

If I think back on the state of atomic theory in those months, I always remember a mountain walk with some friends from the Youth Movement, probably in the late autumn of 1924. It took us from Kreuth to Lake Achen. In the valley the weather was poor, and the mountains were veiled in clouds. During the climb, the mist had begun to close in upon us, and, after a time, we found ourselves in a confused jumble of rocks and undergrowth with no signs of a track. We decided to keep climbing, though we felt rather anxious about getting down again if anything went wrong. All at once the mist became so dense that we lost sight of one another completely, and could keep in touch only by shouting. At the same time it grew brighter overhead, and the light suddenly changed color. We were obviously under a patch of moving fog. Then, quite suddenly, we could see the edge of a steep rock face, straight ahead

of us, bathed in bright sunlight. The next moment the fog had closed up again, but we had seen enough to take our bearings from the map. After a further ten minutes of hard climbing we were standing in the sun-at saddle height above the sea of fog. To the south we could see the peaks of the Sonnwend Mountains and beyond them the snowy tops of the Central Alps, and we all breathed a sigh of relief.

In atomic physics, likewise, the winter of 1924-1925 had obviously brought us to a realm where the fog was thick but where some light had begun to filter through and held out the promise of exciting new vistas.

In the summer term of 1925, when I resumed my research work at the University of Göttingen—since July 1924 I had been Privatdozent at that university—I made a first attempt to guess what formulae would enable one to express the line intensities of the hydrogen spectrum, using more or less the same methods that had proved so fruitful in my work with Kramers in Copenhagen. This attempt led to a dead end—I found myself in an impenetrable morass of complicated mathematical equations, with no way out. But the work helped to convince me of one thing: that one ought to ignore the problem of electron orbits inside the atom, and treat the frequencies and amplitudes associated with the line intensities as perfectly good substitutes. In any case, these

magnitudes could be observed directly, and as my friend Otto had pointed out when expounding on Einstein's theory during our bicycle tour round Lake Walchensee, physicists must consider none but observable magnitudes when trying to solve the atomic puzzle. My attempt to apply this scheme to the hydrogen atom had come to grief on the complications of this particular problem. Accordingly, I looked for a simpler mathematical system and found it in the pendulum, whose oscillations could serve as a model for the molecular vibrations treated by atomic physics. My work along these lines was advanced rather than retarded by an unfortunate personal setback.

Toward the end of May 1925, I fell so ill with hay fever that I had to ask Born for fourteen days' leave of absence. I made straight for Heligoland, where I hoped to recover quickly in the bracing sea air, far from blossoms and meadows. On my arrival I must have looked quite a sight with my swollen face; in any case, my landlady took one look at me, concluded that I had been in a fight and promised to nurse me through the aftereffects. My room was on the second floor, and since the house was built high up on the southern edge of the rocky island, I had a glorious view over the village, and the dunes and the sea beyond. As I sat on my balcony, I had ample opportunity to reflect on Bohr's remark that part of infinity seems to lie within the grasp of those who look across the sea.

Apart from daily walks and long swims, there was nothing in Heligoland to distract me from my problem, and so I made much swifter progress than I would have done in Gottingen. A few days were enough to jettison all the mathematical ballast that invariably encumbers the beginning of such attempts, and to arrive at a simple formulation of my problem. Within a few days more, it had become clear to me what precisely had to take the place of the Bohr-Sommerfeld quantum conditions in an atomic physics working with none but observable magnitudes. It also became obvious that with this additional assumption I had introduced a crucial restriction into the theory. Then I noticed that there was no guarantee that the new mathematical scheme could be put into operation without contradictions. In particular, it was completely uncertain whether the principle of the conservation of energy would still apply, and I knew only too well that my scheme stood or fell by that principle.

Other than that, however, several calculations showed that the scheme seemed quite self-consistent. Hence I concentrated on demonstrating that the conservation law held, and one evening I reached the point where I was ready to determine the individual terms in the energy table, or, as we put it today, in the energy matrix, by what would now be considered an extremely clumsy series of calculations. When the first terms seemed to accord with the energy principle, I became rather excited, and I began to make countless arithmetical errors. As a result, it was almost three o'clock in the morning before the final result of my computations lay before me. The energy principle had held for all the terms, and I could no longer doubt the mathematical consistency and coherence of the kind of quantum mechanics to which my calculations pointed. At first, I was deeply alarmed. I had the feeling that, through the surface of atomic phenomena, I was looking at a strangely beautiful interior, and felt almost giddy at

the thought that I now had to probe this wealth of mathematical structures nature had so generously spread out before me. I was far too excited to sleep, and so, as a new day dawned, I made for the southern tip of the island, where I had been longing to climb a rock jutting out into the sea. I now did so without too much trouble, and waited for the sun to rise.

WERNER HEISENBERG, 'LA PARTE Y EL TODO'

Heisenberg(1925) desarrolló la *Mecánica de Matrices*.

Schroedinger(1926) descubrió la *Mecánica Ondulatoria*.

La mecánica ondulatoria desarrolla la idea de de Broglie para encontrar el comportamiento ondulatorio de una partícula en presencia de un potencial $V(x)$

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)\right)\psi = E\psi, \text{ ecuación de Schroedinger}$$

\hat{p} es el (operador) momentum y E es la energía. ψ es la *función de onda* de la partícula. La solución de esta ecuación determina los estados estacionarios del sistema, que corresponden a los valores de E en la ecuación de Schroedinger.

La onda de materia es una *onda de probabilidad*. El cuadrado de la función de onda es proporcional a la probabilidad de encontrar a la partícula en el entorno de x .

