segunda es debida a que } \psi_{1,0,0} = R_{1,0} Y_0^0 = R_{1,0} \text{ y } z = r \cos \theta = r P_1^0 \text{ (ya que } P_1 = \cos \theta)$$

Luego quedan los  $z_{2p} = z_{n,l,m;1,0,0} = \frac{1}{3} \int R_{n,l} r R_{1,0} r^2 dr$  habiéndose ya efectuado las integraciones respecto a  $\theta$  y  $\varphi$ .

$$R_{1,0} = \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} 2 e^{-r/a_0}; \quad R_{2,1} = \left(\frac{1}{a_0}\right)^{5/2} \frac{1}{2\sqrt{6}} r e^{-r/2a_0}; \quad R_{3,1} = \left(\frac{4}{3a_0}\right) r e^{-r/3a_0}$$

Leido además  $\int r^p e^{-\beta r} dr = \frac{p!}{\beta^{p+1}}$  Las integrales pueden hacerse

$$\text{y se consigue } z_{2,1,0,1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{3}} 1,29 a_0 \quad ; \quad z_{3,1,0,1,0,0} = \dots$$

$$(z_{2,1,0,1,0,0})^2 = \frac{1}{3} 1,66 \cdot a_0^2 \quad ; \quad (z_{3,1,0,1,0,0})^2 = \frac{1}{3} 0,262 a_0^2 \quad \dots$$

$$\alpha = 2e^2 \sum \frac{(z_{n10,100})^2}{\frac{me^4}{24^2} \left(1 - \frac{1}{n^2}\right)} = 4 a_0^3 \sum \frac{|z_{n10,100}|^2}{1 - \frac{1}{n^2}}$$

Puede verse que los  $z_{n10}$  son proporcionales a las probabilidades de emisión de luz.

$$\alpha = \frac{4a_0^3}{3} \left[ \frac{1,66}{1 - 1/4} + \frac{0,2677}{1 - 1/9} + \frac{0,193}{1 - 1/16} + \frac{0,144}{1 - 1/25} + \dots + \text{continuo} \right]$$

Residuo

Hay una contribución del espectro continuo (lo denon. será  $n \rightarrow \infty$  ya que  $E_{cont} > 0$ ). Puede tomarse la suma de los 1<sup>o</sup> 4 o 5 términos obteniendo  $\frac{4}{3} a_0^3 2,7 = 3,6 a_0^3$  pero con ello no se considera una unidad más debida al esp. continuo. Haremos un método más preciso: es de esperar que gran parte del continuo tienen denominadores cercanos a 1

Si todos los denominadores (discretos, continuos) fueren 1

$$\begin{aligned} \int_{Z_0}^{\infty} \int_{Z_0}^{\infty} \psi(x) \psi(y) dx dy &= \int_{Z_0}^{\infty} \int_{Z_0}^{\infty} \psi(x) \psi(y) dx dy \\ &= \int_{Z_0}^{\infty} \psi(x) \psi(x) dx = (\psi^2)_{00} = \int_{100}^{\infty} \psi(r) \psi^2(r) d^3R = a_0^2 \end{aligned}$$

Demuestra que en genl.: si tenemos  $\int A_n B_m = (AB)_{nm} \rightarrow \int (A+B)_n = \int A_n + \int B_n$

En  $\int_{Z_0}^{\infty} \int_{Z_0}^{\infty}$  tenemos todo, discreto y continuo, y deber, esencialmente, dolo por haber considerado igual a la unidad los denominadores de los primeros niveles. Este último resultado da  $\alpha = 4a_0^3$  y es equivalente a

$$\alpha = \frac{4a_0^3}{3} (1,66 + 0,267 + 0,093 + \dots + \text{cont.})$$

Este cont. es distinto al cont. de antes y que los de un. son diferentes

Tendremos luego un resultado discreto en

$$\alpha = 4a_0^3 - \frac{4a_0^3}{3} (1,66 + 0,267) + \frac{4a_0^3}{3} (2,21 + 0,30) =$$

$$\frac{4}{3} a_0^3 (3 - 1,66 - 0,267 + 2,21 + 0,30) = \frac{4}{3} a_0^3 3,58 = 4,74 a_0^3$$

Puede obtenerse  $\alpha$  exactamente (mediante el uso de coord. paralelas) y se obtiene  $\alpha = 4,5 a_0^3$

Puede decirse groseramente  $\alpha \approx 2e^2(z^2)$

$I \rightarrow$  un. de ionización

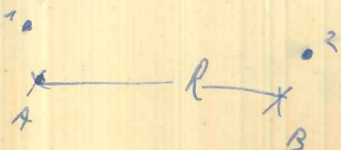
esto sirve para dar ideas groseras sobre otros átomos

### Fuerzas de Van der Waals

Cuando dos átomos están a grandes distancias (los 4 no se solapan) hay una fuerza residual (gravitad) que decrece como  $\frac{1}{R^2}$  con un coeficiente infinitesimal; pero cuando las distancias son pequeñas hay un potencial atractivo que varía como  $\frac{1}{R^6}$ . Esto explica las ec. de gases ideales para grandes densidades.

Muchas sustancias condensan gracias a esa fuerza de atracción. Hay moléculas cuyos componentes están ligados por esa fuerza (p. ej. azúcar, cuyas moléculas están debilmente ligadas).

Estudiaremos estas fuerzas para dos átomos de H.



$$H = -\frac{t_1^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{t_2^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{r_{1A}} - \frac{e^2}{r_{2B}} - \frac{e^2}{r_{1A}} - \frac{e^2}{r_{2A}} + \frac{e^2}{r_{AB}} + \frac{e^2}{r_{12}}$$

$U$

Estudiaremos una solución aproximada para átomos aligados en el estado fundamental ( $R \rightarrow$  dist  $1 \rightarrow A, 2 \rightarrow B$ ). Consideremos además los núcleos de masa infinita.

$$\psi_0 = \psi_{100}(r_{1A}) \psi_{100}(r_{2B})$$

Puede demostrarse  $U = \frac{e^2}{R^3} (x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2 z_1 z_2)$

$$\psi_n = \psi_k(r_1) \psi_l(r_2)$$

$\rightarrow$  estas corresponden a estados excitados ~~estables~~.

Cambiaremos notación  $U_{n0} = \frac{e^2}{R^3} [U_{n0}^x + U_{n0}^y - 2 U_{n0}^z]$

donde  $U^z = z_1 z_2$   $U^x = x_1 x_2$   $U^y = y_1 y_2$

$$U_{n0}^x = U_{k,l,0,0} = \int \psi_k^*(r_1) \psi_l^*(r_2) x_1 x_2 \psi_0(r_1) \psi_0(r_2) d^3R_1 d^3R_2 =$$

$$= \left( \int \psi_k^*(r_1) x_1 \psi_0(r_1) d^3R_1 \right) \left( \int \psi_l^*(r_2) x_2 \psi_0(r_2) d^3R_2 \right) = X_{k0}^A X_{l0}^B$$

$\hookrightarrow$  Estado p<sup>o</sup> el átomo A que ahora es H.

Por lo tanto  $U_{00} = 0$  y  $U_{0000} = X_{00}^A X_{00}^B = 0$  (ya que  $\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1$ )

El 2<sup>o</sup> orden da  $\frac{e^4}{R^6} \sum_{k,l} \frac{U_{k,l,0,0}^x U_{k,l,0,0}^x + U_{k,l,0,0}^y U_{k,l,0,0}^y - 2 U_{k,l,0,0}^z U_{k,l,0,0}^z}{E_0^A + E_0^B - E_k^A - E_l^B}$

$\hookrightarrow$  estudiaremos solamente el término

$$\Delta E = \frac{e^4}{R^6} \sum \frac{X_{0k}^A X_{0l}^B X_{k0}^A X_{l0}^B}{E_0^A + E_0^B - E_k^A - E_l^B}$$

Soluciona los términos cruzados ( $U^y U^x$ ) se anulan y  $z_{k0}^A \neq 0$  debe ser  $X_{k0}^A = 0$  ? Esto es debido a que  $P_{k0}^A$  (polarización)!

De tal manera quedarán, en el numerador, solamente  $XXXX + YYY + 4ZZZ$  y como todos son iguales (por simetría) quedará

$$\Delta E = \frac{6e^4}{R^6} \sum_{k,l} \frac{|Z_{k0}^A|^2 |Z_{l0}^B|^2}{E_0^A + E_0^B - E_k^A - E_l^B}$$

Claramente, una suma puede efectuarse para el H. Pero el H es factible en forma aprox. (later)

Aproximadamente tendremos

$$\Delta E = \frac{6e^4}{R^6} \sum_{k,l} \frac{|Z_{k0}^A|^2 |Z_{l0}^B|^2}{I_A + I_B}$$

y puede decirse  $d_A = \frac{2e^2 \sum |Z_{k0}^A|^2}{E_0 - E_k}$   
constante de polarización (de la electrónica) del átomo

y por analogía  $d_B = \frac{2e^2 \sum |Z_{l0}^B|^2}{E_0 - E_l}$   
 Solucionando fórmulas de este tipo es especial para H y He.  
 Para un gas perfecto  $PV = T \left( 1 - \frac{BT}{V} \right)$  de  $BT = \int e^{-\frac{u}{kT}} d^3r$   
 Puede explicarse en términos con  $f_{\text{van der Waals}}$ .  
 Puede hacerse el cálculo de las moléculas de H<sub>2</sub> bien exactamente



Es decir la autofunción  $\psi$  correspondiente a  $H_0 + U$  será una cierta combinación lineal de las  $\psi_i$  que puede ser muy diferente de las  $\psi_i$  originales.

Teoría de Perturbaciones de 1<sup>er</sup> orden para niveles degenerados.

$H = H_0 + U$

Por ej., en el H para  $n=2$  tenemos cuatro estados (3 estados correspondientes a 2p y 1 a 1s).

Para un dado  $E_0, m$  veces degenerado tendremos las autofunciones  $\psi_i$   $i=1 \dots n$ . Sea  $\psi$  la autofunción correspondiente a  $H_0 + U$ :

$\psi = \sum_{i=1}^n c_i \psi_i + \sum_{k>n} c_k \psi_k$  Ahora tendremos que todos los

$c_i$  ( $i=1 \dots n$ ) pueden ser importantes pues provienen del nivel degenerado original. La segunda suma de la contribución de los otros estados. Estos  $c_k$  serán muy pequeños y en primera aproximación los despreciaremos. La influencia de U será que  $E_0$  se desdoble. El número máximo de los nuevos niveles será  $n$ ; pero puede haber algunos que sigan degenerados. Por ej. puede haber un U que separe 2s y 2p (y 2p sigue degenerado), etc.

Teníamos:  $(E - E_m) a_m = \sum_n U_{mn} a_n$ ;  $\psi = \sum_n a_n \psi_n$ ;  $n=1 \dots n$

Ahora llamemos  $E_m = E_0$ ; antes el término  $a_n$  importante era  $a_0$  y en el  $n$  miembro derecho despreciaba los demás  $a_n$ . Ahora son importantes todos los  $c_i$  (desde 1 a  $n$ ). Luego tendremos:

$(E - E_0) c_i = \sum_{j=1}^n U_{ij} c_j$   
 Energía sin perturbación, es decir corresp. a  $H_0$

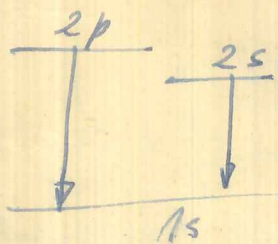
$\text{Det} |\Delta E \delta_{ij} - U_{ij}| = 0$   
 $\Delta E = E - E_0$

Tendremos  $n$  soluciones de esta ecuación de  $n$ ésimo grado. (Algunas pueden ser raíces dobles, etc.)

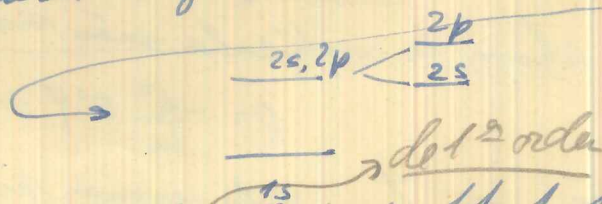
Problemas para entregar.

1) Determinar el Stark effect H átomo para  $n=2$

Tenemos un campo eléctrico (E constante);  $V = e E z$ .  
 Un primer orden estados degenerados.



línea de Lyman (ultravioleta).  
 Es decir originalmente teníamos:



En 1s no hay efecto Stark. El efecto Stark solo obra sobre los estados degenerados (para si el estado no es degenerado, las autofunciones tienen paridad definida y como  $z$  es impar los elementos matriciales diagonales se anulan). Los otros átomos en general no tienen degeneración y por lo tanto no hay efecto Stark fuerte salvo para el H.

2) Átomo de Helio. Sólo el primer nivel excitado.

$$U = \frac{e^2}{r_{12}} \quad \text{Para } U=0 \quad H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2}$$

Si se tiene un sistema tal que  $H = H_1 + H_2$ , entonces los productos de las funciones de onda son soluciones.

El estado fundamental tendría como función de onda  $\psi_{1s}(r_1) \psi_{1s}(r_2)$  (gs). A este estado le correspondería una energía de 8 Rydberg (gs). En efecto, como  $Z=2$ , a  $\psi_{1s}$  le corresponden 4 Ryd.

En el primer estado excitado tendremos 8 autofunciones:

$$\psi_{1s}(r_1) \psi_{2s}(r_2)$$

$$\psi_{1s}(r_1) \psi_{2p}(r_2) \rightarrow$$

$$\psi_{1s}(r_2) \psi_{2s}(r_1)$$

$$\psi_{1s}(r_2) \psi_{2p}(r_1) \rightarrow$$

inter de valer cada una por tres autofunciones ya que  $\psi_{2p}$  es tres veces degenerado.

La energía correspondiente será de 5 Rydberg pues a  $\psi_{1s}$  (por ej) corresponde 4 Ryd. y a  $\psi_{2s}$  1 Ryd. ya que

$$\frac{Z^2}{n^2} = \frac{2^2}{2^2} = 1 \quad (\text{para } 2s)$$

Si no se sabe cuánto valen los  $\psi_i$  iniciales podemos hacer lo siguiente:

$E\psi = H\psi$ . Imaginamos a palpieto una sucesión de autofunciones  $\psi_i$  y desarrollamos  $\psi = \sum c_j \psi_j$ . Multiplicamos por  $\psi_i^*$  e integramos. Queda un sistema de ecuaciones que se satisfacen si

$$\text{Det } |E I_{ij} - H_{ij}| = 0; \quad I_{ij} = \int \psi_i^* \psi_j dVol$$

$$H_{ij} = \int \psi_i^* H \psi_j dVol \quad H: \text{ Hamilt. total}$$

$$I_{ij} \rightarrow \delta_{ij}; \quad H_{ij} = H_{0ij} + U_{ij} = E_{0j} \delta_{ij} + U_{ij}$$

Estudiaremos ahora la molécula más simple:  $H_2^+$

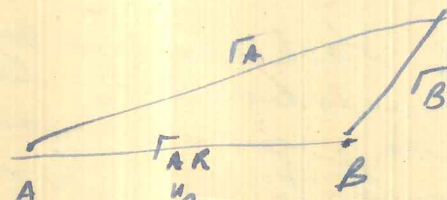
$$0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + \left( E - \frac{e^2}{r_A} - \frac{e^2}{r_B} + \frac{e^2}{r_{AB}} \right) \psi$$

Esta ecuación puede resolverse exactamente pero es muy complicado.

Supondremos que  $r_{AB}$  es muy grande

Usaremos el método  $\text{Det } |E I_{ij} - H_{ij}| = 0$  Para elegir las funciones  $\psi_i$  supondremos que el electrón está sobre un átomo o sobre el otro.

$$\psi_1 = \left( \frac{1}{a_0} \right)^{3/2} 2e^{-\frac{r}{a_0}}; \quad \psi_2 = \left( \frac{1}{a_0} \right)^{3/2} 2e^{-\frac{r}{a_0}}$$



$$\begin{vmatrix} E I_{11} - H_{11} & E I_{12} - H_{12} \\ E I_{21} - H_{21} & E I_{22} - H_{22} \end{vmatrix} = 0$$

Obrviamente tenemos:  $H_{11} = H_{22}$ ;  $H_{12} = H_{21}$ ;  $I_{11} = 1 = I_{22}$  ;  $I_{12} = I_{21}$

$$(E - H_{11})^2 = (E I_{12} - H_{12})^2 \dots \boxed{E - H_{11} = \pm (E I_{12} - H_{12})}$$

Tenemos dos soluciones. llamemos  $E_s$  a la correspondiente al signo -.

$$\boxed{E_s = \frac{H_{11} + H_{12}}{1 + I_{12}}} \quad \boxed{E_A = \frac{H_{11} - H_{12}}{1 - I_{12}}}$$

Para la solución  $s$ :  $c_1 = c_2$ . Para la  $A$ ;  $c_1 = -c_2$

Es lo mismo que sucede con el caso más simple:

Vemos que este método de ahora es muy bueno pues estamos trabajando con átomos reales.

