

La ecuación de Schrödinger, Continuación

Fernando Barreiro

Universidad Autónoma de Madrid

Fundamentos Física III

Recordatorio: oscilador armónico simple es masa puntual m en extremo muelle con constante elástica k . La fuerza que ejerce el muelle al separar m del equilibrio es $F = -kx \Rightarrow U = 0.5kx^2$. La frecuencia angular del oscilador es $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}} = 2\pi\nu$. **Clásicamente** movimiento oscilador limitado entre $[-x_0, +x_0]$ siendo x_0 la amplitud. La energía cinética es máxima a $x = 0$ y nula en $x = -x_0, +x_0$.

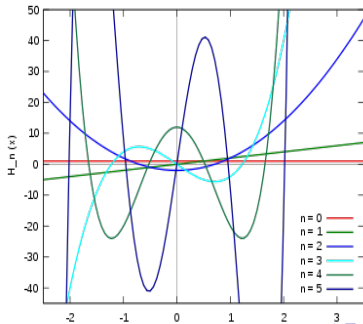
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\Psi(x) = E\Psi(x) \Rightarrow \Psi(x) = Ae^{-ax^2} \quad (1)$$

- $\frac{d\Psi(x)}{dx} = -2ax(Ae^{-ax^2})$
- $\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = -2a(Ae^{-ax^2}) - 2ax(-2ax)(Ae^{-ax^2}) = (-2a + 4a^2x^2)Ae^{-ax^2}$
- $\frac{a\hbar^2}{m} - \frac{2a^2\hbar^2}{m} \cdot x^2 + \frac{1}{2}kx^2 = E \Rightarrow$
 - $-\frac{2a^2\hbar^2}{m} + \frac{1}{2}k = 0 \Rightarrow a = \frac{\sqrt{km}}{2\hbar} = \frac{m\omega_0}{2\hbar}$
 - $E = \frac{a\hbar^2}{m} = \frac{\hbar^2}{m} \frac{m\omega_0}{2\hbar} = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$
- Como $E = \frac{1}{2}kx_0^2 = \frac{a\hbar^2}{m} \Rightarrow a \propto x_0^2$
- Estado fundamental : $\Psi(x) = \left(\frac{m\omega_0}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\left(\frac{\sqrt{km}}{2\hbar}\right)x^2} = \left(\frac{m\omega_0}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\left(\frac{m\omega_0}{2\hbar}\right)x^2}$

El oscilador armónico: Continuación

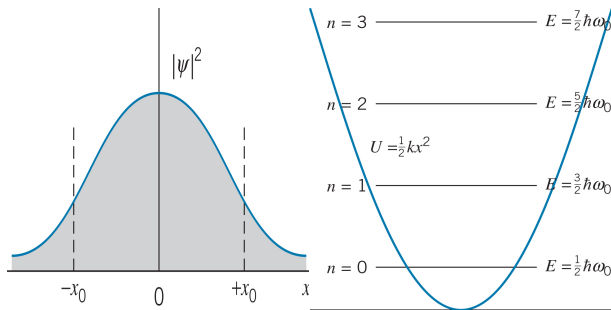
Para estados distintos del fundamental puede demostrarse que las soluciones a la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico son:

- $\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega_0}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\left(\frac{m\omega_0}{2\hbar}\right)x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}x\right)$ siendo $H_n(x) \equiv$ pol. **Hermite**.
- $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2})$
- $H_0(x) = 1$
- $H_1(x) = 2x$
- $H_2(x) = 4x^2 - 2$
- $H_3(x) = 8x^3 - 12x$
- $\int_{-\infty}^{+\infty} H_n(x)H_m(x)e^{-x^2} dx = n!2^n \sqrt{\pi}\delta_{nm}$
- Toda función **continua** $f(x)$ puede escribirse como $f(x) = \sum_n A_n H_n(x)$
Hermite (physicists') Polynomials



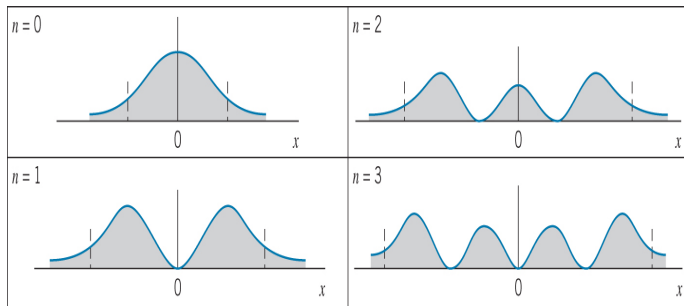
Para estados distintos del fundamental puede demostrarse que

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0 ; n = 0, 1, 2, 3.. \quad (2)$$



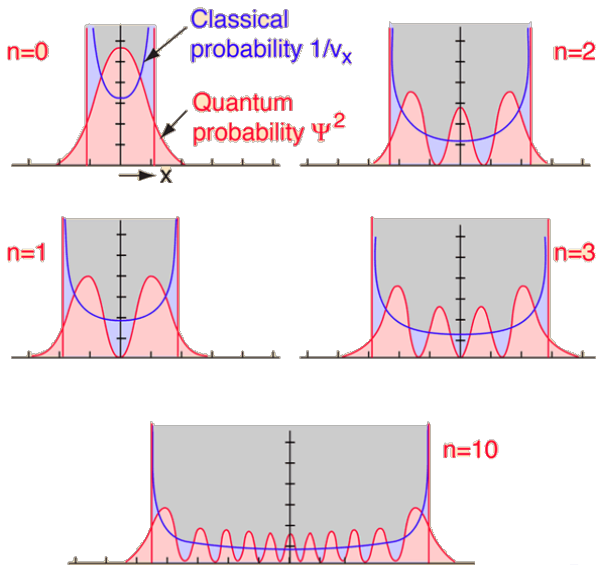
- A diferencia pozo infinito, espaciado es **uniforme**. Característica habitual de moléculas diatómicas como HCl , $0.1 - 1$ eV, y en núcleos, $0.1 - 1$ MeV
- Densidades probabilidad penetran en zonas prohibidas clásicamente.