- Principio de Correspondencia(Dirac): $\{A, B\}$ satisface las mismas propiedades algebraicas que el conmutador $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

$$\{A, B\} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right)$$

1. $\{A, B\} = -\{B, A\}$

2. $\{A, b_1 B_1 + b_2 B_2\} = b_1 \{A, B_1\} + b_2 \{A, B_2\}, b_1, b_2 \in C$

3. $\{A, BC\} = \{A, B\}C + B\{A, C\}$

4. $\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0$, Identidad de Jacobi

- Ejercicio: Mostrar que $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ satisface las propiedades 1, ...4.
- Paso a Mecánica Cuántica: Los observables clásicos $A(x, p)$ son promovidos a operadores lineales $\hat{A}(\hat{x}, \hat{p})$ actuando sobre un espacio de Hilbert $V, +, \cdot$.
- Además $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = i\hbar\{A, B\}$
- Un espacio vectorial $V, +, \cdot$ sobre C es un espacio de Hilbert si está provisto de un producto interior $\langle a|b \rangle$ y es completo en la distancia inducida por el producto interior.

- Un producto interior sobre V se define por las propiedades siguientes:

1. $\langle a|b \rangle = \langle b|a \rangle^*$

2. $\langle a|\beta_1 b_1 + \beta_2 b_2 \rangle = \beta_1 \langle a|b_1 \rangle + \beta_2 \langle a|b_2 \rangle$

3. $\langle a|a \rangle \geq 0$, $\langle a|a \rangle = 0$ si y sólo si $a = 0$.

- Coordenadas cartesianas $\{x_i, p_j\} = \delta_{ij}$
- $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ Reglas de conmutación canónicas.
- Representación de Schroedinger: $\hat{x}_i = x_i, \hat{p}_j = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}$
- Ejercicio: Mostrar que los operadores de la representación de Schroedinger satisfacen las reglas de conmutación canónicas.

- $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$
- Schrödinger: $\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$, $\hat{x}_i = x_i$, $\hat{p}_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}$
- $i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, t) + V(x) \psi(x, t)$, Ecuación de Schrödinger. $\psi(x, t)$ es la función de onda.
- Interpretación de la función de onda.

1. $i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, t) + V(x) \psi(x, t)$, por ψ^*

2. $-i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, t)^* + V(x) \psi(x, t)^*$, por ψ

3. $\frac{\partial}{\partial t}(\psi(x, t)^* \psi(x, t)) = i\frac{\hbar}{2m} \nabla(\psi(x, t)^* \nabla \psi(x, t) - \psi(x, t) \nabla \psi(x, t)^*)$

Ecuación de continuidad. Expresa la conservación de $P(x, t) = \psi(x, t)^* \psi(x, t)$

4. $\int_V d^3x \psi(x, t)^* \psi(x, t)$ es la probabilidad que la partícula esté en el volumen V .

5. $\int_{\infty} d^3x \psi(x, t)^* \psi(x, t) = 1$. Condición de normalización.

6. $\vec{j}(x, t) = -i\frac{\hbar}{2m}(\psi(x, t)^* \nabla \psi(x, t) - \psi(x, t) \nabla \psi(x, t)^*)$. Corriente de flujo de probabilidad.

- $i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, t) + V(x) \psi(x, t)$
- $\psi(x, t) = \psi(x) u(t)$
- $i\hbar \frac{\partial u(t)}{\partial t} \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x) u(t) + V(x) \psi(x) u(t), / u(t) \psi(x)$
- $i\hbar \frac{\partial u(t)}{\partial t} u^{-1} = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi(x)^{-1} \nabla^2 \psi(x) + V(x)$ El lado izquierdo de esta ecuación sólo depende de t y el derecho sólo de \vec{x} . Por lo tanto, ambos son la misma constante.
- $i\hbar \frac{\partial u(t)}{\partial t} u^{-1} = E, u = e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$, E es la energía de la partícula.
- $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$, Ecuación de Schrodinger independiente del tiempo. Su solución determina los valores posibles de la energía E .

En una dimensión, tenemos las siguientes condiciones.

1. $\psi(x)$ debe existir y satisfacer la ecuación de Schrodinger.
2. $\psi(x)$ y $\frac{d\psi(x)}{dx}$ deben ser continuas.
3. $\psi(x)$ y $\frac{d\psi(x)}{dx}$ deben ser finitas.
4. $\psi(x)$ y $\frac{d\psi(x)}{dx}$ deben ser univaluadas.
5. $\psi(x)$ debe ser normalizable. Esto es: $\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x)^* \psi(x) < \infty$

Para relacionar el cálculo de la mecánica cuántica a algo que se pueda observar en el laboratorio, se calcula el "valor esperado" de los parámetros medibles. Para la posición x , el valor esperado se define como

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) x \psi(x)$$

Esta integral puede interpretarse como el valor medio de x , que se esperaría obtener a partir de un gran número de mediciones. Alternativamente, podría verse como el valor medio de posición para un gran número de partículas, que están descritas mediante la misma función de onda. Por ejemplo, el valor esperado del radio del electrón en el estado fundamental del átomo de hidrógeno, es el valor medio que se espera obtener al realizar la medición sobre un gran número de átomos de hidrógeno.

Mientras que el valor esperado de una función de posición, tiene la apariencia de un promedio de la función, el valor esperado del momento implica la representación del momento como un operador de la mecánica cuántica.

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x)$$

donde $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

es el operador de la componente x del momento.

En general, el valor esperado de cualquier cantidad observable, se halla poniendo el operador mecánico-cuántico de ese observable, en la integral de la función de onda sobre el espacio:

$$\bar{Q} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \hat{Q} \psi(x), \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \psi(x) = 1$$

- $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi, \Psi_p(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}px}, E = \frac{p^2}{2m}, p$ es el momentum de la partícula. Toma cualquier valor real.