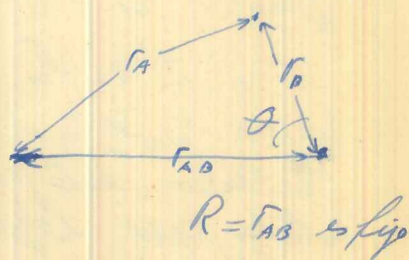


$$H_{11} = \int \psi_{1s}(r_A) \left( \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2}_{W_H} - \frac{e^2}{r_A} - \frac{e^2}{r_B} + \frac{e^2}{r_{AB}} \right) \psi_{1s}(r_A) d^3R$$

$$J = e^2 \int (\psi_{1s}(r_A))^2 \frac{1}{r_B} d^3R = \dots \int e^{-\frac{2r_A}{a_0}} \frac{1}{r_B} d^3R$$

$$H_{21} = \int \psi_{1s}(r_B) \left( \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2}_{W_H I_{12}} - \frac{e^2}{r_A} - \frac{e^2}{r_B} + \frac{e^2}{r_{AB}} \right) \psi_{1s}(r_A) d^3R$$

$$I_{12} = \int e^{-\frac{(r_A+r_B)}{a_0}} d^3R$$



$$R = \int \psi_{1s}(r_A) \psi_{1s}(r_B) \frac{1}{r_B} d^3R =$$

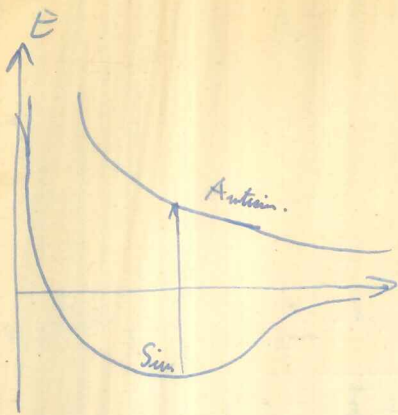
$$= \frac{e^2}{a_0} \iint e^{-\frac{r_A}{a_0}} e^{-\frac{r_B}{a_0}} \frac{1}{r_B} r_B^2 d r_B d \cos \theta$$

$$r_A^2 = R^2 + r_B^2 - 2 r_B R \cos \theta$$

En vez de utilizar  $\cos \theta$  como variable podemos usar directamente  $r_A$ . La integral queda

$$\iint e^{-\frac{r_A}{a_0}} e^{-\frac{r_B}{a_0}} \frac{1}{r_B} \frac{r_B d r_B r_A d r_A}{R} \quad \text{que puede separarse en}$$

un producto de 2 integrales que son resolubles.



En S. tenemos atracción, en A repulsión.  
 En S hay un mínimo de la energía y por lo tanto hay una posición estable.  
 R Podemos quebrar una molécula de H iluminándola, con ello los átomos pasar a A y por ello se rompe.

En el caso estudiado hay un solo electrón. Hay muy pocos elementos en que la ligadura de la molécula se debe a un solo electrón (Boro); en general es debida a 2 electrones (pero no <sup>podrán ser</sup> más que 2 ya que solo 2 pueden estar en un mismo estado)

Problema: Calcular la energía de la molécula neutra de H  $\rightarrow$  del est. fund.

Habría dos estados  $\begin{cases} \psi_{1s}(r_{A1}) \psi_{1s}(r_{A2}) \equiv \text{elect. 1 cerca de A y 2 cerca de B} \\ \psi_{1s}(r_{A2}) \psi_{1s}(r_{B1}) \equiv \text{" 2 " " A y 1 " " B} \end{cases}$

Otro método muy fuerte, por lo menos para el estado fundamental del sistema, es el método de variaciones

$H\psi = E\psi$  Calcularemos  $I = \frac{\int \psi^* H \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau} = E$  que dep. de  $\psi$

para cualquier  $\psi$ ;  $I \geq E$  (Rayleigh)

Dem: Si  $\psi = \psi_0$ ;  $I = E_0$  ( $E_0 = E$  del est. fund.)

$\psi = \sum a_n \psi_n$   $I = \frac{\sum |a_n|^2 E_n}{\sum |a_n|^2}$

believe  $E_0 \geq \frac{1}{2} (H^2)^{1/2}$

Intuitivo: esto es un tipo de medida de la energ. sobre todos los estados, que lógicamente no puede ser mayor que la del est. fundam. más rigurosamente

$I = E_0 + \frac{\sum |a_n|^2 (E_n - E_0)}{\sum |a_n|^2} > E_0$  (ya que  $E_n > E_0$ )

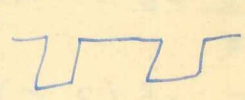
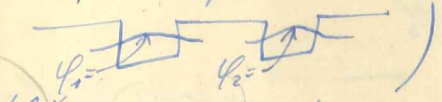
Si en  $\psi$  tenemos una buena aproximación de  $\psi$  entonces los  $a_n$  serán pequeños y el error de decir  $I = E_0$  será del orden del cuadrado (p.e. si  $\frac{a_n}{a_0} \approx 0.1 = 10\%$   $I = E_0 \pm 1\%$  con error 1%)

Si  $H = H_0 + U$  y  $\psi = \psi_0$  (autof. de  $H_0$  de  $E$  mínima  $= E_0$ )

$I = \frac{\int \psi_0^* E_0 \psi_0 d\tau + \int \psi_0^* U \psi_0 d\tau}{\int \psi_0^* \psi_0 d\tau} = E_0 + U_{00}$   $\therefore E_{\text{est. fund.}} < E_0 + U_{00}$

ambos son el primer resultado de la 1ª aprox. de la teoría de perturb. y el 2º result. está de acuerdo con ella. O sea la teoría de perturb.

de 1<sup>er</sup> orden para el est. fund. es un caso particular de este método de variaciones. Hay que recordar, sin embargo, que la teoría de pert. sirve para los demás estados excitados.

F puede ser expresado como suma de funciones cualesquiera que supondremos, por intuición, p.ej., que son soluciones ~~de~~ exactamente buenas del problema. (p.g. en el probl.  puede tomarse )

$$I = \frac{\int \sum_j c_j^* \psi_j^* H \sum_k c_k \psi_k dw}{\int \sum_j c_j^* c_k \psi_j^* \psi_k dw} = \frac{\sum_j \sum_k c_j^* c_k H_{jk}}{\sum_j \sum_k c_j^* c_k I_{jk}} = \frac{N}{D}$$

Buscaremos los  $c_i$  que minimicen  $I$ .

$$\frac{\partial I}{\partial c_i} = \frac{\sum_k c_k H_{ik} \cdot D - \sum_k c_k I_{ik} N}{D^2} = 0$$

$$\sum_k c_k H_{ik} \cdot D - I \sum_k c_k I_{ik} = 0$$

Si hacemos  $I = E$  queda  $|H_{ik} - E I_{ik}| = 0$

Este método sirve también para hallar la primera solución excitada si se sabe exactamente que  $F$  es ortogonal a la solución fundamental exacta. Esto a veces es fácil ya que la anterior propiedad puede ser inferida por razonamientos de paridad, momento angular, etc.

### Estado fundamental del átomo de Helio por el método de Variaciones

Consideremos el Hamilt. de un núcleo con dos electrones.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \rightarrow \text{este es el término que consideraremos como una perturbación.}$$

Si no hubiera perturbaciones la función de onda sería:

$$\psi_{100}(r_1) \psi_{100}(r_2) = \left(\frac{Z}{\pi a_0}\right)^3 e^{-\frac{Z}{a_0} r_1} e^{-\frac{Z}{a_0} r_2}$$

Usaremos como "trial function" (función de tentativa) una de ese tipo poniendo  $X$  en lugar de  $Z$ .

$$f = \left(\frac{X}{\pi a_0}\right)^3 e^{-\frac{X}{a_0} r_1} e^{-\frac{X}{a_0} r_2} = \frac{1}{\pi^2} ; \quad I = \int f^* H f dV; \quad \int f^* f dV = 1$$

$$I = \int \psi(r_1) \psi(r_2) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \right] \psi(r_1) \psi(r_2) dV_1 dV_2$$

Aplicamos el teorema virial:

$$\langle T \rangle = -E = \frac{1}{2} \frac{e^2 X^2}{a_0} = \frac{1}{2} \frac{m e^4}{\hbar^2} X^2; \quad \langle V \rangle = 2E = -\frac{e^2 X^2}{a_0}$$

Pero  $\langle V \rangle$  por definición es  $\langle V \rangle = -\left\langle \frac{e^2 X}{r} \right\rangle = -\frac{e^2 X^2}{a_0} \therefore \left\langle \frac{e^2 X}{r} \right\rangle = \frac{e^2 X^2}{a_0}$

$$I = \frac{e^2}{2a_0} \left[ \frac{1}{2} X^2 \cdot 2 - 2ZX + \frac{a_0}{e^2} \int \psi(r_1) \psi(r_2) \frac{e^2}{r_{12}} \psi(r_1) \psi(r_2) dV_1 dV_2 \right]$$

La integral está calculada en Pauling y Wilson como la energía electrostática de dos distribuciones esféricas de cargas y da:

$$= \frac{5}{4} X \frac{e^2}{2a_0}; \text{ Luego } I = \frac{e^2}{2a_0} \left[ X^2 - 2ZX + \frac{5}{8} X \right]; \text{ Hagamos el mínimo:}$$

$$\frac{\partial I}{\partial X} = 0 \therefore 2(X-Z) + \frac{5}{8} = 0 \therefore X = Z - \frac{5}{16} \quad \text{Es como si hubiera dos átomos separados pero los núcleos tendrían diferentes } Z.$$

$$I = \frac{e^2}{2a_0} \left( Z - \frac{5}{16} \right)^2 \text{ Da un error del } 2\%.$$

	x	energ. del át. de H	
Orden 0 (despreciando repulsión)	$-2W_H Z^2$	108.24 eV	
1 <sup>er</sup> orden perturb.	$-2W_H \left( Z^2 - \frac{5}{8} Z \right)$	74.42 eV	
Método de Var. hecho según	$-2W_H \left( Z - \frac{5}{16} \right)^2$	77.11 eV	} dif. = 2%
Exp. + Var. Completa		78.62 eV	

Habríamos podido una "trial function" más complicada en las variaciones que concuerda con el valor experimental en  $\pm 0.002$ . (Es un método variacional mucho más complicado).

Problemas: Suponga que la función de onda de un electrón penetra en la otra función y sea:

$$F = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{X_1^{3/2} X_2^{3/2}}{\pi a_0} \right) \left( e^{-\frac{X_1 r_1}{2a_0}} e^{-\frac{X_2 r_2}{2a_0}} - e^{-\frac{X_2 r_2}{2a_0}} e^{-\frac{X_1 r_1}{2a_0}} \right)$$

Encuentra la energía con esta función. Observe que debe dar mejor que la función anterior. Da  $X_1 = 2.15$ ;  $X_2 = 1.19$ ;  $E = 77.86$  (1% de error)

Otra función mejor  $\rightarrow$  Error  $\pm 0.04\%$

$$F = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( 1 + C_1 r_{12} \right) \left( \frac{X_1^{3/2} X_2^{3/2}}{\pi a_0} \right) \left( e^{-\frac{X_1 r_1}{2a_0}} e^{-\frac{X_2 r_2}{2a_0}} + e^{-\frac{X_2 r_2}{2a_0}} e^{-\frac{X_1 r_1}{2a_0}} \right)$$

$$\text{Para } F = \left( 1 + C_1 r_{12} + C_2 (r_1 - r_2)^2 \right) e^{-\frac{X_1 r_1}{2a_0}} e^{-\frac{X_2 r_2}{2a_0}} \text{ el error es } \frac{1}{20}\%$$

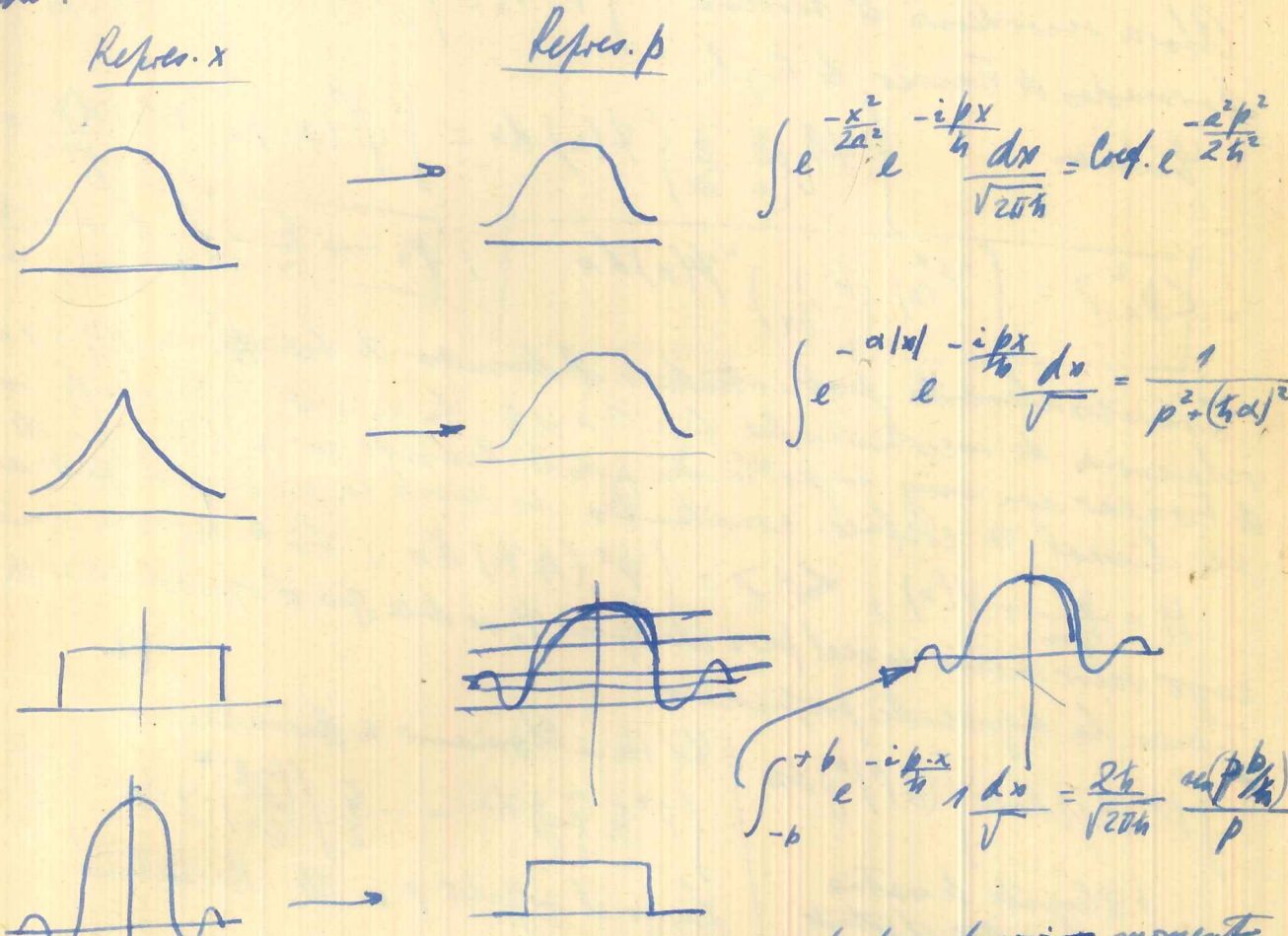
Operadores

$\Psi(p) = \int e^{-i p \cdot x / \hbar} \Psi(x) \frac{d^3 x}{\sqrt{2\pi\hbar}}$  ;  $e^{i p \cdot x / \hbar} \rightarrow$  esta es la función de onda de una partícula de momento definido.

$c_n = \int \Psi_n^*(x) \Psi(x) d^3 x$  ;  $\Psi_n(x)$  es la función de onda del estado definido de energía  $E_n$ . Aquí hemos pasado de la represent.  $x$  a la repr. de energías.

Esto es general: sea  $A$  un operador cualquiera. Si queremos pasar de la repres.  $x$  a la  $A$  ( $x \rightarrow A$ ), la función de transformación es la función que define un estado definido de  $A$ .

Las representaciones más importantes son las de energía, impulso y posición.



Esto todos estos ejemplos venos que cuando se sabe bien el ~~momento~~ momento no se sabe bien la posición.

Valores Medios

$P(x)dx$ ;  $\langle x \rangle = \int x P(x) dx$  ; ¿por qué esto es una media? Algunas veces lo llamamos valor esperado. Supongamos que estamos midiendo un fenómeno:

Algunas veces la media se llama valor esperado pero esto no lo muy feliz. Por ejemplo en los dados el valor esperado sea 3.5.

$\langle f(x) \rangle = \int \Psi^*(x) f(x) \Psi(x) dx$  ;  $\langle p \rangle = \int p P(p) dp = \int \Phi^*(p) p \Phi(p) dp$

Sumamos y dividimos por el número de observaciones.

10  
10  
7  
7  
10  
7  
9

$$\langle p \rangle = \int \phi^*(p) p \psi(p) dp = \int \underbrace{e^{\frac{ipx}{\hbar}} \psi^*(x) \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}}}_{\phi^*(p)} p \underbrace{e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \psi(x) \frac{dx'}{\sqrt{2\pi\hbar}}}_{\psi(p)} dp$$

$$\int p e^{\frac{ipx}{\hbar}} \frac{dp}{2\pi\hbar} = \frac{\hbar}{i} \delta'(x); \quad \langle p \rangle = \iint \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \delta'(x-x') \psi(x') dx' dx =$$

$$\boxed{\int \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) dx = \langle p \rangle}$$

Calculamos ahora  $\langle p^2 \rangle$  por un medio más directo:

$$\langle p^2 \rangle = \int \psi^*(p) p^2 \psi(p) dp; \quad \psi(x) = \int e^{\frac{ipx}{\hbar}} \phi(p) \frac{d^3p}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} = \int e^{\frac{ipx}{\hbar}} p_x \phi(p) \frac{d^3p}{\sqrt{2\pi\hbar}} \dots \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} = \int e^{\frac{ipx}{\hbar}} p_x^2 \phi(p) \frac{d^3p}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

Ahora recordemos el teorema  $\int f_1^* f_2 = \int g_1^* g_2$  si  $g_1$  y  $g_2$  son transformadas de Fourier de  $f_1$  y  $f_2$ .

$$\text{Entonces } \int \psi^*(x) \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi(x) dx = \int \phi^*(p) p_x^2 \phi(p) \frac{d^3p}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \langle p_x^2 \rangle$$

$$\therefore \boxed{\langle p_x^2 \rangle = \int \psi^*(x) \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi(x) dx}; \quad \boxed{p_x \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}; \quad p_y \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}}$$

Con estos elementos puede entenderse el discurso de Schiff en pág. 54 sobre las relaciones de incertidumbre  $\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar$ . En general, las transformaciones de Fourier son muy importantes pues la transform. de Fourier de una ec. lineal a coef. constantes es una expresión algebraica.

