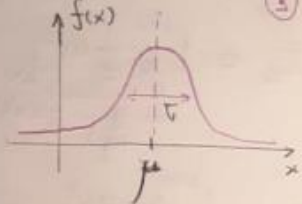
- COMENTARIO SOBRE INTEGRALES GAUSSIANAS: (1)



DISTRIBUCIÓN GAUSSIANA: $f(x|\mu,\sigma) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\, e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$

- COMO $f(x)$ ES UNA DISTRIBUCIÓN DE PROBABILIDAD (ESTÁ NORMALIZADA):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}\,dx = 1 \Rightarrow \boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}\,dx = \sqrt{2\pi\sigma^2}}$$

- COMO $f(x)$ ES SIMÉTRICA RESPECTO A $x=\mu$:

$$\int_{\mu}^{+\infty} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}\,dx = \int_{-\infty}^{\mu} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}\,dx = \frac{1}{2}\sqrt{2\pi\sigma^2} \xRightarrow{\text{si } \mu=0} \boxed{\int_{0}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}\,dx = \frac{1}{2}\sqrt{2\pi\sigma^2}}$$

- SI LLAMAMOS $a = \frac{1}{2\sigma^2}$:

$$I_0 \equiv \int_0^{+\infty} e^{-ax^2}\,dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}} \longleftarrow$$

ÚTIL PARA LAS GUÍAS DE BOLTZMANN Y EN CUÁNTICA, DONDE SE ENCUENTREN CON DISTRIBUCIONES DE PROBABILIDAD ASÍ

- LUEGO, PODEMOS DEFINIR LAS INTEGRALES:

$$\boxed{I_\alpha \equiv \int_0^{+\infty} x^\alpha e^{-ax^2}\,dx}$$

$$I_1 \equiv \int_0^{+\infty} x e^{-ax^2}\,dx \underset{\substack{u=x^2 \\ du=2x\,dx}}{=} \int_0^{+\infty} e^{-au}\frac{du}{2} = \frac{1}{2}\left.\frac{e^{-au}}{-a}\right|_0^{+\infty} = \frac{1}{2}\left[\frac{0}{-a} - \frac{1}{-a}\right] = \frac{1}{2a}$$

$$\Rightarrow I_1 \equiv \int_0^{+\infty} x e^{-ax^2}\,dx = \frac{1}{2a}$$

- POR LO CUAL, LOS RESULTADOS MÁS IMPORTANTES RESULTAN:

$$I_\alpha = \int_0^{+\infty} x^\alpha e^{-ax^2}\,dx, \qquad I_0 = \int_0^{+\infty} e^{-ax^2}\,dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}} \longleftarrow \text{INTEGRANDO PAR}$$

$$I_1 = \int_0^{+\infty} x e^{-ax^2}\,dx = \frac{1}{2a} \longleftarrow \text{INTEGRANDO IMPAR.}$$

- Observación: $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$, pero $\int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-ax^2}\,dx = 0$.

• ¿Y si necesito una integral I_α con α muy grande? Notemos que:

$$I_2 \equiv \int_0^{+\infty} \underbrace{x^2 e^{-ax^2}}_{=\frac{\partial}{\partial a}(-e^{-ax^2})} dx = -\frac{\partial}{\partial a} \underbrace{\int_0^{+\infty} e^{-ax^2} dx}_{\equiv I_0} = -\frac{\partial}{\partial a}\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}\right) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}}$$

$$I_3 \equiv \int_0^{+\infty} \underbrace{x^3 e^{-ax^2}}_{\frac{\partial}{\partial a}(-x e^{-ax^2})} dx = -\frac{\partial}{\partial a} \underbrace{\int_0^{+\infty} x e^{-ax^2} dx}_{\equiv I_1} = -\frac{\partial}{\partial a}\left(\frac{1}{2a}\right) = \frac{1}{2a^3}$$

Los miembros de la familia de integrales I_α pueden derivarse de I_0 (miembros pares) o de I_1 (miembros impares).

Se consigue la regla: $I_\alpha = -\frac{\partial}{\partial a} I_{\alpha-2}$, $\alpha \geq 2$

• Ecuación de Schrödinger:

Supongamos que tenemos un Hamiltoniano $\hat{H}$ con sus autofunciones $\phi(x)$ con autovalor E:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \quad , \quad \hat{H}\phi(\vec{x}) = E\phi(\vec{x})$$

Si pensamos a $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \xrightarrow{3D} \hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla} \Rightarrow \hat{p}^2 = -\hbar^2\nabla^2$

$$\Rightarrow \hat{H}\phi(\vec{x}) = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\vec{x})\right]\phi(\vec{x}) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\right]\phi(\vec{x})$$

$$= E\phi(x) \Longrightarrow \boxed{\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi(\vec{x}) + V(\vec{x})\phi(\vec{x}) = E\phi(\vec{x})} \quad (1)$$

Ecuación de Schrödinger para el caso estacionario

Si quiero obtener el caso general, podemos pensar una solución oscilante en el tiempo para las $\phi(x)$:

• $\psi(\vec{x},t) = \phi(\vec{x}).e^{-i\omega t}$, pero $\omega = \frac{E}{\hbar} \Rightarrow \psi(\vec{x},t) = \phi(\vec{x})\, e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$

Multiplicando por $e^{-i\omega t}$ a ambos lados en la expresión (1):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\underbrace{\phi(\vec{x})\,e^{-i\omega t}}_{\psi(x,t)} + V(\vec{x})\underbrace{\phi(\vec{x})\,e^{-i\omega t}}_{\psi(x,t)} = E\underbrace{\phi(\vec{x})\,e^{-i\omega t}}_{\psi(x,t)}$$ ②

$$\underbrace{E\,\psi(x,t)}_{= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)}$$

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

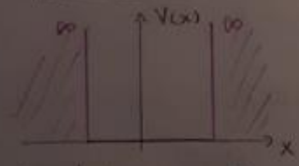
ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER MÁS GENERAL.

- ESTADOS ESTACIONARIOS: $\psi(\vec{x},t) = \phi(\vec{x})\,e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$
- OPERADOR HAMILTONIANO: $\hat{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \longrightarrow \hat{H}\psi(\vec{x},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t)$

POZOS DE POTENCIAL EN 1 DIMENSIÓN:

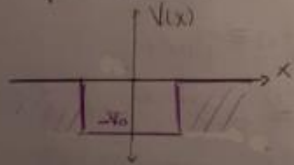
1) CONDICIONES DE CONTORNO:
   - LA FUNCIÓN DE ONDA $\phi(x)$ DEBE SER CONTINUA: $\lim_{x\to a^+}\phi(x) = \lim_{x\to a^-}\phi(x)$
   - LA FUNCIÓN DE ONDA $\phi(x)$ DEBE SER DERIVABLE: $\frac{\partial}{\partial x}\phi(x)\Big|_{x=a^+} = \frac{\partial}{\partial x}\phi(x)\Big|_{x=a^-}$
     (SALVO QUE TENGA UNA DISCONTINUIDAD INFINITA)
2) CONDICIÓN DE NORMALIZACIÓN:
   - LA FUNCIÓN DE ONDA $\phi(x)$ DEBE SER, CUANDO LO PERMITA, NORMALIZABLE.
3) EN BARRERAS DE POTENCIAL $V=\infty$, LA FUNCIÓN $\phi(x) = 0$.

pozo infinito:



(partícula en una caja)

pozo finito:

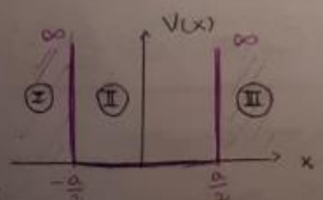


(núcleo atómico)

Barrera de potencial:

EJERCICIO 1

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| \le a/2 \\ \infty, & |x| > a/2 \end{cases}$$



a) Hallar autofunciones $\phi(x)$ y autoenergías E.

- Ⓘ $\phi_I(x) = 0$
- Ⓘⅈⅈ $\phi_{III}(x) = 0$

$\Big\} \to$ sólo me interesa estudiar la región Ⓘⅈ.

$$\phi(x) = \begin{cases} \phi_{II} & \text{en } |x| \le \frac{a}{2} \\ 0 & \text{en } |x| > a/2 \end{cases}$$

· Resolvemos ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi_{II} + 0\,\cancel{\phi_{II}} = E\phi_{II} \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi_{II}(x) = -\overbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}^{\equiv k^2}\phi_{II}(x)$$

↳ solución de cosenos y senos ($E>0$).

· Planteamos como función general: $\phi_{II}(x) = A.e^{ikx} + B.e^{-ikx}$

· Pedimos continuidad en empalmes:

$$\phi_{I}\left(\frac{-a}{2}\right) = \phi_{II}\left(\frac{-a}{2}\right) \Rightarrow 0 = Ae^{-ik\frac{a}{2}} + Be^{ik\frac{a}{2}} \Rightarrow B = -Ae^{-ika} \quad (2)$$

$$\phi_{III}\left(\frac{a}{2}\right) = \phi_{II}\left(\frac{a}{2}\right) \Rightarrow 0 = Ae^{ik\frac{a}{2}} + Be^{-ik\frac{a}{2}} \quad (3)$$

· Meto (2) en (3)

$$0 = Ae^{ik\frac{a}{2}} - Ae^{-ik\frac{3a}{2}} \Rightarrow 0 = Ae^{-ik\frac{a}{2}}\underbrace{\left(e^{ika} - e^{-ika}\right)}_{=2i\,\mathrm{sen}(ka)}$$

$$\Rightarrow 2iAe^{-ik\frac{a}{2}}\,\mathrm{sen}(ka) = 0 \Rightarrow \boxed{k_n = \frac{n\pi}{a}}$$

(k discretos)

· Por tanto, las energías quedan:

$$k_n^2 \equiv \frac{2mE_n}{\hbar^2} \Rightarrow \boxed{E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2}n^2} \longleftarrow$$

Energías que puede tomar la partícula.