- Normalización espectro continuo: $\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_p(x)^* \Psi_q(x) = \delta(p - q)$

$$A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{\frac{i}{\hbar}(q-p)x} = \delta(p - q), A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

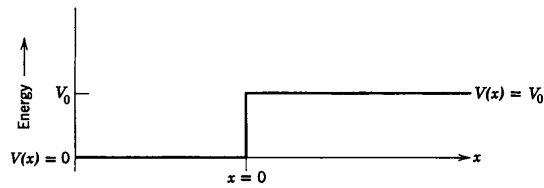


Figura 1.

$$E < V_0$$

$$1. -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi, \Psi = A_1 e^{\frac{i}{\hbar} p x} + B_1 e^{-\frac{i}{\hbar} p x}, p = \sqrt{2mE}$$

$$2. -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = (E - V_0)\Psi, \Psi = A_2 e^{-\frac{1}{\hbar} q x} + B_2 e^{\frac{1}{\hbar} q x}, q = \sqrt{2m(V_0 - E)} \psi(+\infty) = 0, B_2 = 0.$$

Continuidad de la función y su primera derivada en el borde.

$$A_1 + B_1 = A_2, \quad \frac{i}{\hbar} p A_1 - \frac{i}{\hbar} p B_1 = -\frac{1}{\hbar} q A_2$$

$$B_1 = A_2 - A_1 \quad p A_1 - p A_2 + p A_1 = i q A_2 \quad A_1 = \frac{p + i q}{2p} A_2$$

$$B_1 = \frac{p - i q}{2p} A_2$$

$$\begin{aligned}
 S &= -i\frac{\hbar}{2m}(\psi(x, t)^*\partial_x\psi(x, t) - \psi(x, t)\partial_x\psi(x, t)^*) = \frac{p}{2m}\left(A_1^*e^{-\frac{i}{\hbar}px} + B_1^*e^{\frac{i}{\hbar}px}\right)\left(A_1e^{\frac{i}{\hbar}px} - \right. \\
 & \left. B_1e^{-\frac{i}{\hbar}px}\right) = \frac{p}{2m}\left(|A_1|^2 - A_1^*B_1e^{-2\frac{i}{\hbar}px} + B_1^*A_1e^{2\frac{i}{\hbar}p} - |B_1|^2 + \text{cc}\right) = \frac{p}{m}(|A_1|^2 - |B_1|^2)
 \end{aligned}$$

$S = \frac{p}{m}(|A_1|^2 - |B_1|^2)$, el primer término corresponde a un flujo en la dirección positiva de x , el otro es flujo hacia la parte negativa de x . Esto es $\frac{p}{m}(|A_1|^2)$:flujo de la onda incidente sobre la barrera de potencial; $\frac{p}{m}(|B_1|^2)$:flujo de la onda reflejada.

Calculemos el cociente entre la intensidad de probabilidad incidente y lo reflejado:

$$R = \frac{\frac{p}{m}(|B_1|^2)}{\frac{p}{m}(|A_1|^2)} = \frac{\frac{|p - iq|^2}{4p^2}|A_2|^2}{\left|\frac{p + iq}{2p}A_2\right|^2} = 1$$

La partícula tiene probabilidad 1 de ser reflejada.

Notar que la partícula tiene probabilidad no nula de cruzar la barrera de potencial, lo que está prohibido clásicamente.

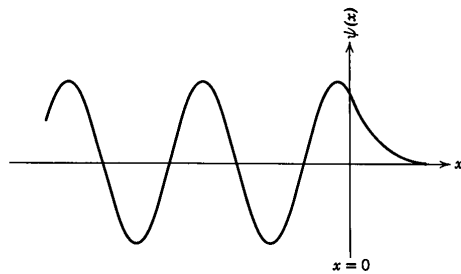
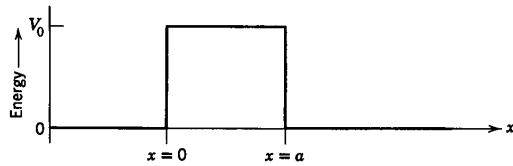


Figura 2.

$$E > V_0$$

Ejercicio: Encontrar la solución para $E > V_0$



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

Figura 3.

$$E < V_0$$

$$1. -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi, \Psi = A_1 e^{\frac{i}{\hbar} p x} + B_1 e^{-\frac{i}{\hbar} p x}, p = \sqrt{2mE}$$

$$2. -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = (E - V_0)\Psi, \Psi = A_2 e^{-\frac{1}{\hbar} q x} + B_2 e^{\frac{1}{\hbar} q x}, q = \sqrt{2m(V_0 - E)}$$

$$3. -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi, \Psi = A_3 e^{\frac{i}{\hbar} p x}, p = \sqrt{2mE}$$

Continuidad de la función y su primera derivada en los bordes.

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 + B_2, & \frac{i}{\hbar} p A_1 - \frac{i}{\hbar} p B_1 &= -\frac{1}{\hbar} q A_2 + \frac{1}{\hbar} q B_2 \\ A_2 e^{-\frac{1}{\hbar} q a} + B_2 e^{\frac{1}{\hbar} q a} &= A_3 e^{\frac{i}{\hbar} p a} & -\frac{1}{\hbar} q A_2 e^{-\frac{1}{\hbar} q a} + \frac{1}{\hbar} q B_2 e^{\frac{1}{\hbar} q a} &= \frac{i}{\hbar} p A_3 e^{\frac{i}{\hbar} p a} \end{aligned}$$

$$A_1 = \frac{i e^{-\frac{a q}{h}} \left(q^2 \left(e^{\frac{2 a q}{h} + \frac{i a p}{h}} - e^{\frac{i a p}{h}} \right) A_3 + p^2 \left(e^{\frac{i a p}{h}} - e^{\frac{2 a q}{h} + \frac{i a p}{h}} \right) A_3 + i p q \left(-2 e^{\frac{2 a q}{h} + \frac{i a p}{h}} \right) \right)}{4 p q}$$