$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ ;  $\langle A \rangle = \int \psi^*(A\psi) dx$ ; Si  $A$  es una cantidad cuyo valor medio es real para cualquier  $\psi$ , se dice que el operador  $A$  es Hermitiano. Tienen la siguiente propiedad:

$$\int f^*(Ag) dx = \int (Af)^* g dx \quad \left| \quad \begin{array}{l} \text{El Hamiltoniano es Hermitiano.} \\ \int f^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} g dx = -\frac{\hbar}{i} \int \left( \frac{\partial f}{\partial x} \right)^* g dx = \int \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial x} \right)^* g dx. \\ \text{Linea el impulso } p \text{ es tt. Hermitiano.} \end{array} \right.$$

En general llamamos  $A_{nm} = \int \psi_n^*(A\psi_m) dx$



# Table de Operadores

A: Cantidad	Oper. en repr. x	Oper. en repr. p
Coord. x	Mult. por x	$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_x}$
Mom. p <sub>x</sub>	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$	Mult. p <sub>x</sub>
x <sup>2</sup>	x <sup>2</sup>	$-\frac{\hbar^2 \partial^2}{\partial p_x^2} = \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_x}\right)^2$
x+1	x+1	$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} + 1$
p <sup>2</sup>	$\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)^2$	p <sup>2</sup>
x+p	$\left(x + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)$	$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} + p$
$\frac{p^2}{2m} + V(x)$	$H = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + V(x)$	$\frac{p^2}{2m} \psi(p) + \int V(x) \psi(x) dx$
p <sub>x</sub> ?	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (\lambda \phi)$	$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} p$
x p ?		

$$\psi(p) = \int V(x) e^{i p x / \hbar} dx$$

$$\langle (x+1) \rangle = \int \psi^* (x+1) \psi = \int \psi^* x \psi + \int \psi^* \psi; \text{ Teorema } \langle (A+B) \rangle = \langle A \rangle + \langle B \rangle$$

$$\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} + 1\right) \psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial p} + \psi$$

Desde luego no podemos medir p+x. Naturalmente debemos suponer que se han multiplicado por constantes dimensionales de modo que tengan las mismas dimensiones. Tal vez pueda medirse una suma pero no es obvio. En todo caso la regla

$(A+B)\psi = A\psi + B\psi$  es una definición matemática mientras no se encuentre la experiencia para medir A+B.

Definimos  $(AB)\psi = A(B\psi)$ .  
 Ahora bien si en Fis. Clás. tenemos p<sub>x</sub>, en cuántica tenemos el problema de si es p<sub>x</sub> o x p. Algunas veces se hace  $\frac{1}{2}(p_x + x p)$ . Pero algunas veces esto no anda. Nadie consiguió un método general. Si el operador cuántico p<sub>x</sub> o el x p tienen un sentido clásico entonces ese sentido clásico es p<sub>x</sub>. Lo diríamos si en la tabla de derecha a izquierda. Pero no de izquierda a derecha. Si el operador clásico es p<sub>x</sub> no podemos inferir con seguridad que el oper. cuántico sea p<sub>x</sub> o x p o una dada combinación.

### Commutación

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (x \phi) = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\hbar}{i} \phi; \quad \boxed{p_x - x p = \frac{\hbar}{i}}; \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} x - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hbar}{i}$$

$$-p \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} - \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p}\right) p = \frac{\hbar}{i}$$

En general si A es Hermitiano y B también, ~~el producto no lo es~~. Pero si es Hermitiano  $\frac{1}{2}[AB+BA]$ , y  $\frac{i}{2}[AB-BA]$

Heisenberg tomó como base para la Mec Cuánt.  $px - xp = \frac{\hbar}{i}$   
 luego Schrödinger halló su famosa ecuación.  
 Dirac para evitar representaciones especiales introdujo la nota-  
 ción:

$$(F, Ag) = \int F^*(Ag) dx = \int (AF)^* g dx$$

La representación de Dirac es más elegante y general pero no da nada nuevo.

$$px^2 - x^2p = \frac{2\hbar}{i}x; \quad pF(x) - F(x)p = \frac{\hbar}{i}F'(x)$$

$$p^2x - xp^2 = \frac{2\hbar}{i}p \quad \rightarrow \text{tal vez este mal el signo.}$$

$$G(p)x - xG(p) = \frac{\hbar}{i}G'(p)$$

$$Hx - xH = +\frac{\hbar}{i}\frac{p_x}{m} \quad \text{En tres dimensiones } p_x y - y p_x = 0$$

$$Hp_x - p_x H = -\frac{\hbar}{i}\nabla_x V$$

### Problemas

1) Para el osc. armónico

$$\langle K.E \rangle = \frac{1}{2} E_n = \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle; \quad \langle \Phi | E \rangle = \frac{1}{2} E_n$$

2) En general:  $\langle K.E \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int (\nabla\psi)^* (\nabla\psi) dV$

3)  $px^2 - x^2p = (px - xp)x + x(px - xp) = \frac{\hbar}{i}x + x\frac{\hbar}{i} = \frac{2\hbar}{i}x$

4) Podemos definir el impulso angular:

$$M_x = p_y z - z p_y; \quad M_y = p_z x - x p_z; \quad M_z = p_x y - y p_x$$

$M^2 = M_x^2 + M_y^2 + M_z^2$  (esta es una notación inconveniente pues  $M^2$  no es el cuadrado de esa alguna).  
 Mostrar  $M_x M_y - M_y M_x = i\hbar M_z$  etc...

$$(M^2)M_z = M_z(M^2) \text{ etc... } \rightarrow \text{sigue dentro}$$

A partir de  $[M_x, M_y] = i\hbar M_z$  no podemos llegar a  $M_x = p_y z - z p_y$

Podemos mostrar  $M_z \psi = m\hbar \psi; \quad M^2 \psi = l(l+1)\psi$ .  
 los enteros o semienteros.

$$\langle x \rangle = \int \psi^*(x,t) x \psi(x,t) dx$$

Calcularemos como varía  $\langle x \rangle$  con el tiempo cuando

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi \quad \therefore \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} (H \psi)^*$$

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} x \psi + \int \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \left[ \int (H \psi)^* x \psi dx - \int \psi^* x (H \psi) dx \right] =$$

$$= \frac{i}{\hbar} \int \psi^* (H(x\psi) - x(H\psi)) = \int \psi^* \frac{i}{\hbar} (Hx - xH) \psi dx = \left\langle \frac{i}{\hbar} (Hx - xH) \right\rangle$$

y podemos definir  $\langle \dot{x} \rangle = \left\langle \frac{i}{\hbar} (Hx - xH) \right\rangle$  aunque esto no es más que una definición.

Operadores y Transformaciones

Algunas Observaciones Adicionales sobre Teoría de Moléculas.

La imprecisión de la posición del electrón dentro del átomo era  $\sim a$  (radio del átomo).  
 Sea  $\Delta$  la imprecisión en el movim. del núcleo.

$E_{el} \approx \frac{1}{2} M \omega^2 a^2$  (oscilador armónico)  $\therefore \omega = \sqrt{\frac{E_{el}}{Ma^2}}$



$\Delta \approx \frac{a}{\sqrt{M/m}}$

$E_{el} \frac{(r-r_0)^2}{a^2} \approx \frac{1}{2} M \omega^2 (r-r_0)^2$

$\omega = \sqrt{\frac{E_{el}}{Ma^2}}$ ;  $\Delta^2 M \omega^2 \approx \frac{1}{2} \hbar \omega$ ;  $\Delta \approx \frac{\hbar}{M \omega} = \frac{\hbar}{M} \sqrt{\frac{Ma^2}{E_{el}}} = \frac{a \hbar}{\sqrt{M E_{el}}}$

$\frac{a \hbar^2}{\sqrt{M m e^4}}$ ;  $E_{el} \approx \frac{e^2}{a} \approx \frac{m e^4}{\hbar^2} \approx \frac{a \hbar^2}{e^2 \sqrt{M m}} \approx \frac{a^2}{\sqrt{M/m}}$

No entendi bien esto.

Tomamos:  $H = H' - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2$ ;  $E_{sist} \approx \frac{\int \psi^* H \psi}{\int \psi^* \psi}$  (principio variacional).

$\psi = \phi(R) \psi_R(r)$ ;  $H' \psi_R = E(R) \psi_R$   
 ( $r$  es la coorden. electrónica;  $R$  la de los núcleos).

$\int \psi^* H \psi = \int \phi^*(R) \psi_R^*(r) (H'(r) - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2) \phi(R) \psi_R(r) d^3R d^3r =$   
 $\int E(R) \phi^*(R) \phi(R) d^3R - \frac{\hbar^2}{2M} \int \phi^*(R) \psi_R^*(r) [(\nabla_R^2 \phi(R)) \psi_R(r) + \phi(R) \nabla_R^2 \psi_R(r) + (\nabla_R \phi(R)) \cdot (\nabla_R \psi_R(r))] d^3R d^3r$

La última integral (la del último término que he de decir) puede escribirse:

$\int \phi_R^* \nabla \phi(R) \cdot \int \psi_R^*(r) \nabla_R \psi_R(r) d^3r d^3R$

~~Supongamos que el electrón está en un estado no fundamental y por tanto es real. Entonces  $\psi_R^*(r) = \psi_R(r)$  también paridad~~

~~y paridad que  $\nabla_R$~~   
 Supone que  $\psi$  es un estado fundamental, es real. Entonces llega a la conclusión que un término vale

$\int \phi_R^* \nabla \phi(R) \cdot \frac{1}{2} \int \nabla_R (\psi_R(r))^2 d^3r d^3R = \int d^3R \phi_R^* \nabla \phi(R) \nabla_R(1) = 0$

De lo do términos que teníamos antes en el tratam. de Born-Oppenheimer, vemos que no debemos estudiar el primer término para ver la corrección, sino sólo el segundo.

$(E(R) \phi^*(R) \phi(R) d^3R) - \frac{\hbar^2}{2M} \int \phi^* \nabla^2 \phi + \int \phi^*(R) \phi(R) N(R) d^3R$

$N(R) = \frac{\hbar^2}{2M} \int \psi_R^*(r) \nabla_R^2 \psi_R(r) d^3r$   $\rightarrow$  Este término parece representar energías virtuales de los electrones (es decir no correcciones por

inercia de los electrones).  
 $\rightarrow$  Esto es equivalente a la ec. de Schrödinger.

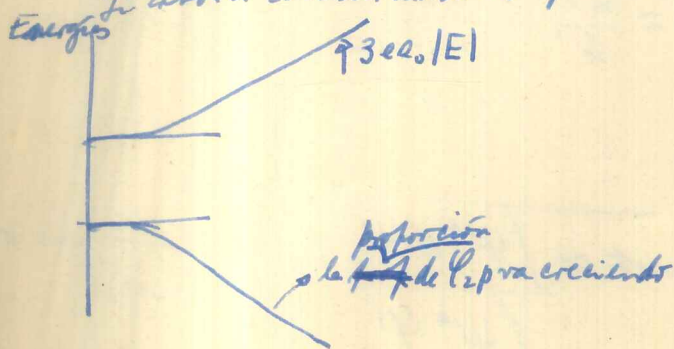
El movimiento lento de los núcleos modifica poco la energía de los electrones o la función de onda que ellos toman para encontrar la energía mínima.

Observaciones sobre los problemas

Ef. Stark

Hay una regla que dice que un elemento no puede emitir radiaciones sin cambiar la paridad del estado. Basándose en eso un señor decía en el Caltee, que ciertas aparentes anomalías a esa regla verificadas en el Paladio podría deberse a un efecto Stark de primer orden en el Paladio. El estudio del efecto Stark fue un gran éxito de la ecuac. de Schrödinger pues esta permitió calcularlo cosa que no se había logrado antes (por lo menos con facilidad).

Si ahora consideramos el efecto del núcleo y el Stark junto:



Aquí los dos funciones tienen una cierta diferencia inicial por acción del núcleo. En general podemos usar la teoría de perturbaciones para estados degenerados cuando podemos esperar que la diferencia final sea muy grande respecto a la inicial.

$$U_{n\text{úcl}} + eEz$$

Campo Eléctrico

Átomo de Helio (2 electrones);  $\frac{e^2}{r_{12}}$

$$\begin{aligned} (1s)(2s) &\rightarrow \begin{cases} \psi_{1s}(r_1)\psi_{2s}(r_2) \\ \psi_{1s}(r_2)\psi_{2s}(r_1) \end{cases} \\ (1s)(2p_0) & \\ (1s)(2p_{+1}) &\text{ etc...} \\ (1s)(2p_{-1}) & \end{aligned}$$

Resultados:

$$\begin{array}{cc} \Delta E - U_{11} & -U_{21} \\ -U_{12} & \Delta E - U_{11} \\ & \Delta E - U_{33} \quad -U_{34} \\ & -U_{43} \quad \Delta E - U_{33} \end{array}$$

$$(\Delta E - U_{11})^2 = |U_{21}|^2; \quad \Delta E = U_{11} + U_{21} \\ U_{11} - U_{21}$$

$$\Delta E = \begin{array}{c} U_{33} + U_{34} \\ U_{33} - U_{34} \end{array} \quad \text{3 veces degenerado.}$$

— (1s)(2p) sim.  
— (1s)(2p) antis.

3 veces degenerado

Los estados antisimétricos son más bajo pues los dos electrones están en general más lejos y hay menos repulsión (están más ligados). El estado (1s)(2p) es mayor que el

— (1s)(2s) sym.  
— (1s)(2s) antisym.

(1s)(2s) porque el (2s) puede entrar más cerca del núcleo (pues l=0) y la atracción es mayor. Para separar los tres estados degenerados conviene usar un campo magnético.

— (1s)<sup>2</sup>

El efecto Stark de primer orden esto puede existir si hay estados degenerados de diferente paridad. Esto es una anomalía (existe en el H y tal vez en el He) pues en general la degeneración se debe a diferencias de orientaciones. En el caso del He, por ej. el ef. f. 1<sup>er</sup> orden no es posible pues la degeneración se debe a las diferentes orientaciones espaciales y no a las diferencias de paridad.

creo que esto es el sentido que  
 $\langle A \rangle = \langle \hat{i}(x) + \frac{dA}{dt} \rangle$

En general  $\left[ \dot{A} = \frac{i}{\hbar} (HA - AH) + \frac{dA}{dt} \right]$  Ec. de Heisenberg.

esto es la ecuación del movimiento en el lenguaje de Heis.

Ej.  $H = \frac{\vec{p} \cdot \vec{p}}{2m} + V(x, y, z, t)$

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

O sea el valor esperado del momento es igual a m ~~veces~~ la velocidad del centro de gravedad. Obténase también  $\dot{H} = \frac{dV}{dt}$

$\dot{p}_x = -\frac{\partial V}{\partial x} \therefore \dot{p} = -\text{grad} V$

$M_x = 0$  si  $V = V(r)$  (Ver si eso sucede si  $V = V(r, t)$ )

Formalmente podemos definir

$e^{-\frac{it}{\hbar} H} = 1 + \frac{it}{\hbar} H + \frac{(it)^2}{2\hbar^2} H^2 + \dots$

Si  $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$  si para  $t=0$   $\Psi = \Psi_0$  se obtiene

$\Psi(t) = e^{-\frac{it}{\hbar} H} \Psi_0$  ya que derivando ambas miembros

$\frac{d\Psi}{dt} = \frac{i}{\hbar} H \Psi_0 + \left(\frac{it}{\hbar}\right) \frac{i}{\hbar} H^2 \Psi_0 + \dots = -\frac{it}{\hbar} H e^{\frac{it}{\hbar} H} \Psi_0 = -\frac{i}{\hbar} H \Psi$

siendo

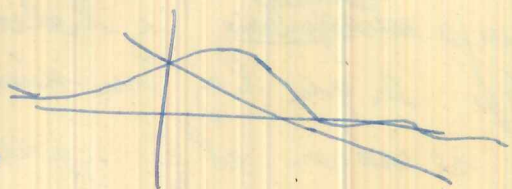
$\Psi(x, t) = \int K(x, t, y, 0) \Psi(y, 0) dy$  puede decirse

que  $K = e^{-\frac{it}{\hbar} H}$  en la representación x

Ecuación de Schr. en la representación p

Estudiarémos ante todo la interesante ecuación

$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} - Fx \Psi = E \Psi$



En representación x tomase una función de Bessel de 3º orden.