¡Recupero De Broglie! ($n \geq 1$)

· ¿Cómo quedan las $\phi_{II}(x)$? $\phi_{II}(x) \equiv \phi_n(x)$

$$\phi_n(x) = Ae^{ik_nx} + Be^{-ik_nx} \overset{(2)}{=} Ae^{ik_nx} - Ae^{-ik_n(x+a)}$$

$$= Ae^{-i\frac{k_na}{2}}\underbrace{\left[e^{ik_n(x+\frac{a}{2})} - e^{-ik_n(x+\frac{a}{2})}\right]}_{=2i\,\mathrm{sen}(k_n(x+\frac{a}{2}))} = \underbrace{A2ie^{-i\frac{k_na}{2}}}_{\equiv C_n}\,\mathrm{sen}\left[k_n\left(x+\frac{a}{2}\right)\right]$$

$$= C_n\,\mathrm{sen}\left[n\pi\left(\frac{x}{a}+\frac{1}{2}\right)\right]$$

· Al pedir normalización:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*_{(x)}\phi_{(x)}\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty}|\phi_{(x)}|^2dx = \int_{-\infty}^{-a/2}\underbrace{|\phi_{I}(x)|^2}_{=0}dx + \int_{-a/2}^{a/2}|\phi_{II}(x)|^2dx + \int_{a/2}^{+\infty}\underbrace{|\phi_{III}(x)|^2}_{=0}dx$$

$$= \int_{-a/2}^{a/2}|C_n|^2\,\mathrm{sen}^2\left[n\pi\left(\frac{x}{a}+\frac{1}{2}\right)\right]dx \underset{\uparrow}{=} \frac{|C_n|^2}{2}\int_{-a/2}^{a/2}\left[1-\cos\left(2n\pi\left(\frac{x}{a}+\frac{1}{2}\right)\right)\right]dx \Rightarrow |C_n| = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$\mathrm{sen}^2(\alpha) = \frac{1}{2}\left[1-\cos(2\alpha)\right]$

③

. Por lo que nos queda:

$$\phi_{II}(x) \equiv \phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\, \text{sen}\left[n\pi\left(\frac{x}{a}+\frac{1}{2}\right)\right]$$

$$= \sqrt{\frac{2}{a}}\left[\text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\underbrace{\cos\left(\frac{n\pi}{2}\right)}_{\neq 0 \text{ si } n \text{ par}} + \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\underbrace{\text{sen}\left(\frac{n\pi}{2}\right)}_{\neq 0 \text{ si } n \text{ impar}}\right]$$

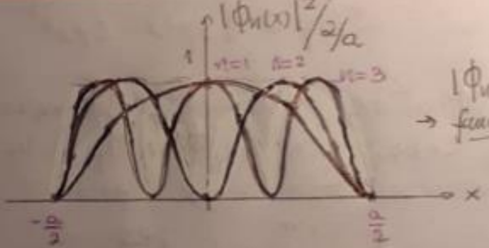
$$\Rightarrow \phi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\,\text{sen}\left(\frac{n\pi}{2}\right)\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) & \text{si } n \text{ impar} \leftarrow \text{FUNCIONES PARES} \\ \sqrt{\frac{2}{a}}\cos\left(\frac{n\pi}{2}\right)\text{sen}\left(\frac{n\pi}{a}x\right) & \text{si } n \text{ par} \leftarrow \text{FUNCIONES IMPARES} \end{cases}$$

└ (HAY UNA PARIDAD DEFINIDA)

. Observación: E sólo puede ser $E > 0$. En caso contrario, se encuentran con absurdos

b)

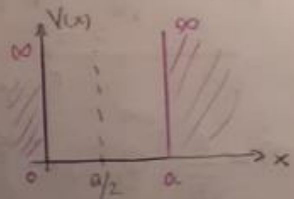
NOTA: SI EL POTENCIAL $V(x)$ ES SIMÉTRICO TAL QUE $V(x) = V(-x)$, ENTONCES LAS AUTOFUNCIONES $\phi(x)$ TIENEN PARIDAD DEFINIDA (SON FUNCIONES PARES O IMPARES) EN ESTADOS LIGADOS.



$|\phi_n(x)|^2$ resultan → funciones pares.