$$\begin{aligned} T^{-1} &= \frac{|A_1|^2}{|A_3|^2} = \frac{e^{-\frac{2 a q}{h}}}{16 p^2 q^2} \left| q^2 \left(e^{\frac{2 a q}{h}} - 1 \right) + p^2 \left(1 - e^{\frac{2 a q}{h}} \right) + i p q \left(-2 e^{\frac{2 a q}{h}} - 2 \right) \right|^2 = \\ &= \frac{e^{-\frac{2 a q}{h}}}{16 p^2 q^2} \left(\left(q^2 \left(e^{\frac{2 a q}{h}} - 1 \right) + p^2 \left(1 - e^{\frac{2 a q}{h}} \right) \right)^2 + \left(p q \left(-2 e^{\frac{2 a q}{h}} - 2 \right) \right)^2 \right) = \\ &= \frac{1}{16 p^2 q^2} \left(\left(q^2 \left(2 \sinh \left(\frac{a q}{h} \right) \right) - p^2 2 \sinh \left(\frac{a q}{h} \right) \right)^2 + \left(2 p q \left(2 \cosh \left(\frac{a q}{h} \right) \right) \right)^2 \right) = \\ &= \frac{1}{4 p^2 q^2} \left(\{ (q^2 - p^2)^2 + 4 p^2 q^2 \} \sinh^2 \left(\frac{a q}{h} \right) + 4 p^2 q^2 \right) = \\ &= 1 + \sinh^2 \left(\frac{a q}{h} \right) \left(\frac{q^2 + p^2}{2 p q} \right)^2 \end{aligned}$$

$$q^2 + p^2 = 2 m V_0 \quad p q = 2 m \sqrt{E(V_0 - E)} \quad \frac{q^2 + p^2}{2 p q} = \frac{V_0}{2 \sqrt{E(V_0 - E)}} = \frac{1}{2 \sqrt{\frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right)}}$$

Coficiente de transmisión. $T = \left[1 + \frac{\sinh^2 \left(\frac{a q}{h} \right)}{4 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right)} \right]^{-1}$

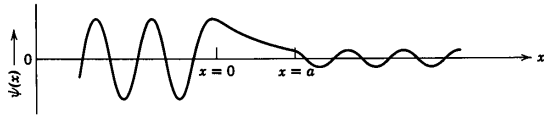


Figura 4. $\text{Re}\psi$

Si $\frac{a q}{h} \gg 1$

$$T = \left[1 + \frac{\sinh^2\left(\frac{a q}{h}\right)}{4 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right)} \right]^{-1} \simeq \left[1 + \frac{\exp\left(\frac{2 a q}{h}\right)}{16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right)} \right]^{-1} \simeq 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-\frac{2 a q}{h}}$$

Efecto túnel La partícula tiene una probabilidad no nula de atravesar la barrera, lo que está prohibido clásicamente.

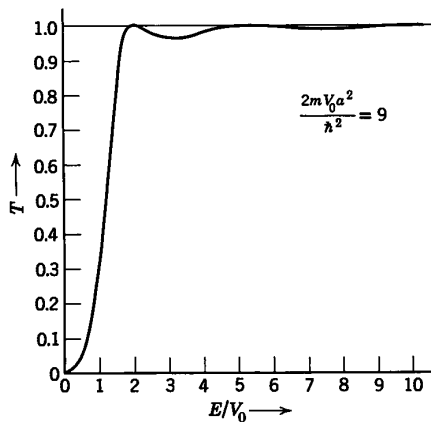


Figura 5. Coeficiente de transmisión para una barrera de potencial.

La figura 5 grafica el coeficiente de transmisión para un electrón incidente sobre una barrera de potencial con $V_0 = 10\text{eV}$ y grosor $a = 1.85 \times 10^{-8}\text{cm}$. $\frac{2mV_0a}{\hbar^2} = 9$.

T es cercano a 1 para $E \sim V_0$.

$$E > 0$$

Ejercicio: Muestre que: $T = \left[1 + \frac{\text{sen}^2\left(\frac{a q}{h}\right)}{4\frac{E}{V_0}\left(-1 + \frac{E}{V_0}\right)} \right]^{-1}$, $q = \sqrt{2m(-V_0 + E)}$

Para $E > V_0$, en general $T < 1$ porque hay reflexión de la onda en $x = 0$

Sin embargo, para $\frac{a q}{h} = n\pi$, $T = 1$. La partícula no se refleja. Esto se debe a interferencia destructiva entre las reflexiones en $x = 0, a$. Está relacionado con el efecto Ramsauer.

El **efecto Ramsauer-Townsend**, también llamado **efecto Ramsauer** o **efecto Townsend**, es un fenómeno físico que involucra **dispersión** de electrones de baja energía por átomos de un **gas noble**.

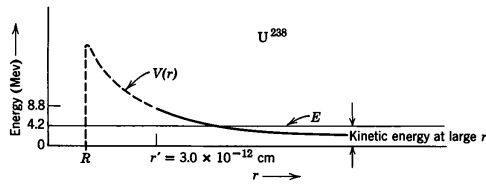


Figura 6. Potencial electrostático de un núcleo

- $T = 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-\frac{2}{\hbar} \int dr \sqrt{2m(V(r)-E)}} \sim d e^{-\frac{2}{\hbar} \int dr \sqrt{2m(V(r)-E)}}, \frac{2}{\hbar} \int dr \sqrt{2m(V(r)-E)} \gg 1$, d varía lentamente comparado con la exponencial.
- Descomponemos el intervalo $0, r$ en trozos de tamaño dr . En cada trozo el potencial se puede considerar constante. La probabilidad de atravesar toda la barrera iguala al producto de las probabilidades de atravesar cada trozo:
- $T = d e^{-\frac{2}{\hbar} \int dr \sqrt{2m(V(r)-E)}}$ Probabilidad de que en un intento, la partícula cruce la barrera.
- Un tratamiento riguroso (WKB), coincide con este resultado para $T \ll 1$, lo que es cierto para partículas α .
- Suponemos que la partícula α se mueve libremente dentro de la barrera. El número de intentos por unidad de tiempo es $n = \frac{v}{2R}$. R es el radio del núcleo, v es la velocidad de la partícula α .
- La probabilidad por unidad de tiempo de que salga del núcleo es

$$\lambda \simeq \frac{v}{2R} e^{-\frac{2}{\hbar} \int dr \sqrt{2m(V(r)-E)}}$$

En 1928 Gamow, Conroy y Gurney aplicaron este resultado para estimar la vida media de los núcleos.