Densidades de probabilidad para el oscilador armónico cuántico. Los puntos de retorno clásicos vienen indicados por las líneas verticales. Se separan más del origen a medida que crece n . De hecho es fácil ver que $x_0 \propto \sqrt{2n+1}$



El oscilador armónico: Continuación

Comparación densidades de probabilidad oscilador armónico clásico y cuántico :
convergen si $n \rightarrow \infty$



Un oscilador está ligado a una zona del espacio mediante una fuerza de tipo elástica con constante recuperadora $k = 95.7 \text{ eV/nm}^2$. Determinar la energía de su estado fundamental. Determinar la energía que debe absorber este electrón a fin de poder saltar al segundo estado excitado.

Sol.

- $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{1}{2} \hbar c \sqrt{\frac{k}{mc^2}} = \frac{1}{2} (197 \text{ eV} \cdot \text{nm}) \sqrt{\frac{95.7 \text{ eV/nm}^2}{0.511 \times 10^6 \text{ eV}}} = 1.35 \text{ eV}$
- El espaciado entre los niveles de energía adyacentes es de $\hbar \omega_0 = 2.70 \text{ eV}$ luego el electrón debe absorber una energía $\Delta E = 2\hbar \omega_0 = 5.40 \text{ eV}$

Determinar la normalización de la f.d.o. oscilador armónico unidimensional

- $\Psi(x) = Ae^{-ax^2}$
- $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2ax^2} dx = A^2 \sqrt{\frac{\pi}{2a}} = 1$
- Luego $A = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$

Clásicamente los puntos de retorno $\pm x_0$ de un oscilador armónico simple vienen dados por la condición $E = U$ i.e. $K = 0$. Probar que para el estado fundamental $x_0 = \left(\frac{\hbar\omega_0}{k}\right)^{\frac{1}{2}}$ y determinar los correspondientes a los del primer y segundo estados excitados.

- $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 = \frac{1}{2}kx_0^2 \Rightarrow x_0 = \sqrt{\frac{\hbar\omega_0}{k}}$
- $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega_0 = \frac{1}{2}kx_0^2 \Rightarrow x_0 = \sqrt{\frac{3\hbar\omega_0}{k}}$
- $E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega_0 = \frac{1}{2}kx_0^2 \Rightarrow x_0 = \sqrt{\frac{5\hbar\omega_0}{k}}$

La función de onda para el primer estado excitado del oscilador armónico es $\Psi(x) = Axe^{-ax^2}$. Determinar A, a y E.

- $\frac{d\Psi(x)}{dx} = Ae^{-ax^2}(1 - 2ax^2)$
- $\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = Ae^{-ax^2}(-6ax + 4a^2x^3)$
- Luego $-\frac{\hbar^2}{2m}Ae^{-ax^2}(-6ax + 4a^2x^3) + \frac{1}{2}kx^2Axe^{-ax^2} = EAxe^{-ax^2}$
- Dividiendo por $Axe^{-ax^2} \Rightarrow x^2[\frac{k}{2} - \frac{2\hbar^2a^2}{m}] + [\frac{3a\hbar^2}{m} - E] = 0$
- Luego $\frac{k}{2} = \frac{2\hbar^2a^2}{m} \Rightarrow a = \frac{m\omega_0}{2\hbar}$
- Y $E = \frac{3a\hbar^2}{m} = \frac{3\hbar^2}{m} \frac{m\omega_0}{2\hbar} = \frac{3}{2}\hbar\omega_0$
- $A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2ax^2} dx = 2A^2 \int_0^{\infty} x^2 e^{-2ax^2} dx = \frac{2A^2}{\sqrt{8a^3}} \int_0^{\infty} u^2 e^{-u^2} du = \frac{2A^2}{\sqrt{8a^3}} \frac{\sqrt{\pi}}{4} = 1$
- $A^2 = \frac{4\sqrt{2a^3}}{\sqrt{\pi}} = 4\sqrt{\frac{2}{\pi}} [\frac{m\omega_0}{2\hbar}]^{\frac{3}{2}} \Rightarrow A = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}} [\frac{m\omega_0}{\hbar}]^{\frac{3}{4}}$

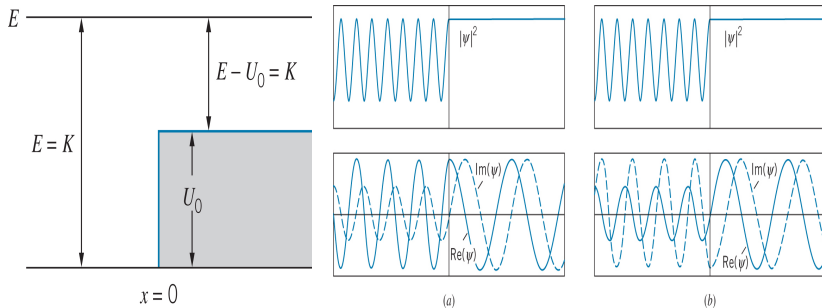
Consideremos el oscilador armónico en su estado fundamental.

- $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 x dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-2ax^2} dx = 0$
- $\langle x^2 \rangle = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2ax^2} dx = \frac{2A^2}{\sqrt{8a^3}} \int_0^{\infty} u^2 e^{-u^2} du = \frac{2A^2}{\sqrt{8a^3}} \frac{\sqrt{\pi}}{4} = \frac{\hbar}{2m\omega_0}$
- Luego $\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}$
- $\langle U \rangle = 0.5k \langle x^2 \rangle = 0.5m\omega_0^2 \frac{\hbar}{2m\omega_0} = \frac{1}{4} \hbar\omega_0$
- $\langle K \rangle = E - \langle U \rangle = \frac{1}{2} \hbar\omega_0 - \frac{1}{4} \hbar\omega_0 = \frac{1}{4} \hbar\omega_0$
- $\langle p^2 \rangle = 2m \langle K \rangle = 2m \frac{1}{4} \hbar\omega_0 = \frac{m\hbar\omega_0}{2}$
- Como por simetria $\langle p \rangle = 0 \Rightarrow \Delta p = \sqrt{\frac{m\hbar\omega_0}{2}}$
- $\Delta x \Delta p = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \sqrt{\frac{m\hbar\omega_0}{2}} = \frac{\hbar}{2}$