. NÚMERO DE NODOS DE ϕ_n = $n-1$

. Observación: Si tomamos el mismo problema pero visto desde otro sistema de referencia, las $\phi_n(x)$ ya no tienen paridad respecto al origen:



$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\text{sen}\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \leftarrow \text{PERO SON SIMÉTRICOS RESPECTO A } x = a/2.$$

└ A VECES, CONVIENE PLANTEAR UNA $\phi(x)$: $\phi(x) = Ae^{ik(x-\frac{a}{2})} + Be^{-ik(x-\frac{a}{2})}$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2}n^2$$

└ Son las mismas ϕ_n pero descriptas respecto a otro origen y con las mismas E_n → LA MISMA FÍSICA

c) Probabilidad de encontrar a la partícula en el intervalo $(0, a/4)$ para los estados $\phi_n(x)$:

$$P\left(0 \leq x \leq \frac{a}{4}\right) = \int_0^{a/4} |\phi_n(x)|^2 dx = \frac{2}{a} \int_0^{a/4} sen^2\left[n\pi\left(\frac{x}{a}+\frac{1}{2}\right)\right] dx$$

$$= \frac{1}{a} \int_0^{a/4} \left[1 - \cos\left(2n\pi\left(\frac{x}{a}+\frac{1}{2}\right)\right)\right] dx = \underline{\frac{1}{4} - \frac{1}{2\pi n} sen\left(\frac{3\pi n}{2}\right)}$$

$$\xrightarrow[n\to\infty]{} 1/4 \quad \text{(límite clásico)}$$

d) Recordar que, para calcular valores medios (en cuántica):

$$\underline{\langle \hat{\theta} \rangle = \int \psi^*(x)\, \hat{\theta}\, \psi(x)\, dx}$$

$$\langle x \rangle = \int_{-a/2}^{a/2} \phi_n^*(x) . x\, \phi_n(x)\, dx = \int_{-a/2}^{a/2} x . |\phi_n(x)|^2 dx = 0 \longleftarrow$$ integrando impar con intervalo simétrico

$$\underline{\langle p \rangle = 0} \quad , \quad \underline{\langle x^2 \rangle = \frac{a^2}{12} - \frac{a^2}{2\pi^2 n^2}} \quad , \quad \underline{\langle p^2 \rangle = \hbar^2 \frac{\pi^2}{a^2} n^2} \quad E_n = \frac{P_n^2}{2m}$$

y recordar que: $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$

$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$

e) SI $|\phi(x)|^2 dx$ REPRESENTA LA PROBABILIDAD DE QUE LA PARTÍCULA ESTÉ ENTRE x y $x+dx$, ENTONCES $|\varphi(p)|^2 dp$ ES LA PROBABILIDAD DE QUE LA PARTÍCULA TENGA MOMENTO ENTRE p y $p+dp$.

$$\underline{\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, \varphi(p)\, e^{i\frac{px}{\hbar}}} \quad , \quad \underline{\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \phi(x)\, e^{-i\frac{px}{\hbar}}}$$

TRANSFORMAMOS FOURIER

$$\varphi_n(p) = \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_n(x)\, e^{-i\frac{px}{\hbar}} dx = \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{-a/2}^{a/2} \sqrt{\frac{2}{a}}\, \underline{sen\left[n\pi\left(\frac{x}{a}+\frac{1}{2}\right)\right]}\, e^{-i\frac{px}{\hbar}} dx$$

RECORDAR: $sen(\alpha) = \frac{e^{i\alpha} - e^{-i\alpha}}{2i}$

$$= \ldots = \begin{cases} \frac{2in\sqrt{a\pi\hbar^3}}{a^2p^2 - \pi^2\hbar^2n^2} sen\left(\frac{ap}{2\hbar}\right) & \text{si } n \text{ par} \\ \frac{2n\sqrt{a\pi\hbar^3}}{a^2p^2 - \pi^2\hbar^2n^2} \cos\left(\frac{ap}{2\hbar}\right) & \text{si } n \text{ impar} \end{cases} \xrightarrow{n\to\infty} 0$$

Observación: Recuerden que se puede calcular:

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*_{(x)}\,\hat{p}\,\phi_{(x)}\,dx = -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*_{(x)}\frac{\partial}{\partial x}\phi_{(x)}\,dx \quad \text{ó} \quad \langle p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi^*_{(p)}\,p\,\varphi_{(p)}\,dp$$

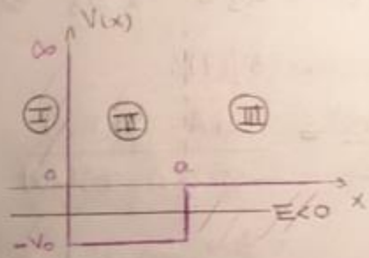
$$\langle p^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*_{(x)}\,\hat{p}^2\,\phi_{(x)}\,dx = -\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*_{(x)}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi_{(x)}\,dx \quad \text{ó} \quad \langle p^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi^*_{(p)}\,p^2\,\varphi_{(p)}\,dp$$

f) SABEMOS QUE, POR LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER GENERAL:

$$\psi_{(x,t)} = \phi_{(x)}\,e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \xrightarrow[\text{SE ESCRIBE COMO SUMA:}]{\text{COMO EXISTEN } \phi_n(x)} \psi_{(x,t)} = \sum_n A_n\,\phi_n(x)\,e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}$$

EJERCICIO 2

$$V(x) = \begin{cases} \infty & , \; x<0 \\ -V_0 & , \; 0<x<a \\ 0 & , \; x>a \end{cases}$$



- Sólo tiene sentido plantear $-V_0<E<0$ si $E<0$.