En representación p vuelve ser

$\frac{p^2}{2m} \Phi + F \frac{d\Phi}{dp} = E \Phi$

Podremos poner sin pérdida de generalidad  $E=0$  ya que equivale a un cambio de coordenadas  $x \rightarrow x' + \frac{E}{F}$

$\frac{d\Phi}{\Phi} = -\frac{1}{\hbar} \frac{p^2}{2mF} dp$   $\Phi = A e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^3}{6mF}}$

$\Psi(x) = A \int e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^3}{6mF}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp$  (integral de Airy que puede

resolveme mediante funciones de Bessel. Querremos hallar su forma asintótica

Si  $x$  es grande  $\gg 0$ , el exponente varía muy rápidamente con  $p$  menor cuando es un mínimo (Método del steepest descent o stationary phase)

El  $p$  que da el mínimo será  $\frac{\partial}{\partial p} = x \therefore \text{fase mín.} = -\frac{i}{4} \left( \frac{p^3}{6mF} + px \right)$

Substituyendo  $p = \bar{p} + q$

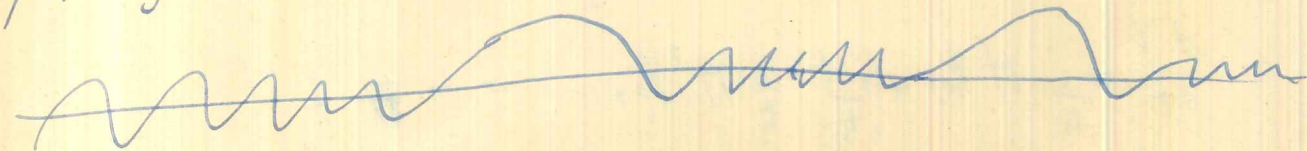
$$\text{fase} = -\frac{i}{4} \left( \frac{\bar{p}^3}{6mF} - \bar{p}x + \frac{\bar{p}}{2mF} q^2 + \frac{q^3}{6mF} \right)$$

Por otro lado  $\bar{p}$  es bastante grande como para que el penúltimo término sea bastante grande cuando el último es muy pequeño. Querremos entonces el último término, cuando  $q$  es pequeño por el razonamiento anterior, y cuando  $q$  es un poco más grande ya la fase es tan grande que no da lugar a tener contribución a la integral.

$$\Psi \sim A \int e^{-\frac{i}{4} \left( \frac{\bar{p}^3}{6mF} - \bar{p}x \right)} e^{-\frac{i}{4} \frac{\bar{p}}{2mF} q^2} dq = A e^{-\frac{i}{4} \left( \frac{\bar{p}^3}{6mF} - \bar{p}x \right)} \sqrt{\frac{2mF \pi \hbar}{x \bar{p}}} e^{-\frac{i\pi}{4}}$$

$$= A e^{-\frac{i}{4} \left( -\frac{2}{3} \sqrt{2mF} x^3 \right)} \left( \frac{\sqrt{2mF \pi \hbar}}{(2mFx)^{1/4}} \right) e^{-\frac{i\pi}{4}} + A e^{-\frac{i}{4} \left( -\frac{2}{3} \sqrt{\dots} \right)} \left( \dots \right) e^{\frac{i\pi}{4}}$$

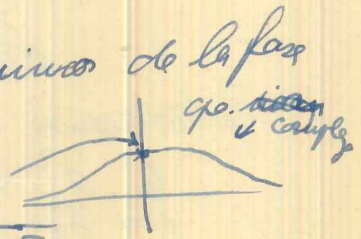
ya que hay dos mínimos dados por  $\bar{p} = \pm \sqrt{2mFx}$



$\therefore \Psi \approx \frac{2A}{x^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3\hbar} \sqrt{2mFx^3} + \frac{\pi}{4}\right)$  y comparando con la WKB

$$\int \sqrt{2m(E-V)} dx = \int \sqrt{2mFx} dx = \frac{2}{3} \sqrt{2mF} x^{3/2}$$

En el caso en que  $x$  es grande pero negativo, no hay mínimos de la fase para valores reales de  $p$ , pero podemos integrar sobre el campo complejo imaginario, y habrá un valor imaginario de  $p$  en que hay un mínimo  $\bar{p} = \pm i \sqrt{-2mFx}$



El  $i$  se irá con el  $\frac{i}{4}$  y quedará en la fase un  $+q^2$  o  $-q^2$  (real), o sea un exponente real y ningún  $\frac{\pi}{4}$ , ~~caso~~ es predicho por la teoría de WKB.

Para el caso  $l=0$   $r \approx r_0$  (esto subdividimos la ecuac. en radial y angular)

$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{e^2 u}{r} = Eu$  ecuación fácil de resolver multiplicando por  $r$  (escribiendo  $x$  en lugar de  $r$ ) y pasando al espacio  $p$ .

Problema 1)

Mostrar para el oscilador armónico  $L = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2)$ , que  
 $K(x_2, t_2; x_1, t_1) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar i \sin\omega T}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}(x_2, t_2; x_1, t_1)}$

Hagamos  $x(t) = \bar{x}(t) + y(t)$ ;  $\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \rightarrow \ddot{\bar{x}} = -\omega^2 \bar{x}$

$K = \int_{\text{toda Tray. de } t_1 \text{ a } t_2} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} L dt} \mathcal{D}[x(t)] = \int_{\text{tray.}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \frac{m}{2} (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) dt} \mathcal{D}[x(t)]$

$I = \int_{t_1}^{t_2} (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) dt = \int_{t_1}^{t_2} [(\dot{\bar{x}} + \dot{y})^2 - \omega^2 (\bar{x} + y)^2] dt =$

$\int_{t_1}^{t_2} [(\dot{\bar{x}})^2 + 2\dot{\bar{x}}\dot{y} + \dot{y}^2 - \omega^2 \bar{x}^2 - \omega^2 y^2 - 2\omega^2 \bar{x}y] dt$

Però  $\int_{t_1}^{t_2} \dot{\bar{x}}\dot{y} dt = [y\dot{\bar{x}}]_{t_1}^{t_2} - \int y\ddot{\bar{x}} dt$   
 (por partes)  $\rightarrow 0$  porque  $y=0$  en los límites.

Luego:

$I = \int_{t_1}^{t_2} [\dot{\bar{x}}^2 - 2y\ddot{\bar{x}} + \dot{y}^2 - \omega^2 \bar{x}^2 - \omega^2 y^2 - 2\omega^2 \bar{x}y] dt =$

$\int_{t_1}^{t_2} [\dot{\bar{x}}^2 - 2y(\ddot{\bar{x}} + \omega^2 \bar{x}) + \dot{y}^2 - \omega^2 \bar{x}^2 - \omega^2 y^2] dt = \int_{t_1}^{t_2} [(\dot{\bar{x}}^2 - \omega^2 \bar{x}^2) + (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2)] dt$   
 0 (Tray. clásica)

Luego  $S = \int_{t_1}^{t_2} L dt = \frac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) dt = \frac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} (\dot{\bar{x}}^2 - \omega^2 \bar{x}^2) + \frac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2) dt$

$S_{cl} + \frac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2) dt$

Queda entonces:  $K = \int_{\text{toda Tray. entre } t_1 \text{ y } t_2} e^{\frac{i}{\hbar} S} \mathcal{D}[x(t)] = e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}} \int_{\text{tray } y=0 \text{ en } t_1, t_2} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2) dt} \mathcal{D}[y(t)]$

Luego  $K = F(t_1, t_2) e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}} = F(t_1, t_2) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} (\dot{\bar{x}}^2 - \omega^2 \bar{x}^2) dt}$  función sólo de  $t_1$  y  $t_2$

donde  $F(t_1, t_2)$  es una función de  $t_2 - t_1$ .

Calculando  $S_{cl}$  para el oscilador armónico tenemos:

$S_{cl} = \frac{m\omega}{2 \sin \omega(t_2 - t_1)} [(x_1^2 + x_2^2) \cos \omega(t_2 - t_1) - 2x_1 x_2]$

Determinemos ahora la función  $F(t_1, t_2) = \Psi(t_2 - t_1)$ . Por el principio de combinación de amplitudes:

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

$$\begin{aligned} & \psi(t_2 - t_1) e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2} \sin \omega(t_2 - t_1)} [(x_1^2 + x_2^2) \cos \omega(t_2 - t_1) - 2x_1 x_2] \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(t_3 - t_1) \psi(t_2 - t_3) e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2} \sin \omega(t_3 - t_1)} [(x_1^2 + x_3^2) \cos \omega(t_3 - t_1) - 2x_1 x_3] e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2} \sin \omega(t_2 - t_3)} [(x_2^2 + x_3^2) \cos \omega(t_2 - t_3) - 2x_2 x_3] dx_3 \\ &= \psi(t_3 - t_1) \psi(t_2 - t_3) e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2} \left[ \frac{x_1^2 \cos \omega(t_3 - t_1) + x_2^2 \cos \omega(t_2 - t_3)}{\sin \omega(t_3 - t_1) \sin \omega(t_2 - t_3)} \right]} \\ & \times \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2} \left( \frac{\cos \omega(t_3 - t_1)}{\sin \omega(t_3 - t_1)} + \frac{\cos \omega(t_2 - t_3)}{\sin \omega(t_2 - t_3)} \right) x_3^2 - \frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2} \left[ \frac{2x_2}{\sin \omega(t_2 - t_3)} + \frac{2x_1}{\sin \omega(t_3 - t_1)} \right] x_3} dx_3 \end{aligned}$$

Por la integral I.1:

$$= \psi(t_3 - t_1) \psi(t_2 - t_3) e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2} \left[ \frac{x_1^2 \cos \omega(t_3 - t_1) + x_2^2 \cos \omega(t_2 - t_3)}{\sin \omega(t_3 - t_1) \sin \omega(t_2 - t_3)} \right]} \sqrt{\frac{\pi i 2\hbar \sin \omega(t_3 - t_1) \sin \omega(t_2 - t_3)}{m\omega \sin \omega(t_2 - t_1)}} x$$

$$\times \exp. \left[ -\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2} \frac{[x_2 \sin \omega(t_3 - t_1) + x_1 \sin \omega(t_2 - t_3)]^2}{\sin \omega(t_2 - t_3) \sin \omega(t_3 - t_1) \sin \omega(t_2 - t_1)} \right]$$

Las exponenciales se cancelan. Queda:

$$\psi(t_2 - t_1) = \psi(t_3 - t_1) \psi(t_2 - t_3) \sqrt{\frac{\pi i 2\hbar \sin \omega(t_3 - t_1) \sin \omega(t_2 - t_3)}{m\omega \sin \omega(t_2 - t_1)}}$$

Haciendo la sustitución:

$$\psi(t_j - t_i) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi i 2\hbar \sin \omega(t_j - t_i)}} \psi(t_j - t_i) \text{ obtenemos:}$$

$$\psi(t_2 - t_1) = \psi(t_3 - t_1) \psi(t_2 - t_3) \therefore \psi \text{ es la exponencial:}$$

$$\psi(t_2 - t_1) = e^{k(t_2 - t_1)}, \dots \psi(T) = e^{kT} \text{ Eligiendo } k=0: \psi(T) = 1$$

$$\psi(T) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar i}} \frac{1}{\sqrt{\sin \omega T}} \quad K(2,1) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar i \sin \omega(t_2 - t_1)}} e^{\frac{i}{\hbar} \text{Sec.}}$$

$$K(2,1) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar i \sin \omega(t_2 - t_1)}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2} \sin \omega(t_2 - t_1)} [(x_1^2 + x_2^2) \cos \omega T - 2x_1 x_2]$$

(1 page) Problema 3  $\Rightarrow$   $\frac{i}{\hbar}$  Sec  
 Demostrar  $K = F(t_1, t_2) e^{\frac{i}{\hbar} \text{Sec}}$   
 cuando  $L = \alpha(t) \dot{x}^2 + V(x)$



Problema ; ~~hallar el K cuando~~  $\frac{i}{\hbar} Scl$   
 Demostar  $K = F(t_1, t_2) e^{\frac{i}{\hbar} Scl}$  cuando

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

Trayect. clásica :  $\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \quad \therefore$

$$2\alpha \ddot{x} + 2\beta \dot{x} + 2\dot{x}\dot{\beta} + \dot{\gamma}x + \dot{\beta}x + \dot{\alpha} - \beta = 0$$

$$K = \int_{t_1}^{t_2} e^{\frac{i}{\hbar} Scl} D_{x(t)}$$

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

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L dt = \int_{t_1}^{t_2} (\alpha \dot{x}^2 + \beta x \dot{x} + \gamma x^2 + A \dot{x} + B x + C) dt =$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} [\alpha (\dot{\bar{x}} + \dot{y})^2 + \beta (\bar{x} + y) (\dot{\bar{x}} + \dot{y}) + \gamma (\bar{x} + y)^2 + A (\dot{\bar{x}} + \dot{y}) + B (\bar{x} + y) + C] dt =$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} [\alpha \dot{\bar{x}}^2 + 2\alpha \dot{\bar{x}}\dot{y} + \alpha \dot{y}^2 + \beta \bar{x}\dot{\bar{x}} + \beta \bar{x}\dot{y} + \beta y\dot{\bar{x}} + \beta y\dot{y} + \gamma \bar{x}^2 + \gamma y^2 + 2\gamma \bar{x}y + A\dot{\bar{x}} + A\dot{y} + B\bar{x} + B y + C] dt$$

Siendo  $\int_{t_1}^{t_2} 2\alpha \dot{\bar{x}}\dot{y} dt = 2\alpha \dot{\bar{x}} y \Big|_{t_1}^{t_2} - 2 \int y \ddot{\bar{x}} dt - 2 \int y \dot{\bar{x}} \dot{\alpha} dt$

$$\int_{t_1}^{t_2} \beta \bar{x}\dot{y} = \left[ \beta \bar{x} y \right]_{t_1}^{t_2} - \int y \beta \dot{\bar{x}} + y \bar{x} \dot{\beta} dt$$

$$\int A \dot{y} dt = \left[ A y \right]_{t_1}^{t_2} - \int y \dot{A} dt \quad \text{se obtiene}$$

$$S = \int_{t_1}^{t_2} [\alpha \dot{\bar{x}}^2 - 2y \ddot{\bar{x}} - 2y \dot{\bar{x}} \dot{\alpha} + \alpha \dot{y}^2 + \beta \bar{x}\dot{\bar{x}} - y \beta \dot{\bar{x}} - y \bar{x} \dot{\beta} + \beta y \dot{\bar{x}} + \beta y \dot{y} + \gamma \bar{x}^2 + \gamma y^2 + 2\gamma \bar{x}y + A\dot{\bar{x}} - A\dot{y} + B\bar{x} + B y + C] dt =$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} [-y(2\ddot{\bar{x}} + 2\dot{\bar{x}}\dot{\alpha} + \dot{\alpha}\bar{x} - 2\dot{\alpha}\bar{x} + A - B) + (\alpha \dot{\bar{x}}^2 + \beta \bar{x}\dot{\bar{x}} + \gamma \bar{x}^2 + A\dot{\bar{x}} + B\bar{x} + C) + (\alpha \dot{y}^2 + \beta y\dot{y} + \gamma y^2)] dt$$

La ecuación del movimiento clásico anula el primer paréntesis; el segundo paréntesis es el lagrangiano clásico ...

$$S = Scl + \int_{t_1}^{t_2} (\alpha \dot{y}^2 + \beta y \dot{y} + \gamma y^2) dt \quad \text{y por ello}$$

$$K(t_1, t_2) = \int_{y=0 \text{ en } t_1}^{y=0 \text{ en } t_2} e^{\frac{i}{\hbar} Scl} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} (\alpha \dot{y}^2 + \beta y \dot{y} + \gamma y^2) dt} D_y(t) = e^{\frac{i}{\hbar} Scl} \int_{t_1}^{t_2} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} (\alpha \dot{y}^2 + \beta y \dot{y} + \gamma y^2) dt} D_y(t) dt$$

Siendo la integral función de  $t_1$  y  $t_2$  solamente

$$K(t_1, t_2) = F(t_1, t_2) e^{\frac{i}{\hbar} Scl} \quad \text{ó} \quad K(t_1, t_2) = \mathcal{U}(t_2, t_1) e^{\frac{i}{\hbar} Scl}$$

La forma de la función  $\mathcal{U}(t_2, t_1)$  se determina, como la sola hecha para la part. libre y para el oscilador armónico, por el principio de combinación de las amplitudes.

Problema. Calcular  $K$  para la partícula libre en 3 dimensiones.

$$K = \int e^{\frac{i}{\hbar} S} \mathcal{D}[\vec{r}(t)]; \quad L = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2)$$

Hacemos:  $\begin{cases} x = \bar{x} + X \\ y = \bar{y} + Y \\ z = \bar{z} + Z \end{cases}$  Ecu. del movim. clásicos:  $\begin{cases} \ddot{x} = 0 & \dot{x} = \frac{x_2 - x_1}{t_2 - t_1} = \text{cte} \\ \ddot{y} = 0 & \dot{y} = \frac{y_2 - y_1}{t_2 - t_1} \\ \ddot{z} = 0 & \dot{z} = \frac{z_2 - z_1}{t_2 - t_1} \end{cases}$

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L dt = \frac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} \{ (\dot{\bar{x}} + \dot{X})^2 + (\dot{\bar{y}} + \dot{Y})^2 + (\dot{\bar{z}} + \dot{Z})^2 \} dt = \frac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} [ \dot{\bar{x}}^2 + \dot{\bar{y}}^2 + \dot{\bar{z}}^2 ] dt$$

$$+ \frac{m}{2} \cdot 2 \int_{t_1}^{t_2} [ \dot{\bar{x}} \dot{X} + \dot{\bar{y}} \dot{Y} + \dot{\bar{z}} \dot{Z} ] + \frac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} (\dot{X}^2 + \dot{Y}^2 + \dot{Z}^2) dt$$

Pero  $\int \dot{\bar{x}} \dot{X} dt = \int \dot{\bar{y}} \dot{Y} dt = \int \dot{\bar{z}} \dot{Z} dt = 0$  por lo ya visto.