- Se trata de una partícula sujeta al potencial $U(x, y) = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}y^2$
- Como los movimientos en x e y son independientes y cada uno contribuye una energía $\hbar\omega_0(n + \frac{1}{2})$ los estados de energía del oscilador armónico bidimensional vendrán dados por $E_{n_x, n_y} = \hbar\omega_0(n_x + n_y + 1)$
- El estado N -ésimo de energía tiene N posibles estados cuánticos
- En efecto n_x, n_y varían entre 0 y $N-1$ de modo que su suma sea N .
- Para cada $n_x = 0, 1, 2, 3, \dots, N - 1$ el valor de n_y está fijo
- La degeneración de cada nivel es $N = n_x + n_y + 1$
- Estado fundamental : $(0, 0)$
- Primer estado excitado : $(0, 1); (1, 0)$
- Segundo estado excitado : $(0, 2); (1, 1); (2, 0)$
- Tercer estado excitado : $(0, 3); (1, 2); (2, 1); (3, 0)$

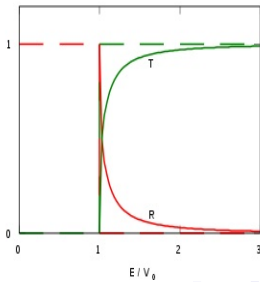
Escalón de potencial, $E > U_0$

- $U(x) = 0$; $x < 0$
- $U(x) = U_0$; $x \geq 0$
- $\Psi_0(x) = A \sin k_0 x + B \cos k_0 x$; $k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$; $x < 0$
- $\Psi_1(x) = C \sin k_1 x + D \cos k_1 x$; $k_1 = \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}}$; $x > 0$
- $\Psi_0(x) = A' e^{i(k_0 x - \omega t)} + B' e^{-i(k_0 x + \omega t)}$; $x < 0$
- $\Psi_1(x) = C' e^{i(k_1 x - \omega t)} + D' e^{-i(k_1 x + \omega t)}$; $x > 0$
- En $x < 0$: incidente ($\propto |A'|^2$) y reflejada ($\propto |B'|^2$) \Rightarrow onda estacionaria
- En $x > 0 \Rightarrow D' = 0 \Rightarrow |\Psi_1|^2 = Cte.$

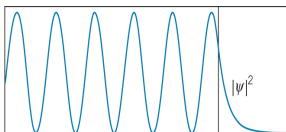


Escalón de potencial, $E > U_0$: continuación

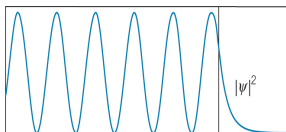
- $U(x) = 0$; $x < 0$
- $U(x) = U_0$; $x \geq 0$
- $\Psi_0(x) = A'e^{ik_0x} + B'e^{-ik_0x}$; $k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$; $x < 0$;
- $\Psi_1(x) = C'e^{ik_1x}$; $k_1 = \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}}$; $x > 0$
- $\Psi_0(0) = \Psi_1(0) \Rightarrow A' + B' = C'$
- $\Psi_0'(0) = \Psi_1'(0) \Rightarrow k_0(A' - B') = k_1C'$
- $C' = \frac{2A'k_0}{k_0+k_1}$; $B' = \frac{A'(k_0-k_1)}{k_0+k_1}$
- Probabilidad de reflexión : $R = \left[\frac{k_0-k_1}{k_0+k_1} \right]^2 = \left(\frac{1-\sqrt{1-(U_0/E)}}{1+\sqrt{1-(U_0/E)}} \right)^2 > 0!$
- Probabilidad de transmisión : $T = \frac{k_1}{k_0} \left[\frac{2k_0}{k_0+k_1} \right]^2 = 1 - R$
- *Nótese que $R \rightarrow 0 \Leftrightarrow T \rightarrow 1$ si $U_0 \ll E$*



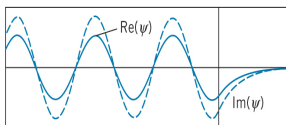
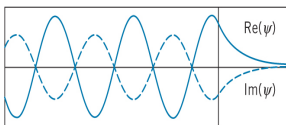
- $\Psi_0(x) = A \sin kx + B \cos kx$; $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$; $x < 0$
- $\Psi_1(x) = C e^{qx} + D e^{-qx}$; $q = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$; $x > 0$
- $\Psi_0(x) = A' e^{i(kx - \omega t)} + B' e^{-i(kx + \omega t)}$; $x < 0$
- En $x < 0$: $|A'|^2 = |B'|^2$
- En $x > 0 \Rightarrow C = 0$
- $|\Psi_1(x)|^2 \propto e^{-2qx}$ se reduce a la mitad si $\Delta x = \frac{1}{2q} = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_0 - E)}}$



(a)



(b)



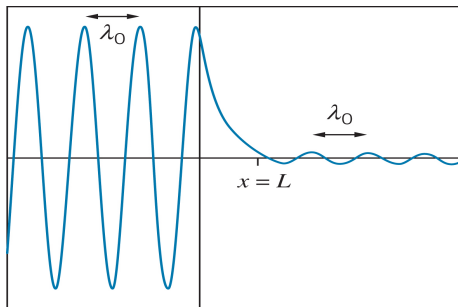
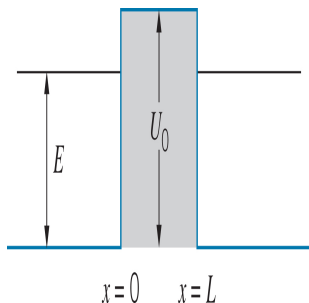
- A fin de penetrar en la zona $x > 0$ la partícula debe ganar una energía $> U_0 - E$ i.e. $(U_0 - E) + K$,
- Esta violación conservación energía será solo aparente si ocurre en $\Delta t = \frac{\hbar}{U_0 - E + K}$
- La velocidad de la partícula es $v = \sqrt{2K/m}$
- Por tanto recorrerá una distancia : $\Delta x = \frac{1}{2}v\Delta t = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2K}{m}}\frac{\hbar}{U_0 - E + K}$
- Factor 1/2 tiene en cuenta partícula debe volver a $x = 0$ en Δt
- Para calcular Δx_{max} diferenciamos

$$\Rightarrow \frac{\Delta x}{\Delta K} = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{2}{m} \frac{0.5K^{-1/2}(U_0 - E + K) - K^{1/2}}{(U_0 - E + K)^2}} = 0$$
- $K = U_0 - E \Rightarrow \Delta x_{max} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2(U_0 - E)}{m}}\frac{\hbar}{2(U_0 - E)} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{1}{2m(U_0 - E)}}$
- La penetración en la región prohibida $x > 0$ es consistente con el principio de incertidumbre
- Más aun, $\Delta x_{max} \rightarrow 0$ si $U_0 \gg E$ i.e. $U_0 \rightarrow \infty$