I $\phi_I(x) = 0 \rightarrow$ sólo me interesan regiones II y III. $\quad \phi(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x<0 \\ \phi_{II} & \text{si } 0<x<a \\ \phi_{III} & \text{si } x>a \end{cases}$

II $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi_{II}(x) - V_0\phi_{II}(x) = E\,\phi_{II}(x) \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi_{II}(x) = -\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}\overbrace{\left[V_0-|E|\right]}^{>0}}_{\equiv k^2}\phi_{II}(x)$$

$$\Rightarrow \phi_{II}(x) = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}$$

III $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi_{III}(x) - \cancel{0.\phi_{III}(x)} = E\,\phi_{III}(x) \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi_{III}(x) = -\underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{\equiv q^2}\phi_{III}(x)$$

$$\Rightarrow \phi_{III}(x) = \cancel{A_3 e^{qx}} + \tilde{B}_3 e^{-qx}$$

↳ como en $x\to\infty$, $\phi\to 0$ debemos pedir que $A_3=0$.

podemos acomodar esta expresión:

$$\phi_{III}(x) = \tilde{B}_3 e^{-qx} = B_3\cdot e^{qa}e^{-qx} = B_3 e^{-q(x-a)}$$

Pido condiciones de contorno:

· $\phi_{II}(0)=0 \Rightarrow A_2+B_2=0 \Rightarrow \boxed{A_2=-B_2}$ (4)

· $\phi_{II}(a)=\phi_{III}(a) \Rightarrow \boxed{A_2 e^{ika}+B_2 e^{-ika} = B_3}$ (5)

· $\frac{\partial}{\partial x}\phi_{II}\Big|_{x=a} = \frac{\partial}{\partial x}\phi_{III}\Big|_{x=a} \Rightarrow \boxed{ik\left[A_2e^{ika}-B_2e^{-ika}\right] = -qB_3}$ (6)

· Metiendo (4) en (6):

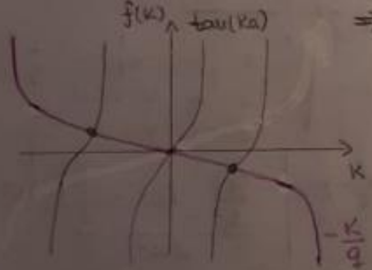
$ik\left[A_2e^{ika}+A_2e^{-ika}\right] = -qB_3 \Rightarrow \boxed{B_3 = -\frac{2ikA_2}{q}\cos(ka)}$ (7)

· Metiendo (4) en (5):

$A_2e^{ika}-A_2e^{-ika}=B_3 \Rightarrow \boxed{B_3 = 2i\,\mathrm{sen}(ka)A_2}$ (8)

· Haciendo (8)/(7):

$\frac{B_3}{B_3} = \frac{2iA_2\,\mathrm{sen}(ka)}{-2i\frac{k}{q}A_2\cos(ka)} \Rightarrow \tan(ka) = -\frac{k}{q}$



$\Rightarrow \boxed{\tan\left[\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-|E|)}\,a\right] = -\frac{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-|E|)}}{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|}}}$

↳ Ecuación para energías E (trascendente).

$\left(q^2 = \frac{2mV_0}{\hbar} - k^2\right)$

· Con esto, las ϕ_{II} y ϕ_{III} quedan:

: $\phi_{II}(x) = 2A_2\, i\,\mathrm{sen}(kx)$, $0<x<a$ ⟶ A_2 se haya normalizando.

: $\phi_{III}(x) = 2A_2\, i\,\mathrm{sen}(ka)\, e^{-q(x-a)}$, $x \geq a$

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty}|\phi(x)|^2dx = \underbrace{\int_{-\infty}^{0}|\phi_I(x)|^2dx}_{=0} + \int_0^a|\phi_{II}(x)|^2dx + \int_a^{+\infty}|\phi_{III}(x)|^2dx$$

$$= 4|A_2|^2\left[\int_0^a \mathrm{sen}^2(kx)\,dx + \mathrm{sen}^2(ka)\int_a^{+\infty}e^{-2q(x-a)}dx\right]$$

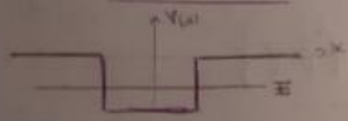
$$= 4|A_2|^2\left[\frac{a}{2}-\frac{\mathrm{sen}(2ak)}{4k}+\frac{\mathrm{sen}^2(ka)}{2q}\right] \Rightarrow \boxed{|A_2| = \frac{1}{2}\cdot\sqrt{\frac{1}{\frac{a}{2}-\frac{\mathrm{sen}(ka)}{4k}+\frac{\mathrm{sen}^2(ka)}{2q}}}}$$

· **Observación:** que $\phi_{III}(x) \neq 0$ indica que la partícula puede estar en la región clásicamente prohibida, y su probabilidad sería:

$$P(a<x) = \int_{a}^{+\infty} |\phi_{III}(x)|^2 \, dx$$

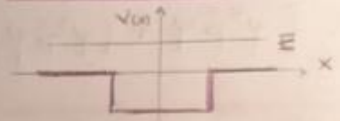
· **Comentario:** Una partícula, dependiendo su espectro de energía, puede clasificarse en dos tipo de estados:

Estados ligados



- E discreta
- Ondas confinadas.