Luego  $S = \frac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} (\dot{\bar{x}}^2 + \dot{\bar{y}}^2 + \dot{\bar{z}}^2) dt + \frac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} (\dot{X}^2 + \dot{Y}^2 + \dot{Z}^2) dt$

$$K(2,1) = \int \int \int e^{\frac{i}{\hbar} S(2,1)} \mathcal{D}[X] \mathcal{D}[Y] \mathcal{D}[Z]$$

$\left. \begin{array}{l} X=0 \text{ en } t_1, t_2 \\ Y=0 \text{ en } t_1, t_2 \\ Z=0 \text{ en } t_1, t_2 \end{array} \right\}$   $\left. \begin{array}{l} \dot{X}=0 \\ \dot{Y}=0 \\ \dot{Z}=0 \end{array} \right\}$

$$K(2,1) = e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}} \int \int \int e^{\frac{m}{2} \int_{t_1}^{t_2} (\dot{X}^2 + \dot{Y}^2 + \dot{Z}^2) dt} \mathcal{D}[X] \mathcal{D}[Y] \mathcal{D}[Z]$$

función sólo de  $t_1, t_2$ .

$$K(2,1) = \Psi(t_2 - t_1) e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}} \text{ con}$$

$$S_{cl} = \frac{m}{2} \frac{\{ (x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2 \}}{t_2 - t_1} = \frac{m}{2} \frac{(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)^2}{t_2 - t_1}$$

Calculamos  $\Psi(t_2 - t_1)$ . Usando el principio de combinación de amplitudes:

$$K(2,1) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_3 dy_3 dz_3 K(3,1) K(2,3) \text{ obtenemos como hicimos para una dimensión:}$$

$$\Psi(t_2 - t_1) = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar (t_2 - t_1)} \right)^{3/2}$$

Entonces:

$$K(2,1) = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar (t_2 - t_1)} \right)^{3/2} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)^2}{t_2 - t_1}}$$

Problema: Mostrar que la probabilidad que una partícula llegue a la pantalla es independiente de  $\tau$ .

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) dx = \frac{m}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{1}{(T+\tau)^2 + \left(\frac{2\hbar T\tau}{4b^2m}\right)^2}} \cdot \sqrt{\frac{\left(\frac{1}{b^2}\right)^2 + \left[\frac{2m}{\hbar} \left(\frac{1}{T} + \frac{1}{\tau}\right)\right]^2}{\frac{m^2}{\hbar^2\tau^2} + \frac{2}{b^2}}} \pi =$$

$$= \frac{m}{2\pi\hbar T} \sqrt{2\pi} \cdot b$$

Como ya vimos para el corpusculo libre, la probabilidad para que la partícula pase de  $OP$  a  $x_1 T$  es proporcional a  $\frac{1}{T}$ ; el número de partículas que llegan a la ranura es prop. a  $\frac{1}{T}$ . Nuestro resultado dice que todas las partículas que llegan a la ranura llegan a la pantalla sea cual fuera  $\tau$  (ya que para  $\tau=0$  todas llegan y el resultado no depende de  $\tau$ ).



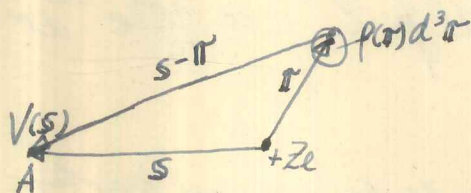
1) Se tiene una carga positiva  $Ze$  y alrededor un sistema de cargas electrónicas con densidad  $\rho(\pi)$ . Demuestra:

$$v(q) = \frac{4\pi\hbar^2 e^2}{q^2} \left( Z - \int e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot \pi} \rho(\pi) d^3\pi \right)$$

97 ←

La carga positiva  $Ze$  actúa como un potencial Coulomb y según vimos en clase su contribución a  $v(q)$  es  $\frac{4\pi\hbar^2 e^2}{q^2} Z$ . Las contribuciones a  $v(q)$  de la carga positiva y de la nube electrónica son aditivas ya que  $v(q)$  depende linealmente del potencial  $V$ . Estudiemos ahora la contribución de la nube electrónica.

Al punto A donde se produce el scattering, es decir donde se calcula  $V$ , le asigno el vector  $s$  por definición.



Por definición:

$$v(q)_d = \int e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot s} V(s) d^3s$$

Calculemos  $V(s)$ . El elemento de volumen  $d^3\pi$  contribuye en  $-\frac{e^2 \rho(\pi) d^3\pi}{|s-\pi|}$ . Luego la nube electrónica origina en  $s$  un potencial

$$V(s)_d = -e^2 \int \frac{\rho(\pi) d^3\pi}{|s-\pi|}$$

$$v(q)_d = -e^2 \iint \frac{e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot s} \rho(\pi) d^3\pi d^3s}{|s-\pi|} \quad \text{Calculemos la integral respecto a } s:$$

$$\int \frac{e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot s}}{|s-\pi|} d^3s = \int \frac{e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot (s-\pi + \pi)}}{|s-\pi|} d^3(s-\pi) =$$

$$e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot \pi} \int \frac{e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot v}}{|v|} d^3v \quad \text{donde } v = s-\pi$$

Elegimos coordenadas polares esféricas de modo que  $q$  sea el eje polar:

$$= 2\pi e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot \pi} \int_{-1}^1 \int_0^\infty \frac{e^{\frac{i}{\hbar} q v \cos\theta}}{v} v^2 d(\cos\theta) dv = 2\pi e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot \pi} \int_0^\infty \frac{e^{\frac{i}{\hbar} q v} - e^{-\frac{i}{\hbar} q v}}{\frac{i}{\hbar} q v} dv =$$

$$\frac{2\pi e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot \pi}}{\frac{i}{\hbar} q} \cdot 2i \int_0^\infty \sin\left(\frac{qv}{\hbar}\right) dv = \frac{4\pi e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot \pi}}{q^2} \hbar^2 \int_0^\infty \sin\left(\frac{qv}{\hbar}\right) d\left(\frac{qv}{\hbar}\right) =$$

$$\frac{4\pi\hbar^2}{q^2} e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot \pi} \cos\left(\frac{qv}{\hbar}\right) \Big|_{\frac{qv}{\hbar}=0}^{\frac{qv}{\hbar}=\infty} = \frac{4\pi\hbar^2}{q^2} e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot \pi}$$

25

Luego

$$v(q)_d = -\frac{4\pi\hbar^2 e^2}{q^2} \int e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot \pi} \rho(\pi) d^3\pi \quad \left| v(q) = \frac{4\pi\hbar^2 e^2}{q^2} \left( Z - \int e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot \pi} \rho(\pi) d^3\pi \right) \right|$$

2) Una aproximación grosera del potencial de un átomo es:

$$\frac{Ze^2}{r} e^{-r/a}; \quad a = \frac{\hbar^2}{me^2 Z^{1/3}}; \quad \text{Demostrar que para ese}$$

potencial:  $v(q) = \frac{4\pi Ze^2 \hbar^2}{q^2 + (\hbar/a)^2}$ , Calcular  $\sigma_{\text{tot.}} = \int \sigma(\vartheta) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$

Para potenciales centrales:

$$v(q) = \frac{4\pi \hbar}{q} \int_0^\infty \sin\left(\frac{qr}{\hbar}\right) V(r) r dr = \frac{4\pi \hbar Ze^2}{q} \int_0^\infty \sin\left(\frac{qr}{\hbar}\right) e^{-r/a} dr$$

Llamo  $\alpha = q/\hbar$ ;  $\beta = -1/a$ . La integral

$I = \int \sin \alpha r e^{\beta r} dr$  puede resolverse integrando dos veces por partes:

$$I = \frac{e^{\beta r}}{\beta} \sin \alpha r - \frac{\alpha}{\beta} \int e^{\beta r} \cos \alpha r dr; \quad \int e^{\beta r} \cos \alpha r dr = \frac{e^{\beta r}}{\beta} \cos \alpha r + \frac{\alpha}{\beta} \int e^{\beta r} \sin \alpha r dr$$

Luego:  $I = \frac{e^{\beta r}}{\beta} \sin \alpha r - \frac{\alpha}{\beta^2} e^{\beta r} \cos \alpha r - \frac{\alpha^2}{\beta^2} I \therefore \left(\frac{\beta^2 + \alpha^2}{\beta^2}\right) I = \frac{e^{\beta r}}{\beta} \left[\sin \alpha r - \frac{\alpha}{\beta} \cos \alpha r\right]$

$$\therefore \boxed{I = \int \sin \alpha r e^{\beta r} dr = \frac{\beta}{\beta^2 + \alpha^2} e^{\beta r} \left[\sin \alpha r - \frac{\alpha}{\beta} \cos \alpha r\right]}$$

$$\int_0^\infty \sin\left(\frac{qr}{\hbar}\right) e^{-r/a} dr = \frac{-1/a}{1/a^2 + q^2/\hbar^2} e^{-r/a} \left[\sin \alpha r + \frac{q/\hbar}{1/a} \cos \alpha r\right] \Big|_0^\infty = \frac{q/\hbar}{1/a^2 + q^2/\hbar^2}$$

$$v(q) = \frac{4\pi \hbar Ze^2}{q} \frac{q}{\hbar} \frac{1}{\left(1/a^2 + q^2/\hbar^2\right)} = \boxed{\frac{4\pi Ze^2 \hbar^2}{(\hbar/a)^2 + q^2} = v(q)}$$

La sección diferencial será recordando que  $q = 2P \sin \vartheta/2$ :

$$\sigma_{\text{dif.}} = \left(\frac{m}{2\pi \hbar^2}\right)^2 |v(q)|^2 = \left(\frac{m}{2\pi \hbar^2}\right)^2 (4\pi Ze^2 \hbar^2)^2 \frac{1}{\left\{\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + q^2\right\}^2} =$$

$$\boxed{\left(\frac{m}{2\pi \hbar^2}\right)^2 (2Ze^2 \hbar^2)^2 \frac{1}{\left\{\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + 4P^2 \sin^2 \vartheta/2\right\}^2} = \sigma_{\text{dif.}} = (2mZe^2)^2 \frac{1}{\left[\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + 4P^2 \sin^2 \vartheta/2\right]^2}}$$

$$\sigma_{\text{Tot.}} = \int \int \sigma(\vartheta) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = 2\pi (2mZe^2)^2 \int_0^\pi \frac{\sin \vartheta d\vartheta}{\left[\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + 4P^2 \sin^2 \vartheta/2\right]^2}$$

$$I = \int_{-1}^{+1} \frac{d(\cos \vartheta)}{\left[\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + 2P^2 - 2P^2 \cos \vartheta\right]^2} = \frac{1}{2P^2} \frac{1}{\left[\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + 2P^2 - 2P^2 \cos \vartheta\right]} \Big|_{\cos \vartheta = -1}^{\cos \vartheta = 1} = \frac{2}{\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 \left[\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + 4P^2\right]}$$

ao que aparece  
 com o nome de  
 centro de  
 massa

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{16\pi m^2 Z^2 e^4}{\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 \left[ \left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + 4P^2 \right]}$$

El caso de Coulomb se obtiene en el límite  $a \rightarrow \infty$

$(\sigma_{\text{tot}})_{\text{Coul}} = \infty$ . Comparemos los  $\sigma_{\text{dif}}$  para este caso y el caso Coul.

$$\sigma_{\text{dif}} = \frac{4m^2 Z^2 e^4}{\left\{ \left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + 4P^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2} \right\}^2}$$

$$(\sigma_{\text{dif}})_{\text{Coul}} = \frac{4m^2 Z^2 e^4}{\left\{ 4P^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2} \right\}^2}$$

Para ángulos de scattering muy pequeños ( $\vartheta \rightarrow 0$ ):  $(\sigma_{\text{dif}})_{\text{Coul}} \rightarrow \infty$ , es decir para potencial Coul. hay una gran probabilidad de encontrar partículas débilmente desviadas.

Para  $\vartheta \rightarrow 0$

$$\sigma_{\text{dif}} \rightarrow \frac{4m^2 Z^2 e^4 a^4}{\hbar^4} = \frac{4m^2 Z^2 e^4}{\hbar^4} \frac{\hbar^8}{m^4 e^8 Z^{4/3}} = \frac{4Z^{2/3} \hbar^4}{m^2 e^4}$$

$$\frac{Z^{2/3} 4 \times (6.62 \times 10^{-27})^4}{(2\pi)^4 (9.1 \times 10^{-28})^2 (4.8 \times 10^{-10})^4} \text{ cm}^2 \sim 1.11 \times 10^{-16} Z^{2/3} \text{ cm}^2$$

En resumen, para ángulos de scattering muy pequeños nuestro caso difiere mucho del Coulombiano. A medida que el ángulo de scattering aumenta ambas fórmulas se aproximan. La mayor concordancia posible se tiene para  $\vartheta \rightarrow \pi$  (muy fuertes desviaciones).

Ja vi!

#407





3). ¿Cómo puede mostrarse que los núcleos no son puntuales  $\frac{2}{3}$  mediante experiencias de scattering? ¿Qué energías deben tener las partículas con las que bombardamos el núcleo y qué ángulos de scattering nos conviene observar? ¿Cómo puede determinarse la distribución de cargas suponiéndose que ellas actúan como cargas electrostáticas?  $r \sim 1.4 \times 10^{-13} A^{1/3}$

En el caso de que el núcleo fuera puntual:

$$v(q) = \frac{4\pi \hbar^2 e^2 Z^2}{q^2}$$

Si la distribución de cargas fuera  $\rho(r)$  según un problema anterior

$$v(q) = \frac{4\pi \hbar^2 e^2}{q^2} \int e^{i q \cdot r} \rho(r) d^3r$$

Si hay simetría esférica en la distribución de cargas:  $\rho(r) = \rho(r)$

$$v(q) = \frac{8\pi \hbar^2 e^2}{q^2} \int_0^\infty e^{i q r \cos \vartheta} \rho(r) r^2 dr d(\cos \vartheta) =$$

$$\frac{8\pi^2 \hbar^2 e^2}{q^3} \int_0^\infty dr \rho(r) \frac{2 \sin\left(\frac{q r}{\hbar}\right) r^2}{r} = \left[ \frac{16\pi^2 \hbar^3 e^2}{q^3} \int_0^\infty \frac{\sin\left(\frac{q r}{\hbar}\right) \rho(r) r dr}{\hbar} = v(q) \right]$$

En el caso de que el núcleo tenga radio finito  $a$ :  $\rho(r) = 0$  para  $r > a$

$$\text{Luego } v(q) = \frac{16\pi^2 \hbar^3 e^2}{q^3} \int_0^a \sin\left(\frac{q r}{\hbar}\right) \rho(r) r dr$$

$$\sin\left(\frac{q r}{\hbar}\right) = \frac{q r}{\hbar} - \frac{1}{3!} \left(\frac{q r}{\hbar}\right)^3 + \dots$$

Se ve entonces que si  $\frac{q a}{\hbar} \ll 1$  podemos despreciar los términos superiores y  $v(q)$  variaría como  $1/q^2$ , lo mismo que en el caso Coul. Como nosotros queremos ver si hay diferencias con el caso Coul. nos conviene por lo contrario tomar

$$\frac{1}{3!} \left(\frac{q a}{\hbar}\right)^3 > 1, \text{ digamos } \frac{q a}{\hbar} > 1 \text{ o sea } 2P \sin \frac{\vartheta}{2} > \frac{\hbar}{a}$$

$$2P \sin \frac{\vartheta}{2} > \frac{6.62 \times 10^{-27} \text{ erg seg}}{1.4 \times 10^{-13} \text{ A}^{1/3} \text{ cm}}$$

Para el protón  $A = 1$ . Digamos:

$$P > \frac{6.62 \times 10^{-27} \text{ erg seg}}{1.4 \times 10^{-13} \text{ cm}} \sim 4.7 \times 10^{-14} \frac{\text{erg seg}}{\text{cm}}$$

$$E = c \sqrt{p^2 + m_0^2 c^2} > c \sqrt{(4.7 \times 10^{-14})^2 + (9.1 \times 10^{-28})^2 (3 \times 10^{10})^2} \sim$$

$$\approx c(4.7 \times 10^{-14}) \approx 4.7 \times 3 \times 10^{-4} \text{ erg} \approx$$

$$15 \times 10^{-4} \text{ erg} \sim \frac{15 \times 10^{-4} \times 10^{12} \text{ eV}}{1.602} \sim 10^3 \text{ MeV.}$$

~~Física está,~~

~~error de aritmética~~

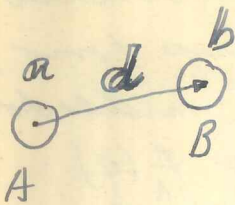
~~so. deve ser~~

~~10000~~

Para estudiar la distribución de cargas pueden hacerse hipótesis (distribución uniforme en el volumen, distribución superficial, etc..) y con ello se tienen diferentes funciones  $v(q)$ . Se pueden hacer entonces varias experiencias para un ángulo  $\theta$  fijo, preferiblemente grande, variándose la energía de las partículas con las que se bombardean. Se puede ver así como varía  $v$  con  $q$  experimentalmente y comparar con los diferentes resultados teóricos.

25

4) Tenemos una molécula con dos átomos.



Los vectores  $a$  y  $b$  señalan la posición del centro de los átomos.