- $\Psi_0(x) = e^{ikx} + r e^{-ikx}$; $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$; $x < 0$
- $\Psi_1(x) = t e^{-qx}$; $q = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$; $x > 0$
- Continuidad $\Psi(0) \Rightarrow 1 + r = t$
- Continuidad $\Psi'(0) \Rightarrow ik(1 - r) = -qt$
- $ik - ikr = -q - qr \Rightarrow r = \frac{ik+q}{ik-q} = \frac{1-iq/k}{1+iq/k} = \frac{1-i\sqrt{\frac{U_0}{E}-1}}{1+i\sqrt{\frac{U_0}{E}-1}} \Rightarrow R = |r|^2 = 1!$
- Luego el coeficiente de transmisión es $T = 1 - R = 0$. Sin embargo:
- $t = 1 + r = 1 + \frac{1-i\sqrt{\frac{U_0}{E}-1}}{1+i\sqrt{\frac{U_0}{E}-1}} = \frac{2}{1+i\sqrt{\frac{U_0}{E}-1}}$
- Por tanto : $\Psi_1(x) = \frac{2}{1+i\sqrt{\frac{U_0}{E}-1}} e^{-qx} \Rightarrow |\Psi_1(x)|^2 = \frac{4E}{U_0} e^{-2qx}$
- Probabilidad no nula encontrar partícula en $x > 0$, zona prohibida clásicamente pues en ella la energía cinética es $K < 0$
- Caso límite $U_0 \rightarrow \infty \equiv E \ll U_0 \Rightarrow |t| \rightarrow 0$

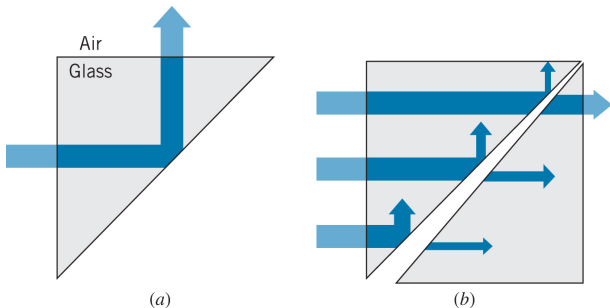
Barrera de potencial, $E < U_0$

- $U(x) = 0$; $x < 0$
- $U(x) = U_0$; $0 \leq x \leq L$
- $U(x) = 0$; $x > 0$
- Intensidad de la onda transmitida depende de la energía de la partícula así como de la altura y anchura de la barrera
- Clásicamente la zona $x > L$ está prohibida
- Cuánticamente, las partículas no se pueden observar en la zona $0 < x < L$ pero sí pueden 'penetrar' a $x > L$



Análogo clásico barrera de potencial

- Reflexión total interna de una onda luminosa incidente sobre la frontera aire-vidrio ($n_{\text{vidrio}} > n_{\text{aire}}$)
- Reflexión total interna frustrada en una doble frontera : onda evanescente
- Intensidad onda evanescente disminuye con la mayor anchura del 'gap' de aire
- En este ultimo no se observa ninguna onda luminosa



- $x < 0$; $\Psi_0(x) = 1e^{ikx} + Re^{-ikx}$; $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$
- $0 < x < L$; $\Psi_1(x) = Ae^{-qx} + Be^{qx}$; $q = \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2}$
- $x > L$; $\Psi_2(x) = Te^{ik(x-L)}$
- $\Psi_0(0) = \Psi_1(0) \Rightarrow 1 + R = A + B$
- $\Psi'_0(0) = \Psi'_1(0) \Rightarrow ik(1 - R) = q(B - A) \Rightarrow (1 - R) = -i(q/k)(B - A)$
- $\Psi_1(L) = \Psi_2(L) \Rightarrow Ae^{-qL} + Be^{qL} = T$
- $\Psi'_1(L) = \Psi'_2(L) \Rightarrow q[-Ae^{-qL} + Be^{qL}] = ikT \Rightarrow [-Ae^{-qL} + Be^{qL}] = i(k/q)T$

De las dos últimas ecuaciones se obtiene

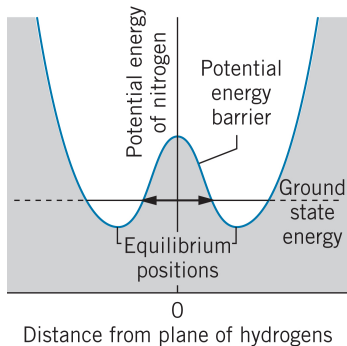
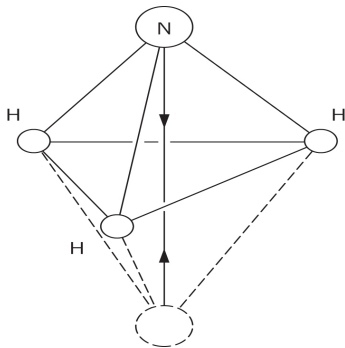
- $2Be^{qL} = T[1 + i(k/q)] \Rightarrow B = \frac{T}{2}[1 + i(k/q)]e^{-qL}$
- $2Ae^{-qL} = T[1 - i(k/q)] \Rightarrow A = \frac{T}{2}[1 - i(k/q)]e^{qL}$