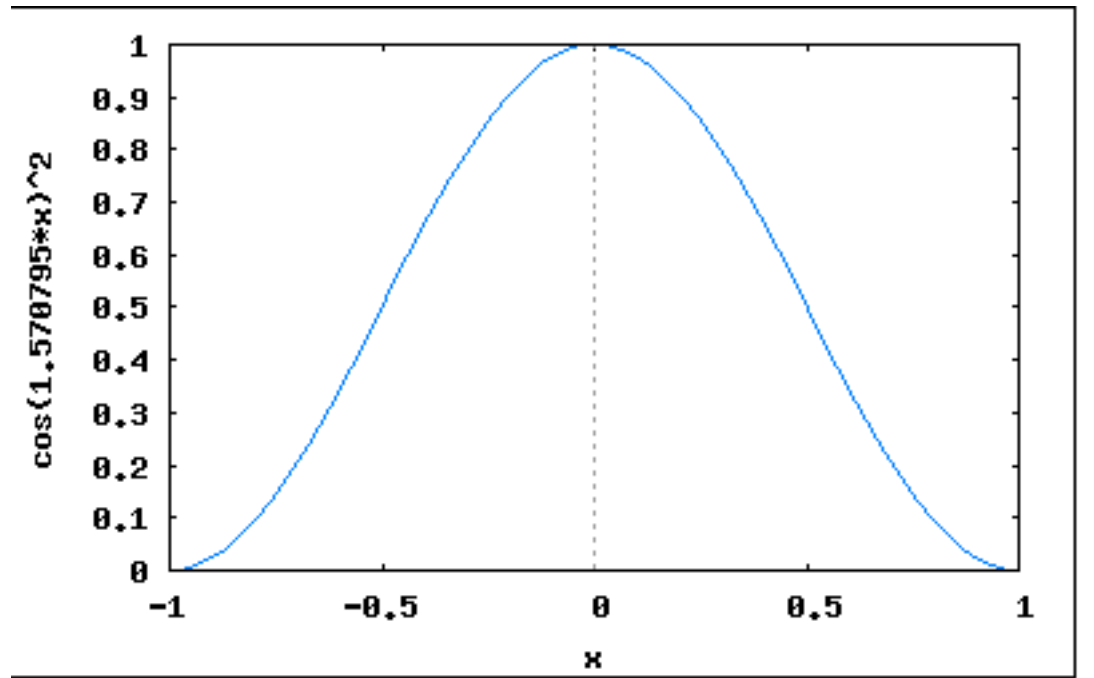
- $R \simeq 9 \times 10^{-13} \text{cm}$, $v = \sqrt{\frac{2E}{m}}$, $V(r) = \frac{kZe^2}{r}$
- Para U^{238} $\lambda = 5 \times 10^{-18} \text{s}^{-1}$
- Para Po^{212} $\lambda = 2 \times 10^6 \text{s}^{-1}$
- La diferencia se debe mayormente a la energía E de la partícula α emitida.
- Z , R no cambian significativamente en la zona de la Tabla Periódica donde están los elementos radioactivos.

Es un extraordinario éxito de la Mecánica Cuántica.

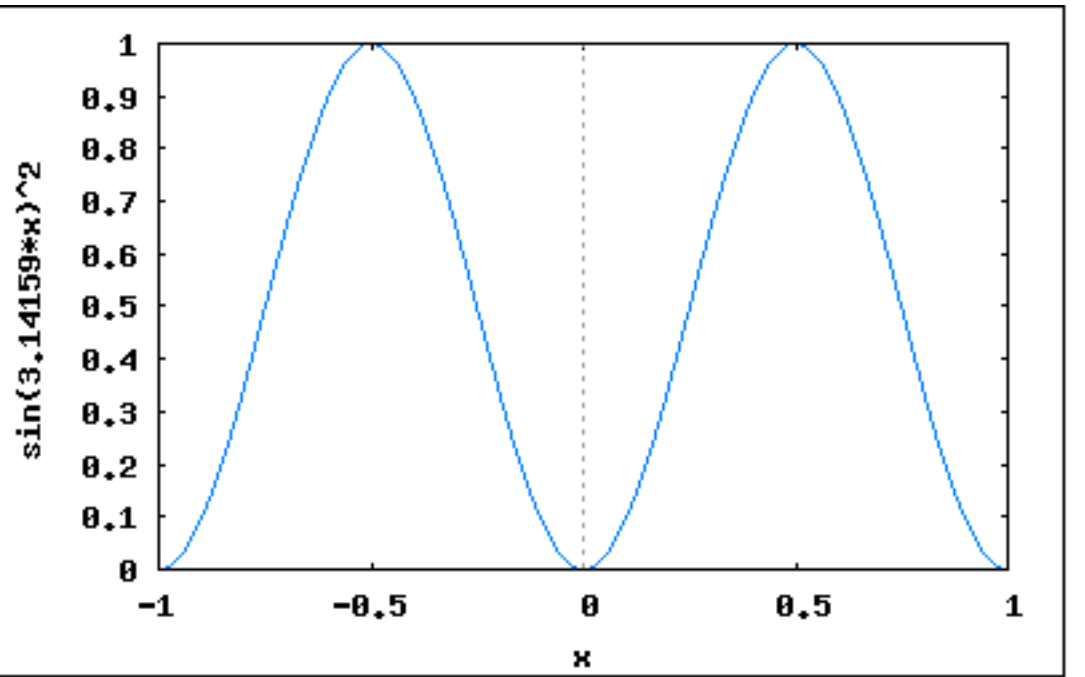
Partícula libre en una caja

La energía de una partícula libre en una caja de lado $2a$ está dada por

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{8ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$



$a = 2, n = 1$ Vemos que la partícula tiene mayor probabilidad de encontrarse en el centro de la caja.