Si el primer átomo estuviera en el origen

$v(q)$  sería por definición  $f_A(q)$ ; si el segundo

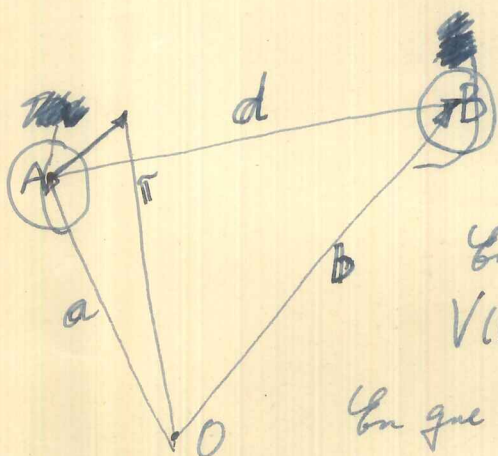
estuviera en el origen  $v(q)$  sería por definición  $f_B(q)$ .

Demstrar que si el centro de A está en  $a$  y el centro de B está en  $b$ :

amp =  $v(q) = e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot a} f_A(q) + e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot b} f_B(q)$ ; Demstrar que

La intensidad será:  $f_A^2 + f_B^2 + 2f_A f_B \cos\left(\frac{q \cdot d}{\hbar}\right)$ ;

$d = b - a$ . Hallar luego la media sobre todas las direcciones: 
$$Int_{media} = \frac{f_A^2 + f_B^2 + 2f_A f_B \sin \frac{q \cdot d}{\hbar}}{\frac{q \cdot d}{\hbar}}$$



Por definición:

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

En nuestro caso:

$$V(r) = V_A(r-a) + V_B(r-b)$$

En que  $V_A$  es el potencial originado por la molécula A y  $V_B$  el originado por la B.

$$v(q) = \int e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot r} V_A(r-a) d^3 r + \int e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot r} V_B(r-b) d^3 r$$

La primera integral puede escribirse:

$$e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot a} \int e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot (r-a)} V_A(r-a) d^3 (r-a) = e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot a} f_A(q)$$

Análogamente procedemos para la segunda integral:

$$v(q) = e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot a} f_A(q) + e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot b} f_B(q)$$

$$|v(q)|^2 = \left[ e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot a} f_A(q) + e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot b} f_B(q) \right] \left[ e^{-\frac{i}{\hbar} q \cdot a} f_A(q) + e^{-\frac{i}{\hbar} q \cdot b} f_B(q) \right] =$$

$$f_A^2 + f_B^2 + f_A f_B \left[ e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot (b-a)} + e^{-\frac{i}{\hbar} q \cdot (b-a)} \right] = \left[ f_A^2 + f_B^2 + 2f_A f_B \cos\left(\frac{q \cdot d}{\hbar}\right) \right] |v(q)|^2$$

Para promediar en todas las direcciones elegimos coordenadas esféricas siendo  $q$  el eje polar.

$$\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \cos\left(\frac{q d \cos \vartheta}{\hbar}\right) d\Omega = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} \cos\left(\frac{q d \cos \vartheta}{\hbar}\right) d(\cos \vartheta) = \frac{\sin\left(\frac{q d}{\hbar}\right)}{\frac{q d}{\hbar}}$$

Luego 
$$I_{\text{med}} = \frac{f_A^2 + f_B^2 + 2f_A f_B \sin \frac{qd}{h}}{\frac{qd}{h}}$$

Esto sugiere el siguiente método para hallar  $d$  en moléculas diatómicas. En una primera experiencia usamos como material de scattering átomos del tipo A; midiendo  $\sigma$  diferencial para diversos ángulos puede hallarse  $f_A(q)$ . En una segunda experiencia usamos átomos B y hallamos  $f_B(q)$ . En una tercera experiencia usamos las moléculas A-B, medimos  $\sigma_{\text{dif}}$  para diferentes ángulos y mediante la fórmula arriba escrita determinamos  $d$ .

Talvez  
no podamos  
preparar  
una gas  
monatómica  
de átomos A!

(25)

$$\sigma_{\text{Tot}} = \frac{16\pi m^2 Z^2 e^4}{\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 \left[\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + 4P^2\right]}$$

El caso de Coulomb se obtiene en el límite  $a \rightarrow \infty$

$$(\sigma_{\text{Tot}})_{\text{Coul}} = \infty.$$

Comparemos los  $\sigma_{\text{dif.}}$  para este caso y el caso Coul.

$$\sigma_{\text{dif.}} = \frac{4m^2 Z^2 e^4}{\left\{\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + 4P^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}\right\}^2} ; \quad (\sigma_{\text{dif}})_{\text{Coul}} = \frac{4m^2 Z^2 e^4}{\left\{4P^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}\right\}^2}$$

Para ángulo de scattering muy pequeño ( $\theta \rightarrow 0$ ):  $(\sigma_{\text{dif}})_{\text{Coul}} \rightarrow \infty$ , es decir para potencial Coul. hay una gran probabilidad de encontrar partículas débilmente desviadas.

Para  $\theta \rightarrow 0$

$$\sigma_{\text{dif}} \Rightarrow \frac{4m^2 Z^2 e^4 a^4}{\hbar^4} = \frac{4m^2 Z^2 e^4}{\hbar^4} \frac{\hbar^8}{m^4 e^8 Z^{4/3}} = \frac{4Z^{2/3} \hbar^4}{m^2 e^4} \sim$$

$$\sim Z^{2/3} \frac{4 \times (6.62)^4 \times (10^{-27})^4}{(2\pi)^4 (9.1 \times 10^{-28})^2 (4.8 \times 10^{-10})^4} \text{ cm}^2 \sim 1.11 \times 10^{-16} Z^{2/3} \text{ cm}^2$$

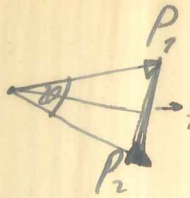
En resumen, para ángulos de scattering muy pequeños nuestro caso difiere mucho del Coulombiano. A medida que el ángulo de scattering aumenta ambas fórmulas se aproximan. La mayor concordancia posible se tiene para  $\theta \rightarrow \pi$  (muy fuertes desviaciones), porque ángulo a fórmula de Rutherford como de ser bon. Porque?

III) Los núcleos no son puntuales. Una fórmula aproximada para su radio es  $a \approx 1.4 \times 10^{-13} A^{1/3}$ , | A: número de masa. Para demostrar que los núcleos no son puntuales mediante experiencias de scattering: ¿qué energías deben tener las partículas con las que bombardeamos el núcleo y qué ángulos de scattering no conviene observar?

Para contestar estas preguntas conviene antes hacer algunas observaciones generales.

$$\psi(\mathbf{r}) = \int V(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} d^3\mathbf{r}'. \quad \text{Damos } \hat{\mathbf{q}} \text{ al vector unitario en la dirección de } \mathbf{q}. \text{ Es decir: } \mathbf{q} = q \hat{\mathbf{q}};$$

$$q = 2P \sin \frac{\theta}{2} = \frac{4\pi \hbar}{\lambda} \sin \frac{\theta}{2}; \quad v(\theta) = \int_0^{\infty} V(r) e^{i 4\pi \sin \frac{\theta}{2} (r_0 r)} d^3 r$$



Supongamos que luego de una cierta distancia  $\pi > a$ ,  $V(r) \sim 0$ .

Entonces  $a$  representaría aproximadamente el radio del núcleo. Si  $\lambda \gg a \gg \pi$  entonces el exponencial que figura en  $v(\theta)$  es una función muy lentamente variable y casi no depende de  $\theta$ . Es decir  $v(\theta)$  será independiente de  $\theta$  si  $\lambda \gg a$  y lo mismo sucederá con la  $\sigma_{\text{dif}}$ .

Si por el contrario  $\lambda < \pi$ , la integral dependerá fuertemente de  $\theta$  y lo mismo sucederá con  $\sigma_{\text{dif}}$ .

Si el núcleo fuera puntual por menor que fuera  $\lambda$ , es decir por mayor que fuera la energía de las partículas usadas, la  $\sigma_{\text{dif}}$  sería sensiblemente independiente del ángulo de scattering. Para mostrar que el núcleo no es puntual, conviene realizar experiencias de scattering cuyo resultado muestre una fuerte dependencia de  $\sigma_{\text{dif}}$  con el ángulo.

Para ello es necesario bombardear el núcleo con partículas cuya longitud de onda sea a lo sumo del orden del radio, es decir:

$$\frac{h}{p} = \lambda \approx a \sim 1.4 \times 10^{-13} \text{ A}^{1/3} \therefore p > \frac{h}{1.4 \times 10^{-13} \text{ A}^{1/3}} \quad \text{que energía en e.v.?$$

~~¿cómo podemos determinar la distribución de carga dentro del núcleo?~~

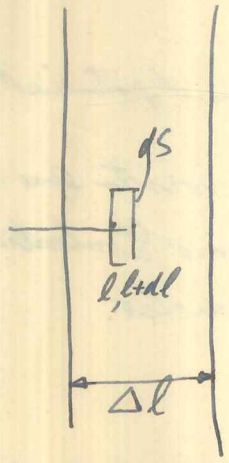


$$\frac{-3.4 \text{ e}}{16 \frac{b}{a}} \quad -2 \times 3.4 \frac{b}{a} V_0$$

$$\frac{2m V_0 a^2}{\hbar^2} = \frac{16}{V_0}$$

1) Cuando una partícula de gran energía (cósmica), atraviesa una placa se tiene 
$$\overline{V^2} = \Delta x \cdot \frac{16\pi N Z^2 r_0^2 \mu e^2}{A p^2 \beta^2} \ln(181 Z^{-2/3})$$

donde  $N$  es el número de Avogadro,  $A$  el número de masa y  $\Delta x$  la espesura de materia en  $gm/cm^2$ . Tratar de interpretar esta fórmula en la forma más detallada que se pueda.



La probabilidad de que la partícula experimente un scattering entre  $l$  y  $l+d$ , es igual a  $\frac{n dl d\sigma}{dS} = n dl \sigma$  donde  $n$  es el número de átomos del material por  $cm^3$ ,  $\sigma$  es la sección ~~de~~  $\sigma$  de scattering de un solo átomo y  $dS$  es la sección considerada. Esto es claro pues la probabilidad de choque es ~~proporcional~~ <sup>proporcional</sup> a la superficie <sup>sección</sup> de choque ofrecida por los átomos del material ( $n dl d\sigma$ ) dividida por el área total disponible ( $dS$ ).

Calculemos ahora el espesor  $dx$  en función de  $\Delta x$ , siendo  $\Delta x$  el espesor en  $gm/cm^2$ . Para ello basta considerar un volumen de espesor  $dx$  y área de  $1 cm^2$ . El peso ~~es~~ contenido en ese volumen será:

$dx = n m_A dx$  siendo  $m_A$  la masa de un átomo de la sustancia considerada. Luego la probabilidad de que la partícula choque entre  $l$  y  $l+d$  será:  $n dl \sigma = \frac{dx N \sigma}{m_A}$  pues  $N m_A = A$  siendo  $N$  el número de Avogadro y  $A$  el número de masa expresado en gramos.

Como primer intento supongamos que cada átomo obra como un potencial Coulombiano. La probabilidad de que una partícula sea desviada entre  $l$  y  $l+d$  en el ángulo cóncavo  $d\omega$  será:

$$P(\omega) d\omega = \frac{dx N}{A} \frac{\sigma(\omega) d\omega}{4\pi} = \frac{dx N}{A} \frac{4 m^2 Z^2 e^4 d\omega}{\{4 p^2 \sin^2 \frac{\omega}{2}\}^2}$$

Supondremos que las desviaciones son muy

pequeñas de modo que  $\sin \frac{\omega}{2} \sim \frac{\omega}{2}$   
 $P(\omega) d\omega = \frac{dx N}{A} \frac{4 m^2 Z^2 e^4 d\omega}{p^4 \omega^4}$  i  $\frac{e^2}{r_0} = m_0 c^2 = \mu_e$  siendo  $r_0$  el radio del electrón,  $m_0$  la masa del electrón en reposo ~~y por tanto  $\mu_e$~~  y por tanto  $\mu_e$  es la energía en reposo del electrón.  
 $e^4 = \mu_e^2 r_0^2$ ;  $\frac{m^2}{p^4} = \frac{1}{p^2 \beta^2}$  donde  $\beta$  es la velocidad de la partícula incidente y  $P$  su impulso.

$$P(\omega) = \frac{4 dx N}{A} Z^2 \frac{r_0^2 \mu_e^2}{p^2 \beta^2} \frac{1}{\omega^4}$$

Para considerar el scattering a lo largo de toda la espesura debemos integrar respecto a  $dx$ :

$$P(\nu) = \frac{\Delta x}{A} \frac{4N}{p^2 \beta^2} \frac{Z^2 \Gamma_0^2 \mu e^2}{\nu^4} \quad \text{donde } \Delta x \text{ es la espesura de toda la placa en } \text{g/cm}^2.$$

$$\overline{\nu^2} = \int \nu^2 P(\nu) d\nu = 2\pi \int \nu^2 P(\nu) \nu d\nu =$$

$$\frac{\Delta x}{A} \frac{8\pi N}{p^2 \beta^2} Z^2 \Gamma_0^2 \mu e^2 \int \frac{d\nu}{\nu}$$

Ahora bien, en todo este cálculo hemos supuesto que el potencial del átomo es Coul.

En el problema N° 3 de la semana pasada, hemos visto que un núcleo de ~~radio~~ radio finito se comportará como Coulombiano si  $2P \sin \frac{\nu}{2} \Gamma_N \ll 1$  en que  $\Gamma_N$  es el radio del núcleo.

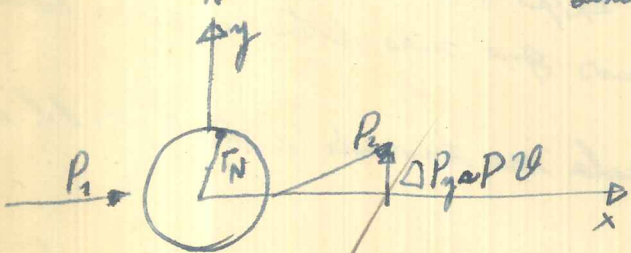
En nuestro caso  $\sin \frac{\nu}{2} \sim \frac{\nu}{2}$

$$\nu P \ll \frac{\hbar}{\Gamma_N} \therefore \nu \ll \frac{\hbar}{\Gamma_N} \quad \text{En una aproximación grossera}$$

podemos suponer  $\boxed{(\nu)_{\text{máx}} = \frac{\hbar}{\Gamma_N}}$

Observación: ~~Esos que este valor para~~  $(\nu)_{\text{máx}}$ . Creo que la relación  $\nu P \ll \frac{\hbar}{\Gamma_N}$  puede deducirse con un razonamiento de incertidumbre.

Tenemos  $(\Delta P_y)(\Delta y) \sim \hbar$  Ahora bien, para que el núcleo se comporte como Coul. la partícula no debe penetrar en él.



En particular  $(\Delta y) \gg r_N$ , pues si así no fuera la partícula entraría dentro del núcleo y este no se comportaría como Coulombiano.

Luego  $(\Delta P_y) \sim \frac{\hbar}{(\Delta y)} \ll \frac{\hbar}{r_N}$ ;

$$(\Delta P_y) = P \nu \quad \text{Luego } \boxed{P \nu \ll \frac{\hbar}{r_N}}$$

¿Es esto correcto? Si

Debido a la influencia de los electrones exteriores podemos suponer en forma buda que dentro del átomo el potencial es aproximadamente Coul. pero fuera de él decae rápidamente.

En el problema N° 2 de la semana pasada tomamos una aproximación grossera:  $V(r) = \frac{Ze^2}{r} e^{-\frac{r}{a}}$  donde  $a$  es el radio del átomo.

Vimos que para que este resultado coincidiera con el Coulombiano debíamos:



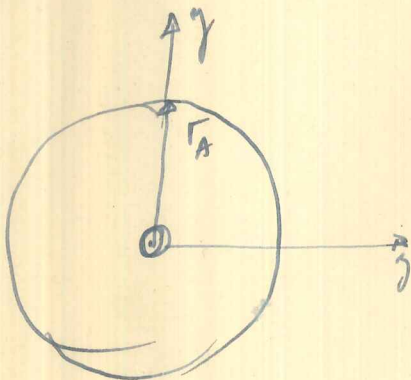
$2P \sin \frac{\nu}{2} \gg \frac{h}{\lambda_A}$ ; en nuestro caso:

$P \nu \gg \frac{h}{\lambda_A} \therefore \nu \gg \frac{\lambda}{\lambda_A}$  Es decir es una relación de tipo contrario a la anterior.

Como una aproximación burda podemos tomar:

$$\boxed{(\nu)_{\min} = \frac{\lambda}{\lambda_A}} \quad \text{Es decir es una}$$

Observación: Creo que la condición  $P \nu \gg \frac{h}{\lambda_A}$  puede deducirse también con un razonamiento de incertidumbre.



Para que el átomo se comporte como  
Cond.  $(\Delta y) \ll r_A$

$$(\Delta P)_y \sim \frac{h}{\Delta y} \gg \frac{h}{r_A}$$

$$P \nu \gg \frac{h}{\lambda_A}$$

Luego:

$$\overline{v_{av}^2} = \Delta x \frac{8\pi N}{A} Z^2 \frac{r_0^2 \mu_0^2}{p^2 \beta^2} \ln \frac{(\nu)_{\max}}{(\nu)_{\min}} = \Delta x \frac{8\pi N}{A} Z^2 \frac{r_0^2 \mu_0^2}{p^2 \beta^2} \ln \left( \frac{r_A}{r_N} \right)$$

En el problema N°2 de la semana pasada usamos:

$$r_A = \frac{h^2}{m_e e^2 Z^{1/3}} = \frac{1}{4} \frac{e^2}{m_e c^2} \left( \frac{h c}{e^2} \right)^2 Z^{-1/3} = (137)^2 r_0 Z^{-1/3}$$

donde  $r_0$  es el radio del electrón.