Pero de las dos primeras ecuaciones tenemos sumando

- $2 = A[1 + i(q/k)] + B[1 - i(q/k)]$ sustituyendo
- $2 = \frac{T}{2} \{ [1 - i(k/q)][1 + i(q/k)]e^{qL} + [1 + i(k/q)][1 - i(q/k)]e^{-qL} \}$
- $2 = \frac{T}{2} \{ [1 - i(k/q) + i(q/k) + 1]e^{qL} + [1 + i(k/q) - i(q/k) + 1]e^{-qL} \}$
- $2 = \frac{T}{2} \{ [2 + i(q/k - k/q)]e^{qL} + [2 + i(k/q - q/k)]e^{-qL} \}$
- $2 = \frac{T}{2} \{ 2(e^{qL} + e^{-qL}) + i(q/k - k/q)(e^{qL} - e^{-qL}) \}$
- $2 = T \{ 2\cosh qL + i(q/k - k/q)\sinh qL \}$

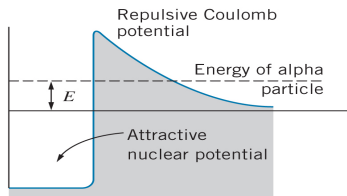
- $T = 2 / \{2 \cosh qL + i(q/k - k/q) \sinh qL\}$
- $|T|^2 = 4 / \{4 \cosh^2 qL + (q/k - k/q)^2 \sinh^2 qL\}$
- $|T|^2 = 4 / \{4 \cosh^2 qL + (q^2/k^2 + k^2/q^2 - 2) \sinh^2 qL\}$
- $|T|^2 = 4k^2q^2 / \{4q^2k^2 \cosh^2 qL + (q^4 + k^4 - 2k^2q^2) \sinh^2 qL\}$
- $|T|^2 = 4k^2q^2 / \{4q^2k^2 \cosh^2 qL + [(q^2 + k^2)^2 - 4k^2q^2] \sinh^2 qL\}$
- $|T|^2 = 4k^2q^2 / \{4q^2k^2 + [(q^2 + k^2)^2] \sinh^2 qL\} \Rightarrow 0 \leq |T|^2 < 1$
- $|T|^2 = 0 \Leftrightarrow E = 0$, y crece con E
- Si $qL \ll 1 \Rightarrow \sinh qL \sim qL \Rightarrow |T|^2 = \frac{4E(U_0 - E)}{4E(U_0 - E) + U_0^2 q^2 L^2}$
- Para $E \rightarrow U_0 \Rightarrow |T|^2 = \frac{1}{1 + (U_0 L^2 m / 2 \hbar^2)}$ i.e. decrece con U_0 y L^2
- Pero si $qL \gg 1$ tenemos que $\sinh^2 qL = \left\{ \frac{e^{qL} - e^{-qL}}{2} \right\}^2 \sim \frac{e^{2qL}}{4}$
- Por tanto : $|T|^2 \sim \frac{16k^2q^2}{(q^2 + k^2)^2} \cdot e^{-2qL}$
- La probabilidad de penetración **decrece exponencialmente**
- Mientras que **clásicamente es nula** pues $\hbar \Rightarrow 0 \Rightarrow q \rightarrow \infty$
- $k^2 = 2mE/\hbar^2$ y $q^2 = 2m(U_0 - E)/\hbar^2 \Rightarrow k^2 + q^2 = 2mU_0/\hbar^2 \Rightarrow$
- $|T|^2 \sim \frac{16E(U_0 - E)}{U_0^2} \cdot e^{-2qL}$

- Clásicamente el átomo de N no puede moverse según el eje de simetría de la molécula de NH_3 hasta alcanzar la posición simétrica respecto al plano de los tres H debido a la barrera de potencial van der Waals de estos últimos
- Cuánticamente puede hacerlo mediante efecto túnel, de hecho la molécula de NH_3 oscila con frecuencia de 10^{10} Hz

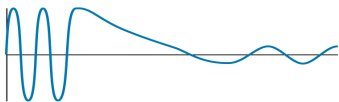


Barrera de potencial, $E < U_0$: más ejemplos de 'tunneling'

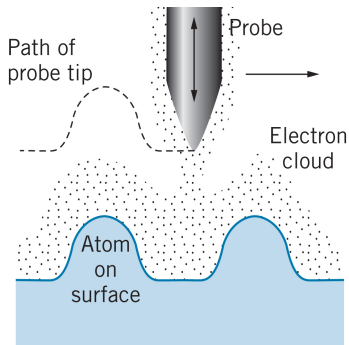
- En un núcleo complejo, un par de protones y otro de neutrones puede formar un agregado, un núcleo de He, que podrá escapar del núcleo original, atravesando la barrera repulsiva coulombiana del resto de nucleones mediante efecto túnel : *nuclear α decay*
- El STM (scanning tunnel microscope) permite obtener 'imágenes' de la superficie de un material con resolución 0.01 nm , Binnig-Rohrer 1986



(a)



(b)



- $x < 0$; $\Psi_0(x) = 1e^{ikx} + Re^{-ikx}$; $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$
- $0 < x < L$; $\Psi_1(x) = Ae^{iqx} + Be^{-iqx}$; $q = \sqrt{2m(E - U_0)/\hbar^2}$
- $x > L$; $\Psi_2(x) = Te^{ik(x-L)}$
- $\Psi_0(0) = \Psi_1(0) \Rightarrow 1 + R = A + B$
- $\Psi'_0(0) = \Psi'_1(0) \Rightarrow ik(1 - R) = iq(A - B) \Rightarrow (1 - R) = (q/k)(A - B)$
- $\Psi_1(L) = \Psi_2(L) \Rightarrow Ae^{iqL} + Be^{-iqL} = T$
- $\Psi'_1(L) = \Psi'_2(L) \Rightarrow iq[Ae^{iqL} - Be^{-iqL}] = ikT \Rightarrow [Ae^{iqL} - Be^{-iqL}] = (k/q)T$

De las dos últimas ecuaciones se obtiene

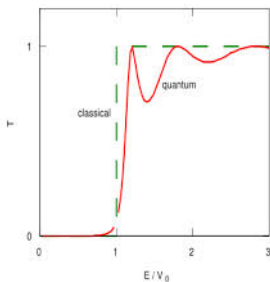
- $2Be^{-iqL} = T[1 - (k/q)] \Rightarrow B = \frac{T}{2}[1 - (k/q)]e^{iqL}$
- $2Ae^{iqL} = T[1 + (k/q)] \Rightarrow A = \frac{T}{2}[1 + (k/q)]e^{-iqL}$