$a = 2, n = 2$ La partícula se encontrará con igual probabilidad en el primer cuarto y en en tercer cuarto de la caja.

$$V(x) = 0, |x| < a, \quad V(x) = \infty, |x| > a$$

$$H = \frac{p^2}{2m}$$

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

$$\Psi(x) = A \operatorname{sen}(\omega(x+a))$$

$$\operatorname{sen}(2\omega a) = 0$$

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$$

$$\int_{-a}^a dx |\Psi(x)|^2 = 1$$

$$A^2 \int_{-a}^a dx \operatorname{sen}(\omega(x+a))^2 =$$

$$\cos(2\alpha) = \cos^2\alpha - \operatorname{sen}^2\alpha = 1 - 2\operatorname{sen}^2\alpha$$

$$\frac{A^2}{\omega} \int_0^{n\pi} du \operatorname{sen}(u)^2 = \frac{A^2}{\omega} \int_0^{n\pi} du \frac{1 - \cos(2u)}{2} =$$

$$A = \sqrt{\frac{2\omega}{n\pi}} = \frac{1}{\sqrt{a}}$$

$$\Psi(\pm a) = 0$$

$$\omega = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$2\omega a = n\pi, n = 1, 2, \dots$$

$$n = 1, 2, \dots$$

condición de normalización

$$\frac{A^2}{\omega} \int_0^{n\pi} du \operatorname{sen}(u)^2, \quad u = \omega(x+a)$$

$$\frac{A^2}{\omega} \left(\frac{n\pi}{2} \right) = 1$$

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \text{sen}(\omega_n(x + a))$$

- $\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \text{sen}(\omega(x + a)) = \frac{1}{\sqrt{a}} (\text{sen}(\omega x) \cos(\omega a) + \cos(\omega x) \text{sen}(\omega a)), \omega a = n \frac{\pi}{2}$
- $\Psi_{2m}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \text{sen}(\omega x) (-1)^m, n = 2m. n \text{ par. La funci3n de onda es impar.}$
- $\Psi_{2m+1}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos(\omega x) (-1)^m, n = 2m + 1. n \text{ impar. La funci3n de onda es par.}$

Ejercicio: Muestre que $\int_{-a}^a dx \Psi_n^*(x) \Psi_m(x) = 0, n \neq m.$

OPERADOR DE PARIDAD: $P\psi(x) = \psi(-x), P^2 = 1.$ Sus autovalores son $\pm 1.$

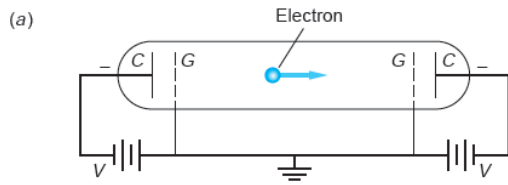


Figura 7. El electrón situado entre los dos grid G no experimenta fuerza. Pero en la zona entre los cátodos C y los grid G experimenta una fuerza que crece con el voltaje entre C y G.



Figura 8.

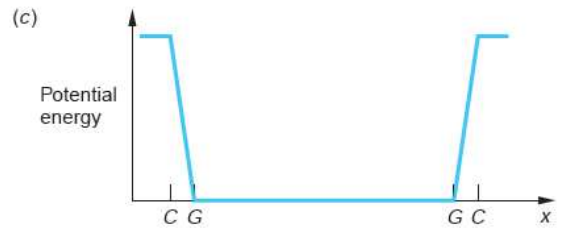


Figura 9.

El pozo de potencial cuadrado

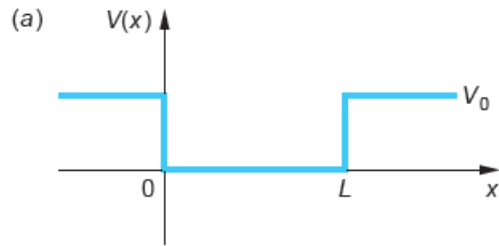


Figura 10.

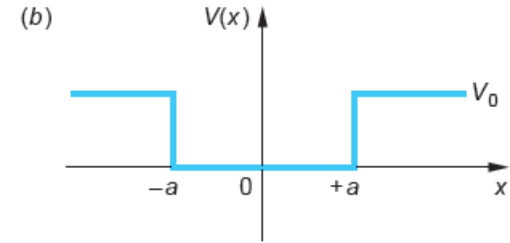


Figura 11.

1. $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) = E\psi(x), \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\psi(x)$
2. $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x)$
3. $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\psi(x)$

$$E < V_0$$

$$1. \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\psi(x), \omega = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(-E + V_0)}, \psi_1(x) = A_1e^{-\omega x} + B_1e^{\omega x}, \psi(-\infty) = 0, A_1 = 0.$$

$$2. \psi_2(x) = A_2e^{i\omega_0 x} + B_2e^{-i\omega_0 x}, \omega_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$$

$$3. \psi_3(x) = A_3e^{-\omega x} + B_3e^{\omega x}, \psi(+\infty) = 0, B_3 = 0.$$

Continuidad de la función y su primera derivada en los bordes.