En el problema N°3 de la semana pasada usamos:

$$r_N \sim 1.4 \times 10^{-13} A^{1/3} \sim \frac{r_0}{2} A^{1/3}; \quad \frac{r_A}{r_N} \sim 2(137)^2 Z^{-1/3} A^{-1/3}$$

En un trabajo Rossi y Greisen usan otra fórmula ~~empírica~~ para  $r_N$ :

$$r_N = 0.57 r_0 Z^{1/3} \quad \leftarrow \text{Es más o menos por qué? Pero es cierto}$$

Observación: si en  $r_N \sim \frac{r_0}{2} A^{1/3}$  hiciéramos la aproximación muy gruesa:  $A \sim 2Z$  tendríamos  $r_N \sim \frac{r_0}{2} \sqrt[3]{2} Z^{1/3} \sim 0.63 r_0 Z^{1/3}$  no muy diferente de la otra fórmula empírica. ¿Por qué? Serán que dichas fórmulas son válidas para muchos núcleos o no muy pesados?

Cuando  $r_N = 0.57 r_0 Z^{1/3}$

$$\ln \left( \frac{r_A}{r_N} \right) = \ln \left( \frac{(137)^2 Z^{-1/3}}{(0.755)^2} \right) = 2 \ln \left( \frac{137 Z^{-1/3}}{0.755} \right) = 2 \ln (181 Z^{-1/3})$$

Luego:

$$\overline{v_{av}^2} = \Delta x \frac{16\pi N}{A} Z^2 \frac{r_0^2 \mu_0^2}{p^2 \beta^2} \ln (181 Z^{-1/3})$$

Mas, si voy quer dar un numero tan exacto como 181 tem que convertir sua "intimacao" de  $\frac{1}{\alpha}$  para radio de nucleo.

24

de una columna...

1947 11 28  
1947 11 28  
1947 11 28

1947 11 28

1947 11 28  
1947 11 28

1947 11 28  
1947 11 28  
1947 11 28



1947 11 28  
1947 11 28

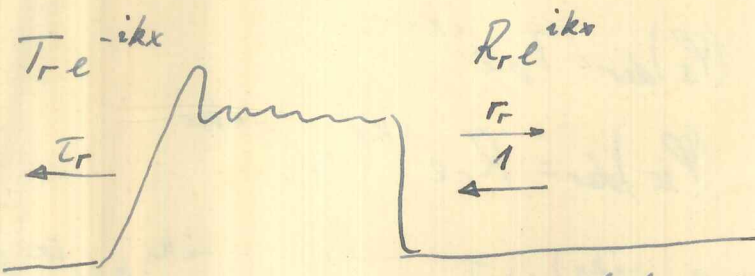
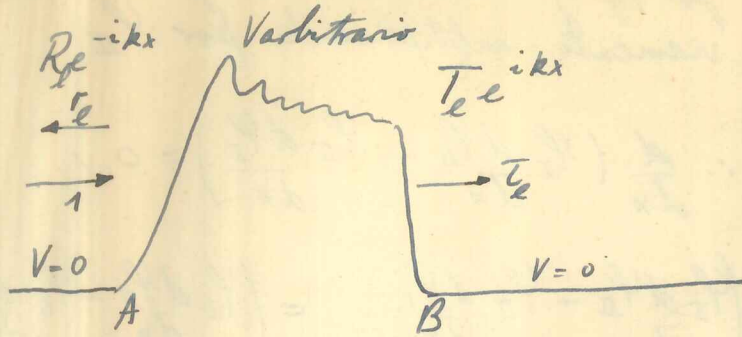
1947 11 28  
1947 11 28

1947 11 28  
1947 11 28

1947 11 28  
1947 11 28

1947 11 28  
1947 11 28

2)



Le tiene un potencial de forma arbitraria entre los puntos A y B, que vale 0 antes de A y después de B.

$t_e$  y  $t_r$  son respectivamente los coeficientes de reflexión y transmisión cuando la partícula va de izquierda a derecha y  $r_r$  y  $t_r$  cuando va de derecha a izquierda.

Mostrar  $t_e + r_e = 1$ ;  $r_r + t_r = 1$ ;

$$t_e = r_r$$

Como el problema es estacionario debe haber conservación de la corriente de probabilidad, es decir la corriente de probabilidad a la izquierda de A debe ser igual a la corriente a la derecha. Llamemos  $\psi_I$  la función de onda en el caso en que la partícula va de izquierda a derecha y  $\psi_{II}$  en el caso opuesto.  $(\psi_I)_{izq.}$  será la función de onda en el primer caso a la izquierda de A;  $(\psi_I)_{der.}$  a la derecha de B, etc..

$$\boxed{(\psi_I)_{izq.} = e^{ikx} + R_e e^{-ikx}}; \quad \boxed{(\psi_I)_{der.} = T_e e^{ikx}}; \quad \boxed{r_e = |R_e|^2; t_e = |T_e|^2}$$

$$S_I = \frac{\hbar}{2im} \left( \psi_I^* \frac{d\psi_I}{dx} - \psi_I \frac{d\psi_I^*}{dx} \right); \text{ debe ser } \left( \psi_I^* \frac{d\psi_I}{dx} - \psi_I \frac{d\psi_I^*}{dx} \right)_{izq.} = \left( \psi_I^* \frac{d\psi_I}{dx} - \psi_I \frac{d\psi_I^*}{dx} \right)_{der.}$$

$$\left( \psi_I^* \frac{d\psi_I}{dx} \right)_{izq.} = ik (e^{-ikx} + R_e e^{ikx}) (e^{ikx} - R_e e^{-ikx}) = ik [1 - |R_e|^2 + R_e e^{2ikx} - R_e e^{-2ikx}]$$

$$= ik [1 - |R_e|^2 + R_e e^{-2ikx} - R_e e^{2ikx}]$$

$$\left( -\psi_I \frac{d\psi_I^*}{dx} \right)_{izq.}$$

$$\text{Luego } \boxed{\left( \psi_I^* \frac{d\psi_I}{dx} - \psi_I \frac{d\psi_I^*}{dx} \right)_{izq.} = 2ik [1 - |R_e|^2]}$$

$$\left( \psi_I \right)_{der.} = T_e e^{ikx}; \quad \left( \psi_I^* \frac{d\psi_I}{dx} \right)_{der.} = ik (T_e e^{-ikx}) (T_e e^{ikx}) = ik |T_e|^2$$

$$- \left( \psi_I \frac{d\psi_I^*}{dx} \right)_{der.} = ik |T_e|^2$$

$$\text{Luego } \boxed{\left( \psi_I^* \frac{d\psi_I}{dx} - \psi_I \frac{d\psi_I^*}{dx} \right)_{der.} = 2ik |T_e|^2} \text{ Luego para que se conserve } S_I:$$

$$1 - |R_e|^2 = |T_e|^2 \therefore \boxed{r_e + t_e = 1} \text{ Haciendo exactamente la misma demostración para } \psi_{II} \text{ obtenemos } \boxed{r_r + t_r = 1}$$

$$\boxed{(\psi_{II})_{izq.} = T_r e^{-ikx}}; \quad \boxed{(\psi_{II})_{der.} = R_r e^{ikx} + e^{-ikx}}$$

Para demostrar que  $\boxed{r_l = r_r}$  podemos proceder así:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_I}{dx^2} + V \psi_I &= E \psi_I \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_{II}}{dx^2} + V \psi_{II} &= E \psi_{II} \end{aligned} \quad \left| \begin{array}{l} \text{Multiplicamos la segunda ecuación} \\ \text{por } \psi_I \text{ y le restamos la primera pre-} \\ \text{viamente multiplicada por } \psi_{II} : \end{array} \right.$$

$$\psi_I \frac{d^2 \psi_{II}}{dx^2} - \psi_{II} \frac{d^2 \psi_I}{dx^2} = 0 \therefore \frac{d}{dx} \left( \psi_I \frac{d\psi_{II}}{dx} - \psi_{II} \frac{d\psi_I}{dx} \right) = 0 \therefore$$

$$\left( \psi_I \frac{d\psi_{II}}{dx} - \psi_{II} \frac{d\psi_I}{dx} \right) = \text{cte} \therefore \left( \psi_I \frac{d\psi_{II}}{dx} - \psi_{II} \frac{d\psi_I}{dx} \right)_{\text{izq}} = \left( \psi_I \frac{d\psi_{II}}{dx} - \psi_{II} \frac{d\psi_I}{dx} \right)_{\text{der}}$$

Recordemos:

$$(\psi_I)_{\text{izq}} = e^{ikx} + R e^{-ikx} ; (\psi_I)_{\text{der}} = T e^{ikx}$$

$$(\psi_{II})_{\text{izq}} = T r e^{-ikx} ; (\psi_{II})_{\text{der}} = R r e^{ikx} + e^{-ikx}$$

$$\left( \psi_I \frac{d\psi_{II}}{dx} - \psi_{II} \frac{d\psi_I}{dx} \right)_{\text{izq}} = (e^{ikx} + R e^{-ikx}) ik T r e^{-ikx} - T r e^{-ikx} ik (e^{ikx} + R e^{-ikx}) =$$

$$-2ik T r ;$$

$$\left( \psi_I \frac{d\psi_{II}}{dx} - \psi_{II} \frac{d\psi_I}{dx} \right)_{\text{der}} = T e^{ikx} ik (R r e^{ikx} + e^{-ikx}) - (R r e^{ikx} + e^{-ikx}) ik T e^{ikx} = -2ik T e$$

Luego debe ser  $\boxed{T_r = T_e} \therefore \boxed{r_l = r_r} \therefore \boxed{r_r = r_l}$

25

3) Sean  $E$  y  $\psi$  ~~la energía~~ un autovalor de la energía y su correspondiente función de onda para un potencial  $V$ . Sean  $E'$  y  $\psi'$  los correspondientes a un potencial  $V'$ . Demostrar: 
$$\boxed{E - E' = \frac{\int \psi' (V - V') \psi dx}{\int \psi' \psi dx}}$$

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V \psi &= E \psi \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi' + V' \psi' &= E' \psi' \end{aligned} \quad \left| \begin{array}{l} \text{Multiplicamos a la primera ecuación por } \psi' \text{ y restamos de la} \\ \text{segunda multiplicada por } \psi : \end{array} \right.$$

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

Integramos esta ecuación respecto a  $x$ :

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

$$\int (\psi' \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi') dx = \int \psi' \nabla^2 \psi dx - \int \psi \nabla^2 \psi' dx + \int (\nabla \psi \cdot \nabla \psi') dx =$$

$$\int \psi' \nabla^2 \psi dx + \int \psi' \nabla \psi \cdot \nabla \psi' dx - \int \psi \nabla^2 \psi' dx = 0. \text{ Las integrales de superficie}$$

son nulas pues suponemos que  $\psi$  y  $\psi'$  tienden a 0 cuando  $x \rightarrow \infty$  para que tenga sentido hablar de  $\int \psi \psi' dx$ . Luego queda:

$$(E - E') \int \psi \psi' dx = \int \psi' (V - V') \psi dx \therefore \boxed{E - E' = \frac{\int \psi' (V - V') \psi dx}{\int \psi \psi' dx}}$$

25

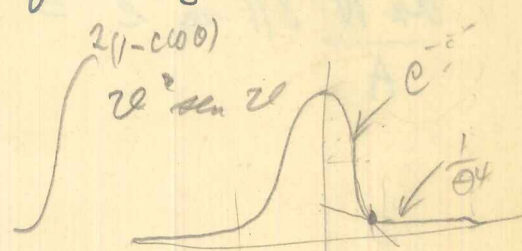
$\int \sin^2 \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} d(\sin \frac{\theta}{2})$   
 $(1 - \cos \theta) d(\cos \theta)$

$2 \sin \frac{\theta}{2} = s$   
 $2 \frac{s^2 ds}{(s/2)^2 + p^2 s^2}$

$$2\pi \frac{dx N 4m^2 Z^2 e^4}{A} \int_0^1 \frac{v^3 dv}{\left\{ \left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + p^2 v^2 \right\}^2} = \langle v^2 \rangle$$

$$\bar{I} = \frac{1}{2} \int_0^1 \frac{v^2 dv}{\left\{ \left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + p^2 v^2 \right\}^2} = \frac{1}{2} \int_0^1 \frac{u du}{\left\{ \left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + p^2 u \right\}^2} = -\frac{1}{2p^2} \int_0^1 u \frac{d}{du} \frac{1}{\left\{ \left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + p^2 u \right\}}$$

$$= -\frac{1}{2p^2} \left\{ \frac{u}{\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + p^2 u} \Big|_0^1 - \int_0^1 \frac{du}{\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + p^2 u} \right\}$$



$v = \left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + p^2 u ; dv = p^2 du$

$$\int_0^1 \frac{du}{\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + p^2 u} = \frac{1}{p^2} \int_{\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2}^{\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + p^2} \frac{dv}{v} = \frac{1}{p^2} \ln \left\{ \frac{\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + p^2}{\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2} \right\} = \frac{1}{p^2} \ln \left\{ 1 + \frac{p^2}{\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2} \right\}$$

$$\bar{I} = -\frac{1}{2p^2} \left[ \frac{1}{\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 + p^2} - \frac{1}{p^2} \ln \left\{ 1 + \frac{p^2}{\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2} \right\} \right]$$

$\frac{\hbar}{a} \ll p \Rightarrow \frac{\hbar}{a} = x$

$$I = \frac{1}{2p^4} \left\{ \ln \left\{ \frac{p^2}{\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2} \right\} - 1 \right\} = \frac{1}{2p^4} \ln \left\{ \frac{p^2 a^2}{\hbar^2 E} \right\} \rightarrow \text{unidades de ln. repetidas.}$$

$a = \frac{\hbar^2}{m e^2} Z^{-2/3} ; \frac{a^2}{\hbar^2} = \frac{\hbar^2}{m^2 e^4} Z^{-2/3} = \frac{(\hbar c)^2}{m^2 (e^2/c^2)^2} Z^{-2/3} =$

$$\frac{(137)^2}{m^2 c^2} Z^{-2/3}$$

$$I = \frac{1}{2p^4} \ln \left\{ \frac{p^2 (137)^2 Z^{-2/3}}{m^2 c^2 E} \right\} = \frac{1}{p^4} \ln \left\{ \frac{p 137 Z^{-1/3}}{m c E^{1/2}} \right\} ;$$

$$\langle v^2 \rangle = 8\pi \frac{dx N}{A} \frac{m^2 Z^2 e^4}{p^4} \ln \left\{ \frac{137 p Z^{-1/3}}{m c E^{1/2}} \right\}$$

Condiciones de validez de esta fórmula. ante todo debe ser supuesto  $\frac{\hbar}{a} \ll p$ . Ahora bien como nuestro límite es sólo el geométrico ( $\theta=1$ ) debe  $\frac{\hbar}{a} \ll p$ , el  $\frac{\hbar}{a} = \frac{\hbar}{p \lambda} > 1 \therefore p < \frac{\hbar}{\lambda}$ ; luego la condición de validez es  $\left[ \frac{\hbar}{a} \ll p < \frac{\hbar}{\lambda} \right]$

Para  $P < \frac{h}{r_N}$  pero sin otra restricción, valor que  $P$  debe ser grande para que las derivaciones sean pequeñas.

$$K\theta^2 = \frac{4\pi dx N}{A} \frac{m^2 z^2 e^4}{p^4} \left\{ \ln \left( 1 + \frac{(137)^2 p^2 z^{-2/3}}{m^2 c^2 \epsilon} \right) - \frac{1}{\left( 1 + \left( \frac{h}{pa} \right)^2 \right)^{1/2}} \right\}$$

Para  $P > \frac{h}{r_N}$  se debe calcular (aproximadamente):

$$\frac{dx N}{A} 8\pi m^2 e^4 z^2 \int_0^{v_{\max}} \frac{v^3 dv}{\left\{ \left( \frac{h}{a} \right)^2 + p^2 v^2 \right\}^2} \quad \text{donde } p v_{\max} \sim \frac{h}{r_N}$$

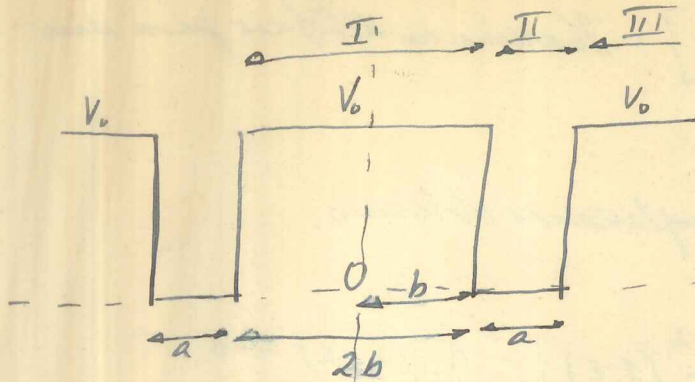


Fig. 1

Si elegimos el ~~origen~~ origen de coordenadas como está indicado en el dibujo el potencial será simétrico. Para autovalores no degenerados de la energía, las autofunciones tienen una definida paridad (o son pares o son impares). Si el autovalor es degenerado siempre se pueden obtener autofunciones de definida paridad mediante combinaciones lineales.