Pero de las dos primeras ecuaciones tenemos sumando

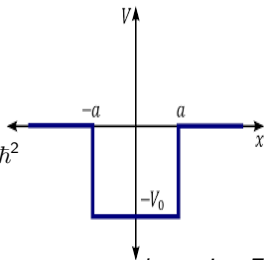
- $2 = A[1 + (q/k)] + B[1 - (q/k)]$ sustituyendo
- $2 = \frac{T}{2} \{ [1 + (k/q)][1 + (q/k)]e^{-iqL} + [1 - (k/q)][1 - (q/k)]e^{iqL} \}$
- $2 = \frac{T}{2} \{ [1 + (k/q) + (q/k) + 1]e^{-iqL} + [1 - (k/q) - (q/k) + 1]e^{iqL} \}$
- $2 = \frac{T}{2} \{ [2 + (q/k + k/q)]e^{-iqL} + [2 - (k/q + q/k)]e^{iqL} \}$
- $2 = \frac{T}{2} \{ 2(e^{iqL} + e^{-iqL}) - (q/k + k/q)(e^{iqL} - e^{-iqL}) \}$
- $2 = T \{ 2\cos qL - i(q/k + k/q)\sin qL \}$

Barrera de potencial, $E > U_0$: continuación

- $T = 2 / \{2 \cos qL - i(q/k + k/q) \sin qL\}$
- $|T|^2 = 4 / \{4 \cos^2 qL + (q/k + k/q)^2 \sin^2 qL\}$
- $|T|^2 = 4 / \{4 \cos^2 qL + (q^2/k^2 + k^2/q^2 + 2) \sin^2 qL\}$
- $|T|^2 = 4k^2q^2 / \{4q^2k^2 \cos^2 qL + (q^4 + k^4 + 2k^2q^2) \sin^2 qL\}$
- $|T|^2 = 4k^2q^2 / \{4q^2k^2 \cos^2 qL + (q^2 + k^2)^2 \sin^2 qL\}$
- $|T|^2 = 4k^2q^2 / \{4q^2k^2 + [(k^2 - q^2)^2] \sin^2 qL\} = \frac{4E(E-U_0)}{4E(E-U_0) + U_0^2 \sin^2 qL}$
- La amplitud de la onda transmitida **oscila** : $0 < |T|^2 \leq 1$
- $|T|^2 = 1 \Leftrightarrow qL = n\pi, n = 0, 1, 2, \dots$ véase figura para $L\sqrt{2mU_0}/\hbar = 7$.
- Oscilaciones para $|T|^2$ acotadas entre $\frac{4E(E-U_0)}{4E(E-U_0) + U_0^2} = \frac{4E(E-U_0)}{(2E-U_0)^2}$ y 1.
- Si $E \rightarrow U_0 \Rightarrow q \rightarrow 0 \Rightarrow \sin qL \sim qL \Rightarrow |T|^2 = \frac{1}{1 + \frac{U_0^2 q^2 L^2}{4E(E-U_0)}} = \frac{1}{1 + \frac{mU_0 L^2}{2\hbar^2}}$



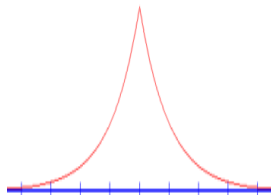
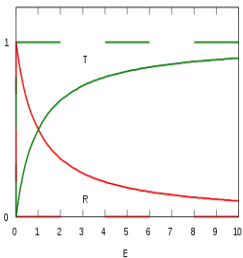
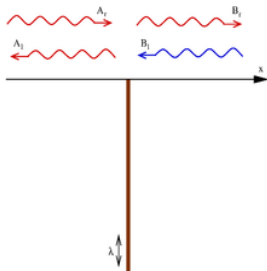
- Clásicamente partícula sometida a potencial atractivo, como en el problema de Kepler, atrapada en órbitas
- Sea el potencial de la figura adjunta que divide OX en tres regiones:
 $I : x < -a$, $II : -a < x < a$ y $III : x > a$



- Consideremos $-V_0 < E < 0$
- $\Psi_{III}(x) = Ae^{-\kappa x}$; $\kappa = \sqrt{2m|E|}/\hbar$
- $\Psi_I(x) = Be^{\kappa x}$
- $\Psi_{II}^{even}(x) = C \cdot \cos qx$; $q^2 = 2m(-|E| + V_0)/\hbar^2$
- Continuidad $x = -a$: $Be^{-\kappa a} = C \cdot \cos qa$
- Con. derivada : $B\kappa e^{-\kappa a} = Cq \cdot \sin qa \Rightarrow \kappa = q \cdot \tan qa \Rightarrow \text{determino } E$
- $\kappa a = qa \cdot \tan qa \Rightarrow \xi \cdot \tan \xi = \eta$; siendo $\xi = qa > 0$ y $\eta = \kappa a > 0$
- Como $\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} = \gamma^2$ puedo determinar E gráficamente de las intersecciones curva $\xi \tan \xi$ con primer cuadrante circunferencia radio γ .
- Análogamente si elijo : $\Psi_{II}^{odd}(x) = D \cdot \sin qx \Rightarrow \kappa = -q \cdot \cotan qa$
- Relaciones cuantificación independientes de elección $x = \pm a$ para continuidad
- **THE END** para examen Mayo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \lambda\delta(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (3)$$