$$\begin{aligned} B_1 &= A_2 + B_2, & \omega B_1 &= i\omega_0 A_2 - i\omega_0 B_2 \\ A_3 e^{-\omega L} &= A_2 e^{i\omega_0 L} + B_2 e^{-i\omega_0 L}, & -\omega A_3 e^{-\omega L} &= i\omega_0 A_2 e^{i\omega_0 L} - i\omega_0 B_2 e^{-i\omega_0 L} \end{aligned}$$

$$S = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 & 0 \\ -\omega & i\omega_0 & -i\omega_0 & 0 \\ 0 & e^{i\omega_0 L} & e^{-i\omega_0 L} & -e^{-\omega L} \\ 0 & i\omega_0 e^{i\omega_0 L} & -i\omega_0 e^{-i\omega_0 L} & \omega e^{-\omega L} \end{pmatrix}, \det(S) = 0$$

$$\det(S) = ((\omega_0^2 - 2i\omega\omega_0 - \omega^2) e^{2i\omega_0 L} - \omega_0^2 - 2i\omega\omega_0 + \omega^2) e^{-i\omega_0 L - \omega L} = 0$$

$$(\omega_0^2 - 2i\omega\omega_0 - \omega^2) e^{2i\omega_0 L} - \omega_0^2 - 2i\omega\omega_0 + \omega^2 = 0$$

$$\omega^2 = -\omega_0^2 + \frac{2m}{\hbar^2}V_0, (\omega_0 - i\omega)^2 e^{2i\omega_0 L} = (\omega_0 + i\omega)^2$$

$$e^{2i\omega_0 L} = \frac{(\omega_0 + i\omega)^2}{(\omega_0 - i\omega)^2} = \exp\left(4i \operatorname{arctg} \frac{\omega}{\omega_0}\right)$$

$$\omega_0 L + \pi n = 2 \operatorname{arctg} \frac{\omega}{\omega_0} \quad \operatorname{tg}\left(\frac{\omega_0 L}{2} + \frac{\pi}{2} n\right) = \frac{\omega}{\omega_0}$$

$$\varepsilon = \frac{\omega_0 L}{2} \quad \varepsilon \operatorname{tg}\left(\varepsilon + \frac{\pi}{2} n\right) = \frac{\omega L}{2} = \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2} V_0 L^2 - \varepsilon^2}$$

1. $n = 0, \varepsilon \operatorname{tg}(\varepsilon) = \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2} V_0 L^2 - \varepsilon^2}$, Autofunciones de primera clase

2. $n = 1, -\varepsilon \operatorname{ctg}(\varepsilon) = \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2} V_0 L^2 - \varepsilon^2}$, Autofunciones de segunda clase

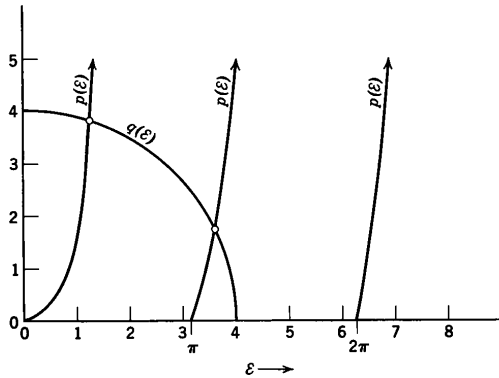


Figura 12. Solución gráfica caso 1

$$\varepsilon \operatorname{tg}(\varepsilon) = p(\varepsilon), \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2} V_0 L^2 - \varepsilon^2} = q(\varepsilon)$$

$\sqrt{\frac{m}{2\hbar^2}V_0L^2} = 4$ se muestra en la fig. 6.

Hay dos soluciones $\varepsilon \simeq 1.25, 3.60$

$$E = \varepsilon^2 \frac{2\hbar^2}{mL^2V_0} V_0$$

$$E(\varepsilon = 1.25) = 0.098V_0$$

$$E(\varepsilon = 3.60) = 0.81V_0$$

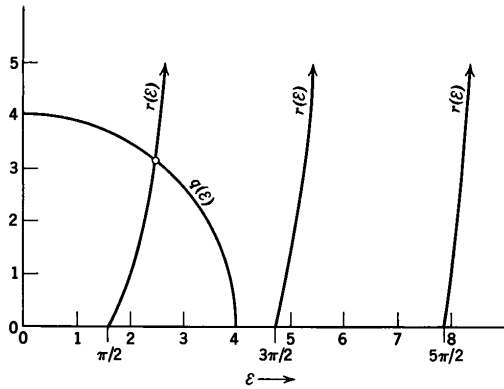


Figura 13. Caso 2

$$r(\varepsilon) = -\varepsilon \operatorname{ctg}(\varepsilon)$$

- $E < V_0$, espectro discreto.
- $E > V_0$, espectro continuo, ondas viajeras. 6 incógnitas, 4 condiciones. E no queda determinado.

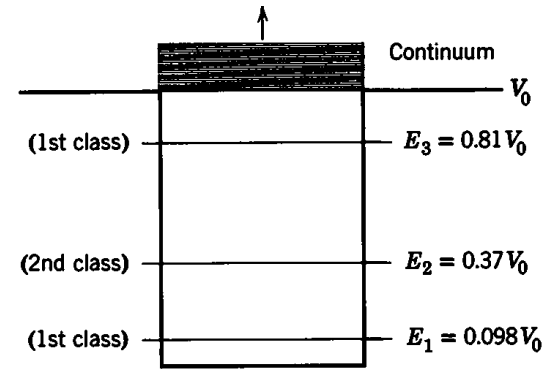


Figura 14. Espectro de energía para el pozo

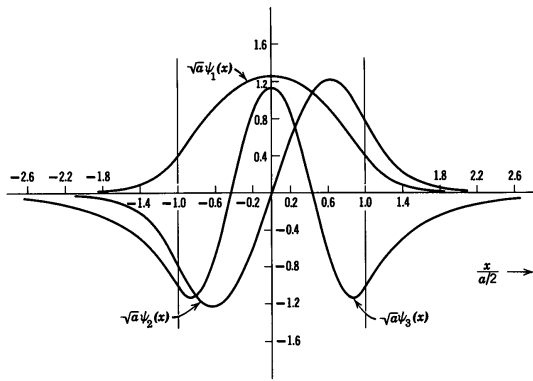


Figura 15. Autofunciones del pozo.