Estados de scattering



- E continua.
- Ondas propagantes.

· Corriente de probabilidad:

· Teniéndose una función $\psi(x,t) \Rightarrow \rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2$ tal que $\int_{\forall \vec{x}} \rho(x,t)\, d^3x = 1$

· $\rho(x,t)$ no tiene por qué estar igualmente repartida en el espacio $\forall t$
↳ puede desplazarse.

· Partimos de la Ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi \xrightarrow{\text{multiplico por } \psi^*} \boxed{i\hbar \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\nabla^2\psi + \psi^* V \psi} \quad (9)$$

· Si conjugo a (9):

$$\boxed{-i\hbar \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi\nabla^2\psi^* + \psi V \psi^*} \quad (10)$$

← Ahora, restando (9)-(10):

$$i\hbar \underbrace{\left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\right]}_{= \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*\right] + \cancel{\psi^* V \psi} - \cancel{\psi V \psi^*}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi^* \nabla\cdot(\nabla\psi) - \psi\nabla\cdot(\nabla\psi^*)\right]$$

Identidad: $\lambda \nabla\cdot\vec{A} = \nabla\cdot(\lambda\vec{A}) - \vec{A}\cdot\nabla\lambda$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) - (\cancel{\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi - \nabla\psi\cdot\nabla\psi^*})\right]$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)$$

(análogo a F3)

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\overbrace{(\psi^*\psi)}^{\rho = |\psi|^2} = \overbrace{-\frac{\hbar}{2mi}\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)}^{= \nabla\cdot\vec{J}} \longrightarrow \boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\bar{\nabla}\cdot\bar{J}}$$

Ecuación de continuidad

DONDE: $\rho = |\psi|^2$ y $\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^* \nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)$ → CORRIENTE DE PROBABILIDAD

- ESTA ECUACIÓN INDICA UNA CONSERVACIÓN DE la probabilidad DONDE, TIEMPO A TIEMPO, LA DISTRIBUCIÓN $\rho(x,t)$ PUEDE IR CAMBIANDO y TENER UN flujo (ENTRANTE/SALIENTE) HACIA DONDE VA la probabilidad.
- EXISTE OTRA FORMA DE EXPRESAR A $\vec{J}$:

$$\vec{J} = \frac{-i\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) = \frac{1}{2m}\Big[\psi^*\overbrace{(-i\hbar\nabla)}^{=\hat{p}}\psi + \psi\overbrace{(i\hbar\nabla)}^{=\hat{p}^*}\psi^*\Big]$$

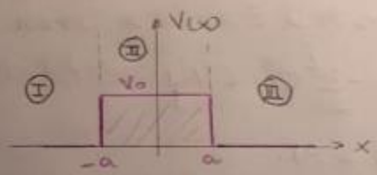
$$= \frac{1}{2m}\left[\psi^*\hat{p}\psi + (\psi^*\hat{p}\psi)^*\right] = \frac{1}{m}\,\mathrm{Re}\left[\psi^*\hat{p}\psi\right]$$

$$\boxed{\vec{J}(x,t) = \frac{1}{m}\,\mathrm{Re}\left[\psi^*(x,t)\,\hat{p}\,\psi(x,t)\right]}$$ ← ESTADÍSTICAMENTE, REPRESENTA EL flujo DE PARTÍCULAS.

- El flujo DE probabilidad al ATRAVESAR UNA DISCONTINUIDAD TIENE QUE SER CONTINUO YA QUE NO PUEDE QUEDAR "ATRAPADA" PROBABILIDAD EN LA DISCONTINUIDAD. Por lo cual, $\vec{J}$ DEBE SER CONTINUA ⇒ ψ y $\nabla\psi$ CONTINUAS. (CONDICIONES DE CONTORNO).

EJERCICIO 6

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & |x| \leq a \\ 0, & |x| > a \end{cases}$$



b) Vamos a analizar el caso donde $E > V_0$: (ESTADOS DE SCATTERING).