- $E > 0 \Rightarrow k = \sqrt{2mE}/\hbar \Rightarrow$ *partícula libre* $\forall x$
 - $\Psi_L(x) = e^{ikx} + re^{-ikx}$; $x < 0$ y $\Psi_R(x) = te^{ikx}$; $x > 0 \Rightarrow 1 + r = t \Rightarrow$
 - $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} : -\frac{\hbar^2}{2m} [\Psi'(\epsilon) - \Psi'(-\epsilon)] + \lambda\Psi(0) = 0 \Rightarrow -\frac{i\hbar^2 k}{2m} [t - 1 + r] + \lambda t = 0$
 - $t = \frac{1}{1 + i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}} \Rightarrow T = |t|^2 = \frac{1}{1 + \frac{m^2\lambda^2}{\hbar^4 k^2}} = \frac{1}{1 + \frac{m\lambda^2}{2\hbar^2 E}} \Rightarrow R = |r|^2 = \frac{1}{1 + \frac{2\hbar^2 E}{m\lambda^2}}$
- $E < 0 \Rightarrow \kappa = \sqrt{2m|E|}/\hbar \Rightarrow$ *partícula confinada en $x < 0$ o bien $x > 0$*
 - $\Psi_L(x) = A_L e^{\kappa x}$: $x < 0$ y $\Psi_R(x) = A_R e^{-\kappa x}$: $x > 0 \Rightarrow A_L = A_R$
 - $-\frac{\hbar^2}{2m} [\Psi'(\epsilon) - \Psi'(-\epsilon)] + \lambda\Psi(0) = 0 \Rightarrow -\frac{\hbar^2 \kappa}{2m} [-A_R - A_L] + \lambda A_L = 0$
 - $-\lambda = \frac{\kappa \hbar^2}{m} \Rightarrow E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{m^2 \lambda^2}{\hbar^4} = -\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2}$



- Estructura electrónica en metales : gas electrones libres dentro del metal
- Modelo: $V = 0$ dentro del metal $0 < x < L$ y $V = V_0 > 0$ para $x < 0, x > L$
- Despreciamos interacción entre electrones
- $\Psi_{n_x, n_y, n_z}(\vec{r}) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin \frac{n_x \pi x}{L} \sin \frac{n_y \pi y}{L} \sin \frac{n_z \pi z}{L}$
- $E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$
- $n(E) = 2_{spin} \cdot \frac{1}{8}_{oct} \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{2mEL^2}}{\pi \hbar}\right)^3 = \frac{L^3}{\pi^2} \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\right)^3$
- Definición : Energía de Fermi E_F | $n(E_F) = N$ si tenemos N electrones en el metal $\Rightarrow E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 \frac{N}{L^3}\right)^{2/3}$
- A temperatura nula todos estados por debajo de E_F ocupados y por encima vacios
- Para extraer un electrón del metal debemos suministrarle una energia $W = V_0 - E_F$, calentándolo o bien
- Aplico campo eléctrico intensidad I de modo que $V(x) = V_0 - e \cdot I \cdot x$
- Si $V(x_1) = V_0 - e \cdot I \cdot x_1 = E \Rightarrow x_1 = \frac{V_0 - E}{e \cdot I}$
- Creo corriente superficie metal con

$$T \sim e^{-\frac{2}{\hbar} \int_0^{x_1} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx} = e^{-\frac{4}{3} \sqrt{2m} \frac{(V_0 - E)^{3/2}}{e \cdot I}}$$

- Ecuación de Schrödinger no es invariante Lorentz
- Si en lugar de utilizar $E = p^2/2m$ empiezo con $E^2 = p^2 + m^2 \Rightarrow$
- $(\square + m^2)\Phi(\vec{r}, t) = 0 \quad | \quad \square = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \partial_\mu \partial^\mu$
- $(\square + m^2)\Phi^*(\vec{r}, t) = 0$ para la función de onda conjugada
- $\Phi^* \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} - \Phi^* \nabla^2 \Phi + m^2 \Phi^* \Phi = 0$
- $\Phi \frac{\partial^2 \Phi^*}{\partial t^2} - \Phi \nabla^2 \Phi^* + m^2 \Phi \Phi^* = 0$
- $\frac{\partial}{\partial t} (\Phi^* \frac{\partial \Phi}{\partial t} - \Phi \frac{\partial \Phi^*}{\partial t}) - \vec{\nabla} \cdot (\Phi^* \vec{\nabla} \Phi - \Phi \vec{\nabla} \Phi^*) = 0$
- $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$: Identificando términos ecuación anterior \Rightarrow
- $\rho = i(\Phi^* \frac{\partial \Phi}{\partial t} - \Phi \frac{\partial \Phi^*}{\partial t})$ y $\vec{j} = -i(\Phi^* \vec{\nabla} \Phi - \Phi \vec{\nabla} \Phi^*)$
- $\Phi(\vec{r}, t) = Ae^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - E \cdot t)}$ es solución a K-G para una partícula libre
- $\rho = 2E|A|^2 \Rightarrow$ Si $E < 0$ densidad de probabilidad no definida positiva!
- $\vec{j} = 2\vec{p}|A|^2$
- Def: $j_\mu = 2|A|^2 p_\mu \Rightarrow \partial_\mu j^\mu = 0$

- Consideremos un electrón con energía E , impulso \vec{p} y carga $-e$
- $j^\mu(e^-) = -2e|A|^2(E, \vec{p})$
- Consideremos ahora su antipartícula, i.e. un positrón, con el mismo cuadrimomento pero carga $+e$
- $j^\mu(e^+) = 2e|A|^2(E, \vec{p}) = -2e|A|^2(-E, -\vec{p})$
- Si $E > 0$ la corriente de un positrón es la de un electrón con $E < 0$ e impulso $-\vec{p}$
- **emisión de un positrón con energía positiva es equivalente a la absorción de un electrón con energía negativa**
- Esta identificación es posible porque $e^{-iE \cdot t} = e^{-i(-E) \cdot (-t)}$

- Dirac movido a deshacerse de soluciones K-G con energía negativa :
 $H\Psi = (\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m)\Psi$
- Los coeficientes (α_i, β) de requerir $H^2\Psi = (\vec{p}^2 + m^2)\Psi \Rightarrow$
- $\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 0$, $\alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0$, $\alpha_i^2 = \beta^2 = 1$, $i, j = 1, 2, 3$
- Han de ser matrices pues si fueran números reales conmutarían entre sí
- De hecho es fácil demostrar que han de ser matrices de dimensión par, hermiticas, sin traza y con autovalores ± 1
- Ej:
 $tr(\beta) = tr(\alpha_i\alpha_i\beta) = -tr(\alpha_i\beta\alpha_i) = -tr(\beta\alpha_i\alpha_i) = -tr(\beta) \Rightarrow tr(\beta) = 0$
- Las matrices de dimensionalidad más baja que satisfacen estos requisitos pueden escribirse (representación de Dirac-Pauli):

$$\vec{\alpha} = \begin{bmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{bmatrix} ; \quad \beta = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{bmatrix}$$