En la región I:  $-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''_I + V_0 \psi_I = E \psi_I \therefore \psi_I = c_I \sinh Kx + d_I \cosh Kx$

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

En II:  $-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''_{II} = E \psi_{II} \therefore \psi_{II} = c_{II} \cos(kx + \alpha) + d_{II} \sin(kx + \alpha)$

$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$ ;  $\psi_{III} = c_{III} e^{Kx} + d_{III} e^{-Kx}$  ( $c_{III} = 0$  para que  $\psi_{III}$  sea finita cuando  $x \rightarrow \infty$ )

Si buscamos una solución par:  $c_I = 0$

$$\psi_I = d_I \cosh Kx; \quad \left( \frac{\psi'_I}{\psi_I} \right)_{x=b} = \frac{d_I K \sinh Kb}{d_I \cosh Kb} = K \tanh(Kb)$$

$$\left( \frac{\psi'_{II}}{\psi_{II}} \right)_{x=b} = -k \operatorname{tg}(kb + \alpha); \quad \left( \frac{\psi'_{II}}{\psi_{II}} \right)_{x=b+a} = -k \operatorname{tg}[k(b+a) + \alpha]$$

$$\left( \frac{\psi'_{III}}{\psi_{III}} \right)_{x=b+a} = -K \quad \text{Luego:}$$

$$K \tanh(Kb) = -k \operatorname{tg}(kb + \alpha); \quad \boxed{k \operatorname{tg}[k(b+a) + \alpha] = K}$$

$$k(b+a) + \alpha = \operatorname{arc} \operatorname{tg} \frac{K}{k} \therefore kb + \alpha = \operatorname{arc} \operatorname{tg} \frac{K}{k} - ka$$

$$\text{Luego } K \tanh(Kb) = -k \operatorname{tg} \left( \operatorname{arc} \operatorname{tg} \frac{K}{k} - ka \right) = -k \left[ \frac{\frac{K}{k} - \operatorname{tg}(ka)}{1 + \frac{K}{k} \operatorname{tg}(ka)} \right]$$

$$\text{Caso par: } \boxed{K \tanh(Kb) = k \left[ \frac{\operatorname{tg}(ka) - \frac{K}{k}}{1 + \frac{K}{k} \operatorname{tg}(ka)} \right]} \quad \text{(I)}$$

En el caso impar:  $\psi_I = c_I \sinh Kx; \quad \left( \frac{\psi'_I}{\psi_I} \right)_{x=b} = K \operatorname{coth}(Kb)$

Todo lo demás queda igual, de modo que en el caso impar tenemos:

$$\boxed{K \operatorname{coth}(Kb) = k \left[ \frac{\operatorname{tg}(ka) - \frac{K}{k}}{1 + \frac{K}{k} \operatorname{tg}(ka)} \right]} \quad \text{(II)}$$

Si  $b$  es muy grande  $\tanh Kb = 1 - \epsilon$  siendo  $\epsilon$  un número positivo muy pequeño. La ecuación I puede escribirse entonces:

$$\frac{K}{k} (2 - \epsilon) = \operatorname{tg}(ka) \left[ 1 - \frac{K^2}{k^2} (1 - \epsilon) \right]; \text{ Haremos un artificio para simplificar esta fórmula.}$$

$$\operatorname{tg}(ka) = \frac{2 \operatorname{tg}\left(\frac{ka}{2}\right)}{1 - \operatorname{tg}^2\left(\frac{ka}{2}\right)}; \text{ Reemplazando obtenemos:}$$

$$\operatorname{tg}^2\left(\frac{ka}{2}\right) \frac{K}{k} (2 - \epsilon) + 2 \operatorname{tg}\left(\frac{ka}{2}\right) \left[ 1 - \frac{K^2}{k^2} (1 - \epsilon) \right] - \frac{K}{k} (2 - \epsilon) = 0$$

$$\operatorname{tg}\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{-2 \left[ 1 - \frac{K^2}{k^2} (1 - \epsilon) \right] \pm 2 \sqrt{\left[ 1 - \frac{K^2}{k^2} (1 - \epsilon) \right]^2 + \frac{K^2}{k^2} (2 - \epsilon)^2}}{2 \frac{K}{k} (2 - \epsilon)}$$

Si en  $\frac{K^2}{k^2} (2 - \epsilon)^2$  despreciamos el término en  $\epsilon^2$  llegamos a:

$$\operatorname{tg}\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{- \left[ 1 - \frac{K^2}{k^2} (1 - \epsilon) \right] \pm \left[ 1 + \frac{K^2}{k^2} (1 - \epsilon) \right]}{\frac{K}{k} (2 - \epsilon)}; \text{ Esto da 2 soluciones:}$$

$$\frac{1}{2} k \operatorname{tg}\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{(1 - \epsilon)}{(1 - \epsilon/2)} K \sim (1 - \epsilon/2) K \text{ despreciando términos en } \epsilon^2.$$

$$k \operatorname{ctg}\left(\frac{ka}{2}\right) \sim -(1 - \epsilon/2) K \leftarrow \text{No queremos.}$$

soluciones pares:  $k \operatorname{tg}\left(\frac{ka}{2}\right) = (1 - \epsilon/2) K; k \operatorname{ctg}\left(\frac{ka}{2}\right) = -(1 - \epsilon/2) K \quad \text{(III)}$

$$\tanh(Kb) = \frac{e^{Kb} (1 - e^{-2Kb})}{e^{Kb} (1 + e^{-2Kb})} \sim 1 - 2e^{-2Kb} = 1 - \epsilon; \text{ luego}$$

$$\boxed{\epsilon/2 = e^{-2Kb}}$$

A partir de II podríamos haber hecho el mismo cálculo haciendo  $\operatorname{coth}(Kb) = 1 + \epsilon$  y es claro que obtendríamos:

soluciones impares:  $k \operatorname{tg}\left(\frac{ka}{2}\right) = (1 + \epsilon/2) K; k \operatorname{ctg}\left(\frac{ka}{2}\right) = -(1 + \epsilon/2) K \quad \text{(IV)}$

$$\boxed{\epsilon/2 = e^{-2Kb}}$$

Antes de seguir con el cálculo de los autovalores de la energía, discutamos un poco las fórmulas (I), (II), (III) y (IV). Es claro que si hacemos  $b = 0$ , todo se debe comportar como un solo pozo de ancho total  $2a$ . Esto se ve seguidamente en la fórmula (I) pues para  $b = 0$  queda:  $k \operatorname{tg}(ka) = K$  mientras que las (II) queda  $k \operatorname{ctg}(ka) = -K$ . Efectivamente estas son las fórmulas correspondientes a un solo pozo con radio  $(2a)$  (se puede ver en Schiff pag. 36 donde está el cálculo directo).

Examinemos ahora el caso  $b \rightarrow \infty$ . Es obvio esperar que ~~manten~~ los autovalores de energía de nuestro problema sean, en este caso, los de un solo pozo pero con ancho total  $a$ . Esto no se ve directamente en (I) y (II) pero sí en (III) y (IV), pues al hacer  $b \rightarrow \infty$ ,



$\epsilon \rightarrow 0$  y obtenemos las ecuaciones

$$\left[ k \operatorname{tg}\left(\frac{ka}{2}\right) = K ; k \operatorname{ctg}\left(\frac{ka}{2}\right) = -K \right] \text{ que corresponden a un solo pozo con ancho total } a.$$

En el caso  $\epsilon = 0$  se sabe que  $\left[ k \operatorname{tg}\left(\frac{ka}{2}\right) = K \right]$  da los autovalores de las funciones de onda que son pares dentro del pozo y  $k \operatorname{ctg}\left(\frac{ka}{2}\right) = -K$  da autovalores de funciones de onda que son impares dentro del pozo. Por otra parte los autovalores de  $\left[ k \operatorname{tg}\left(\frac{ka}{2}\right) = K \right]$  son menores que los de  $\left[ k \operatorname{ctg}\left(\frac{ka}{2}\right) = -K \right]$  igualdad de parámetros físicos.

Falta explicar por qué aparecen en (III) y (IV) cuatro soluciones. Lo por lo siguiente: las dos soluciones de (III) dan autovalores diferentes que corresponden a dos autofunciones también diferentes, ambas pares respecto a la Fig. 1. Cuando  $b \rightarrow \infty$  una de estas autofunciones tenderá a ser par dentro de cada pozo individual ( $k \operatorname{tg}\left(\frac{ka}{2}\right) = K$ ) y la otra función par tenderá a ser impar dentro de cada pozo ( $k \operatorname{ctg}\left(\frac{ka}{2}\right) = -K$ ). Lo mismo sucede con las autofunciones de (IV): éstas son siempre impares respecto al dibujo de fig. 1 pero tienden a comportarse, una como par y otra como impar dentro de cada pozo, cuando  $b \rightarrow \infty$ .

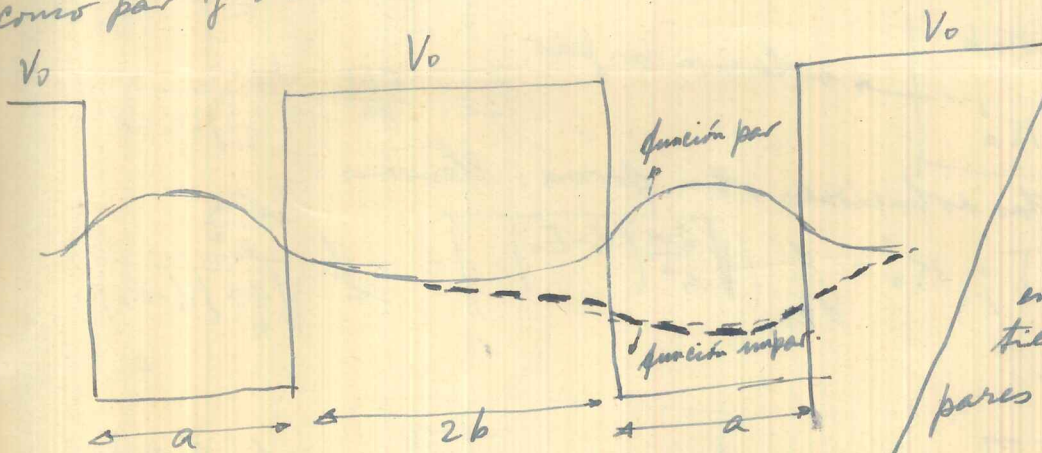


Fig. 2

Por otro lado queremos estudiar los autovalores menores; por lo tanto estudiaremos las dos autofunciones dibujadas en Fig. 2 que, cuando  $b \rightarrow \infty$ , tienden a comportarse como pares dentro de cada pozo.

Cuando  $b \rightarrow \infty$  ambas tienden a ser pares dentro de cada pozo.

Las dos ecuaciones que nos interesan son pues:

$$\left[ k \operatorname{tg}\left(\frac{ka}{2}\right) = (1 - \epsilon/2) K \right] \rightarrow \text{solución par. OK}$$

$$\left[ k \operatorname{tg}\left(\frac{ka}{2}\right) = (1 + \epsilon/2) K \right] \rightarrow \text{solución impar.}$$

Podemos resolver estas ecuaciones en forma aproximada, de la siguiente manera. Llamemos  $E_0$  la solución que se obtiene cuando  $b = \infty$ , es decir cuando  $\epsilon = 0$ . Tomemos, por ejemplo la primera ecuación y desarrollemos ambos miembros en serie de Taylor alrededor de  $E = E_0$  y despreciemos las potencias superiores de  $\Delta E$ . Llamemos  $k_0 = \sqrt{\frac{2m E_0}{\hbar^2}}$ ;  $\left(\frac{K}{k}\right)_0 = \sqrt{\frac{V - E_0}{E_0}}$  etc...

$$\left[ \operatorname{tg}\left(\frac{ka}{2}\right) = (1 - \epsilon/2) \frac{K}{k} \right]; \left(\frac{K}{k}\right)' \text{ será la derivada respecto a } E \text{ de } \left(\frac{K}{k}\right)_0, \text{ etc.}$$

$\tan\left(\frac{k_0 a}{2}\right) = \left(1 - \frac{\epsilon}{2}\right) \frac{K}{K}$ ;  $\frac{\epsilon}{2} = e^{-2K_0 b}$

$\tan\left(\frac{k_0 a}{2}\right) + \frac{\frac{a}{2} k_0' (\Delta E)}{\cos^2\left(\frac{k_0 a}{2}\right)} = (1 - e^{-2K_0 b}) \left(\frac{K}{K_0}\right) + \left\{ \left(\frac{K}{K_0}\right)' (1 - e^{-2K_0 b}) + \left(\frac{K}{K_0}\right) e^{-2K_0 b} 2b K_0' \right\} (\Delta E)$

Evidentemente:

$\tan\left(\frac{k_0 a}{2}\right) = \left(\frac{K}{K_0}\right)$ ; restando esta ecuación tenemos:  
 $\frac{\frac{a}{2} k_0' (\Delta E)}{\cos^2\left(\frac{k_0 a}{2}\right)} = -\left(\frac{K}{K_0}\right) e^{-2K_0 b} + \left\{ \left(\frac{K}{K_0}\right)' (1 - e^{-2K_0 b}) + \left(\frac{K}{K_0}\right) e^{-2K_0 b} 2b K_0' \right\} (\Delta E)$

$\therefore (\Delta E) = \frac{\left(\frac{K}{K_0}\right) e^{-2K_0 b}}{\left(\frac{K}{K_0}\right)' (1 - e^{-2K_0 b}) + \left(\frac{K}{K_0}\right) 2b K_0' - \frac{a}{2} \frac{k_0'}{\cos^2\left(\frac{k_0 a}{2}\right)}}$

$\frac{dK^2}{dE} = 2KK' = -\frac{2m}{\hbar^2}$   
 $\therefore K' = -\frac{m}{\hbar^2 K}$   
 $k_0' = +\frac{m}{\hbar^2} \left(1 + \frac{K_0^2}{K_0^2}\right)$

Si b es muy grande:

$(\Delta E) \sim \frac{e^{-2K_0 b}}{2b K_0'}$  → solución par.

$\left(\frac{K}{K_0}\right)' - \frac{\frac{a}{2} k_0'}{\cos^2\left(\frac{k_0 a}{2}\right)} = \left(\frac{K}{K_0}\right)' - \frac{a}{2} k_0' (1 + \tan^2)$   
 $\frac{m}{\hbar^2} \left[ -\frac{K_0}{K_0^2} - \frac{K_0}{K_0} - \frac{a}{2K_0} \left(1 + \frac{K_0^2}{K_0^2}\right) \right]$

Evidentemente:

$(\Delta E) \sim -\frac{e^{-2K_0 b}}{2b K_0'}$  → solución impar.

$\Delta E = \frac{\hbar^2 K_0^2}{m} \frac{k_0^2}{\left(1 + \frac{K_0 a}{2}\right) (K_0^2 + K_0^2)} e^{-2K_0 b}$

No conviene dar a estas soluciones otra forma: llamemos:

$\eta = K_0 a$ ;  $\xi = k_0 a$ ;  $K_0' = \frac{d}{dE_0} \left( \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E_0)} \right) = -\frac{1}{2} \frac{\frac{2m}{\hbar^2}}{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E_0)}}$   
 $-\frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{K_0} = -\frac{m}{\hbar^2} \frac{a}{\eta}$

$\Delta E = \frac{2(V-E)E}{(1+K_0^2/a^2)} e^{-2K_0 b}$

$(\Delta E) \sim \frac{-\eta e^{-2\eta b/a}}{2 \frac{m}{\hbar^2} a^2 b/a}$  → solución par

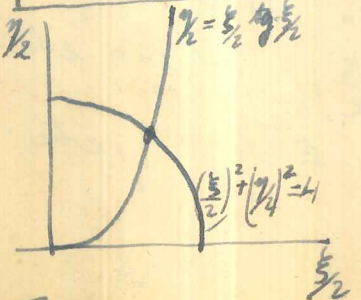
$\Delta E \sim \frac{\eta e^{-2\eta b/a}}{2 \frac{m}{\hbar^2} a^2 b/a}$  → solución impar.

Entonces que determinar  $\eta$  todavía. Para ello recordemos:

$k_0 \tan\left(\frac{k_0 a}{2}\right) = K_0 \therefore \frac{\xi}{2} \tan\left(\frac{\xi}{2}\right) = \frac{\eta}{2}$ ;  $\left(\frac{\xi}{2}\right)^2 + \left(\frac{\eta}{2}\right)^2 = \frac{a^2 [k_0^2 + K_0^2]}{4} = \frac{2m V_0 a^2}{4 \hbar^2}$

Como ejemplo numérico tomamos  $\frac{2m V_0 a^2}{\hbar^2} = 16$ ; luego tenemos:

$\frac{\xi}{2} \tan\left(\frac{\xi}{2}\right) = \frac{\eta}{2}$ ;  $\left(\frac{\xi}{2}\right)^2 + \left(\frac{\eta}{2}\right)^2 = 4$



Para hallar estas soluciones conviene representar:  
 En la Fig. 8, pág. 37 de Schiff y vemos que la solución gráfica da:  $\frac{\eta}{2} = 1.7$ ;  $\frac{\xi}{2} = 1.1$ ;  
 $\eta = 3.4$ ;  $\xi = 2.2$ ; llamemos  $\beta = b/a$ :

$\Delta E \sim -\frac{3.4 e^{-2 \cdot 3.4 \beta}}{16 \beta} V_0$  → solución par

$\Delta E = \frac{3.4 e^{-2 \cdot 3.4 \beta}}{16 \beta} V_0$  → impar