(I) $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi_I(x) + 0\,\cancel{\phi_I(x)} = E\phi_I(x) \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi_I(x) = -\overbrace{\frac{2m}{\hbar^2}E}^{\equiv k^2}\phi_I(x)$

$$\Rightarrow \phi_I(x) = A_1 e^{ik(x+a)} + B_1 e^{-ik(x+a)}$$

(II) $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi_{II}(x) + V_0\phi_{II}(x) = E\phi_{II}(x) \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi_{II}(x) = -\overbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}^{\equiv q^2}\phi_{II}(x)$

$$\Rightarrow \phi_{II}(x) = A_2 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx}$$

(III) $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi_{III}(x) + 0\cdot\phi_{III}(x) = E\phi_{III}(x) \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi_{III}(x) = -\overbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}^{k^2}\phi_{III}(x)$

$$\Rightarrow \phi_{III}(x) = A_3 e^{ik(x-a)} + B_3 e^{-ik(x-a)}$$

- Son todas ondas propagantes, y al ser estados de scattering **NO SON NORMALIZABLES**.
- Las ondas propagantes, según su argumento en la exponencial: e^{iKx}: $\rightsquigarrow \vec{K}$; e^{-iKx}: $\rightsquigarrow \overleftarrow{K}$
- Generalmente, se plantea que las partículas vienen desde $+\infty$ o de $-\infty$. En este caso, tomaremos que vienen desde $-\infty$, por lo que no va a haber onda reflejada en la región III ($B_3 \Rightarrow 0$).

$$\begin{cases} \phi_{I}(x) = A_1 e^{iK(x+a)} + B_1 e^{-iK(x+a)} & , \quad x < -a \\ \phi_{II}(x) = A_2 e^{iKx} + B_2 e^{-iKx} & , \quad -a < x < a \\ \phi_{III}(x) = A_3 e^{iK(x-a)} & , \quad x > a \end{cases}$$

- Tenemos 6 incógnitas: $A_1, B_1, A_2, B_2, A_3, E$ pero 4 condiciones de contorno (continuidad de ϕ y su derivada en $x = \pm a$) ya que la normalización no la tenemos. La E será continua (estado de scattering) y una constante (A_3) quedará libre.

. Condiciones de contorno:

$$\phi_{I}(-a) = \phi_{II}(-a) \Rightarrow \boxed{A_1 + B_1 = A_2 e^{-iqa} + B_2 e^{iqa}} \quad (11)$$

$$\phi_{II}(a) = \phi_{III}(a) \Rightarrow \boxed{A_2 e^{iqa} + B_2 e^{-iqa} = A_3} \quad (12)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\phi_{I}(-a) = \frac{\partial}{\partial x}\phi_{II}(a) \Rightarrow \boxed{\cancel{i}K(A_1 - B_1) = \cancel{i}q\left(A_2 e^{-iqa} - B_2 e^{iqa}\right)} \quad (13)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\phi_{II}(a) = \frac{\partial}{\partial x}\phi_{III}(a) \Rightarrow \boxed{iq_2\left(A_2 e^{iqa} - B_2 e^{-iqa}\right) = iKA_3} \quad (14)$$

. Si pongo (11) en (13), puedo sacar:

$$\boxed{B_2 = \frac{1}{2} e^{-iqa}\left[B_1\left(1 + \frac{K}{q}\right) + A_1\left(1 - \frac{K}{q}\right)\right]} \quad (15) \qquad y \qquad \boxed{A_2 = \frac{1}{2} e^{iqa}\left[A_1\left(1 + \frac{K}{q}\right) + B_1\left(1 - \frac{K}{q}\right)\right]} \quad (16)$$

. Haciendo (12)/(14) y poniendo (15),(16):

$$\boxed{A_1 = \left[\frac{Kq}{q^2 - K^2}\,\frac{2}{i}\,\frac{\cos(2qa)}{\operatorname{sen}(2qa)} - \frac{q^2 + K^2}{q^2 - K^2}\right] B_1} \quad (17)$$

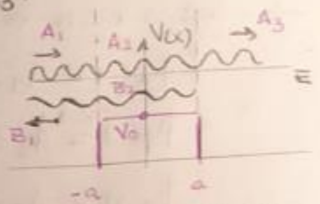
. Poniendo (15),(16) en (12), y luego usando (17):

$$\boxed{B_1 = i\,\frac{q^2 - K^2}{2Kq}\,\operatorname{sen}(2qa)\,A_3} \quad (18)$$

• Si uso (18) en (17):

$$\boxed{A_1 = \left[\cos(2qa) - i\,\frac{q^2+k^2}{2qk}\,\mathrm{sen}(2qa)\right] A_3} \quad (19)$$

y poniendo (19),(18) en (15),(16) obtengo B_2, A_2 en función de A_3.