- Siendo I la matriz unidad 2×2 y las $\vec{\sigma}$ las matrices de Pauli:

$$\alpha_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} ; \quad \alpha_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} ; \quad \alpha_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

- $i\beta \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\beta \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \Psi + m\Psi$ de multiplicar ecuación original por β
- Definiendo $\gamma^\mu = (\beta, \beta\vec{\alpha}) \Rightarrow (i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\Psi = 0 \iff$ cuatro ecuaciones diferenciales
- Es fácil probar que $\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}$ siendo

$$g^{\mu\nu} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

- Se tiene $\gamma^{\mu\dagger} = \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0$ y como $\partial_\mu = (\partial/\partial t; \vec{\nabla}) \Leftrightarrow \partial^\mu = (\partial/\partial t; -\vec{\nabla}) \Rightarrow$:
- $i\gamma^0 \frac{\partial \Psi}{\partial t} + i\gamma^k \frac{\partial \Psi}{\partial x^k} - m\Psi = 0 \Rightarrow$ tomando hermitico:
- $-i \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial t} \gamma^0 - i \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial x^k} (-\gamma^k) - m\Psi^\dagger = 0$
- Definamos el espinor adjunto $\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \gamma^0 \Rightarrow i\partial_\mu \bar{\Psi} \gamma^\mu + m\bar{\Psi} = 0$
- Multiplicando por Ψ a la derecha : $i(\partial_\mu \bar{\Psi}) \gamma^\mu \Psi + m\bar{\Psi} \Psi = 0$
- De $i\gamma^\mu \partial_\mu \Psi - m\Psi = 0 \Rightarrow i\bar{\Psi} \gamma^\mu \partial_\mu \Psi - m\bar{\Psi} \Psi = 0$
- Sumando : $\partial_\mu (\bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi) = 0 \Rightarrow j^\mu = \bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi$
- Nótese que $\rho = j^0 = \bar{\Psi} \gamma^0 \Psi = \Psi^\dagger \Psi = \sum_{i=1}^4 |\Psi_i|^2 > 0!$

- $(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\Psi = 0 \Rightarrow$
- $\gamma^\nu \partial_\nu (i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\Psi = i\frac{1}{2}(\gamma^\nu \gamma^\mu + \gamma^\mu \gamma^\nu) \partial_\nu \partial_\mu \Psi - m\gamma^\nu \partial_\nu \Psi = i g^{\mu\nu} \partial_\nu \partial_\mu \Psi + im^2 \Psi = i(\square + m^2)\Psi = 0$
- Luego cada una de las cuatro componentes de Ψ satisface K-G
- Podremos por tanto buscar soluciones del tipo $\Psi = u(\vec{p})e^{-ip \cdot x}$
- Tendremos sustituyendo en la primera ecuación : $(\gamma^\mu p_\mu - m)u = 0$
- Buscamos autoestados de la energía $\Rightarrow Eu = (\vec{\alpha}\vec{p} + \beta m)u = 0$
- Simplificación : tomemos partícula en reposo

$$Eu = \begin{bmatrix} ml & 0 \\ 0 & -ml \end{bmatrix} u$$

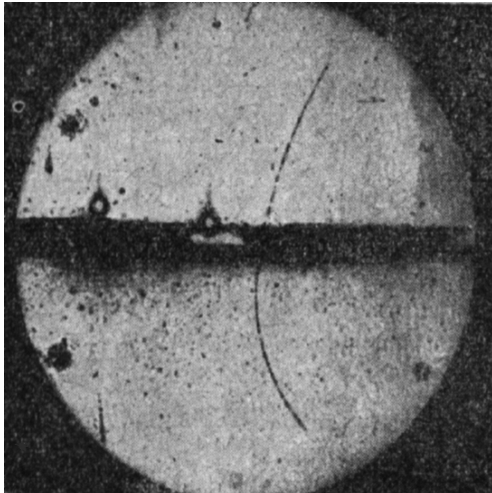
- Luego hay cuatro soluciones independientes

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} ; \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} ; \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} ; \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

- Las dos primeras corresponden a $E = m$, las dos últimas a $E = -m$, conectadas por conjugación de carga
- Ecuación Dirac no obvia existencia estados con $E < 0$ e introduce una doble degeneración : **spin = 1/2**

Carl D. Anderson : descubrimiento positrón en 1932

- Anti-electrones predichos por P.A.M. Dirac en 1927
- Anderson: $\gamma + N \rightarrow N + e^- e^+$
- Primera observación **antiparticulas**
- Owen Chamberlain descubrió el antiprotón en $pp \rightarrow ppp\bar{p}$ en 1955



- Ecuación de Schrödinger : $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$
- Densidad de probabilidad: $P(x) = |\Psi(x)|^2 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1$
- Valor esperado de $f(x)$: $[f(x)]_{av} = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 f(x) dx$
- Potencial constante, $E > U_0$:
 $\Psi(x) = A \cdot \sin kx + B \cdot \cos kx$; $k = \sqrt{2m(E - U_0)}/\hbar^2$
- Potencial constante, $E < U_0$:
 $\Psi(x) = A \cdot e^{k'x} + B \cdot e^{-k'x}$; $k' = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar^2$
- Pozo infinito : $\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$; $E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{8mL^2}$, $n = 1, 2, 3$
- Estado fundamental oscilador armónico: $\Psi(x) = \left(\frac{m\omega_0}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-(\sqrt{km}/2\hbar)x^2}$
- Energías estados oscilador armónico: $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0$, $n = 0, 1, 2, \dots$
- Escalón de potencial $E > U_0$
 - $\Psi_0(x < 0) = A \sin k_0x + B \cos k_0x$
 - $\Psi_1(x > 0) = C \sin k_1x + D \cos k_1x$
- Escalón de potencial $E < U_0$
 - $\Psi_0(x < 0) = A \sin k_0x + B \cos k_0x$
 - $\Psi_1(x > 0) = C e^{k_1x} + D e^{-k_1x}$