• A todo esto, nos piden los coeficientes de transmisión (T) y reflexión (R). Los mismos se definen como:

$$\left[R \equiv \frac{\text{flujo de partículas reflejadas}}{\text{flujo de partículas incidentes}} = \frac{|\vec{J}_r|}{|\vec{J}_i|} \right]$$

$$\left[T \equiv \frac{\text{flujo de partículas transmitidas}}{\text{flujo de partículas incidentes}} = \frac{|\vec{J}_t|}{|\vec{J}_i|} \right]$$

$$\phi_I(x) = \underbrace{A_1 e^{ik(x+a)}}_{\phi_i} + \underbrace{B_1 e^{-ik(x+a)}}_{\phi_r}$$

$$\phi_{III}(x) = \underbrace{A_3 e^{ik(x-a)}}_{\phi_t}$$

$$\vec{J}_i = \frac{1}{m}\mathrm{Re}\left[\phi_i^* \hat{p}\,\phi_i\right] = \frac{1}{m}\mathrm{Re}\left[A_1^* e^{-ik(x+a)}(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x}\left(A_1 e^{ik(x+a)}\right)\right]\hat{x}$$

$$= \frac{1}{m}\mathrm{Re}\left[|A_1|^2 \hbar k\right]\hat{x} = \underline{|A_1|^2 \frac{\hbar k}{m}}\,\hat{x}$$

$$\vec{J}_r = \frac{1}{m}\mathrm{Re}\left[\phi_r^* \hat{p}\,\phi_r\right] = \frac{1}{m}\mathrm{Re}\left[B_1^* e^{ik(x+a)}(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x}\left(B_1 e^{-ik(x+a)}\right)\right]\hat{x}$$

$$= \frac{1}{m}\mathrm{Re}\left[|B_1|^2 \hbar k\right]\hat{x} = \underline{|B_1|^2 \frac{\hbar k}{m}}\,\hat{x}$$

$$\vec{J}_t = \frac{1}{m}\mathrm{Re}\left[\phi_t^* \hat{p}\,\phi_t\right] = \frac{1}{m}\mathrm{Re}\left[A_3^* e^{-ik(x-a)}(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x}\left(A_3 e^{ik(x-a)}\right)\right]\hat{x}$$

$$= \frac{1}{m}\mathrm{Re}\left[|A_3|^2 \hbar k\right] = \underline{|A_3|^2 \frac{\hbar k}{m}}\,\hat{x}$$

Entonces:

$$R = \frac{\cancel{\frac{\hbar k}{m}}|B_1|^2}{\cancel{\frac{\hbar k}{m}}|A_1|^2} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} \Rightarrow \boxed{R = \frac{(k^2-q^2)^2\,\mathrm{sen}^2(2qa)}{4k^2q^2 + (k^2-q^2)^2\,\mathrm{sen}^2(2qa)}}$$

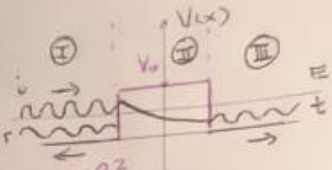
$$T = \frac{\cancel{\frac{\hbar k}{m}}|A_3|^2}{\cancel{\frac{\hbar k}{m}}|A_1|^2} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} \Rightarrow \boxed{T = \frac{4k^2q^2}{4k^2q^2 + (k^2-q^2)^2\,\mathrm{sen}^2(2qa)}}$$

$R+T=1$

Las partículas pasan o rebotan, no quedan "atrapadas".

• Clásicamente, al ser $E > V_0$, se esperaría que $R=0$ y $T=1$. Eso se recupera cuando $E >> V_0$ ($k^2 \approx q^2$).

a) Para el caso $E<V_0$ ¿Hay que plantear todo desde cero? ¡No! (7)



- Seguimos teniendo estados de scattering, pero lo que cambia es la $\phi_{II}(x)$ debido a que es una exponencial real.

(II)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi_{II}(x) + V_0\,\phi_{II}(x) = E\,\phi_{II}(x) \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi_{II}(x) = \underbrace{-\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)}_{=q^2}\phi_{II}(x)$$

$$\Rightarrow \phi_{II}(x) = A_2 e^{qx} + B_2 e^{-qx}$$

- Es decir, del caso anterior solo hace falta cambiar $q \to -iq$:

$$R = \frac{\left(k^2-(-iq)^2\right)^2 \cdot \text{sen}^2(-2iqa)}{4k^2(-iq)^2 + (k^2-(-iq)^2)^2 \cdot \text{sen}^2(-2iqa)} \Rightarrow \boxed{R = \frac{(k^2+q^2)^2\,\text{senh}^2(2qa)}{(k^2+q^2)^2\,\text{senh}^2(2qa)+4k^2q^2}}$$

$\{\text{sen}(ix) = i\,\text{senh}(x)\}$

$$T = \frac{4k^2(-iq)^2}{4k^2(-iq)^2 + (k^2-(-iq)^2)^2\,\text{sen}^2(-2iqa)} \Rightarrow \boxed{T = \frac{4k^2q^2}{(k^2+q^2)^2\,\text{senh}^2(2qa)+4k^2q^2}}$$

(EFECTO TÚNEL)

- Comentario: Clásicamente, al ser $E<V_0$, se esperaría que $R=1$ y $T=0$. Eso se recupera cuando $E \ll V_0$.

- **Atención**: Al calcular R y T, no siempre queda el cociente de amplitudes. Esto solo ocurre porque la región (I) y (III) tienen el mismo potencial; de no ser así, los 'k' no se simplificarían y quedaría un factor de proporcionalidad.