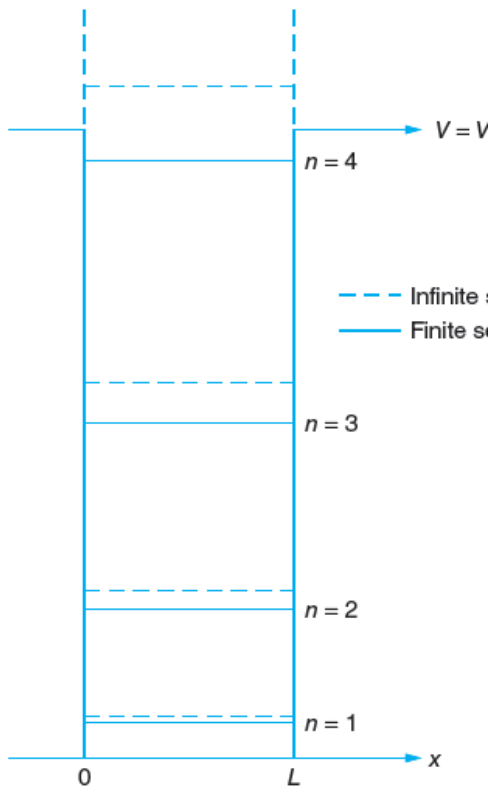


Figura 16.

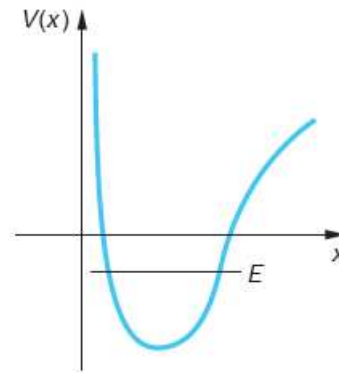


Figura 17.

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{i}{m\omega} p \right), \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{i}{m\omega} p \right),$$

$$H = \frac{1}{2}(a a^\dagger + a^\dagger a).$$

$$[a, a^\dagger] = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1.$$

El Hamiltoniano es positivo definido, así que el espectro está acotado por debajo. Elijamos el vacío por $a|0\rangle = 0$, $a^\dagger a|n\rangle = n|n\rangle$, $a^\dagger a a^\dagger|n\rangle = a^\dagger|n\rangle + n a^\dagger|n\rangle = (n+1)a^\dagger|n\rangle$

- Comenzando con $|0\rangle$, construimos el espectro, $|n\rangle = A_n (a^\dagger)^n |0\rangle$, $E_n = h\nu(n + \frac{1}{2})$
- Note que para $n=0$, $E_0 = \frac{1}{2}h\nu > 0$, energía del vacío \rightarrow Efecto Casimir.
- Usando las reglas de conmutación se encuentra: $A_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}$.

- $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x), \psi(\pm\infty) = 0.$

- $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + (\beta - \alpha^2 x^2)\psi(x) = 0, \beta = \frac{2mE}{\hbar^2}, \alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$

- $t = \sqrt{\alpha}x, \frac{d^2\psi(t)}{dt^2} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - t^2\right)\psi(t) = 0$

- $t \sim \infty, \frac{d^2\psi(t)}{dt^2} + (-t^2)\psi(t) = 0, \psi(t) \sim e^{\pm\frac{1}{2}t^2}.$

D: $\dot{\psi}(t) = \pm t e^{\pm\frac{1}{2}t^2}, \ddot{\psi}(t) = t^2 e^{\pm\frac{1}{2}t^2} \pm e^{\pm\frac{1}{2}t^2} \sim t^2 e^{\pm\frac{1}{2}t^2}$

- Por la condición de borde debe ser $\psi(t) \sim e^{-\frac{1}{2}t^2}.$

- Postular: $\psi(t) = e^{-\frac{1}{2}t^2} H(t), \ddot{H}(t) - 2t\dot{H} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - 1\right)H = 0,$ Ecuación de Hermite.

- Solución en serie: $H = \sum_{n=0}^{\infty} a_n t^n,$

- Se obtiene la relación de recurrencia $a_{n+2} = -\frac{\frac{\beta}{\alpha} - 1 - 2n}{(n+1)(n+2)} a_n$ y a_0, a_1 son arbitrarios.

- $\frac{a_{n+2}}{a_n} \sim_{n \rightarrow \infty} \frac{2}{n},$ esto es $H \sim_{t \rightarrow \infty} e^{t^2}, \sum_n \frac{1}{n!} t^{2n}, a_{2n} = \frac{1}{n!}, \frac{a_{n+2}}{a_n} = \frac{(\frac{n}{2})!}{(\frac{n}{2}+1)!} \sim_{n \rightarrow \infty} \frac{2}{n}$

- Para satisfacer la condición de borde, la serie debe terminar, debe ser un polinomio.

- $\frac{\beta}{\alpha} - 1 - 2n = 0,$ para $n = 0, 1, 2, \dots$

- $\frac{2mE}{\hbar^2} \frac{\hbar}{m\omega} = 2n + 1, E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$

$H_n(x)$ son los polinomios de Hermite.

Los polinomios de Hermite se definen como:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2/2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2/2}$$

Ortogonalidad

H_n es un polinomio de grado n , con $n=0, 1, 2, 3, \dots$. Estos polinomios son ortogonales con respecto de la función peso (medida) $e^{-x^2/2}$

es decir

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) H_m(x) e^{-x^2/2} dx = n! \sqrt{2\pi} \delta_{nm}$$

Los primeros seis polinomios de Hermite son los siguientes.

$$H_0(x) = 1, H_1(x) = 2x, H_2(x) = 4x^2 - 2, H_3(x) = 8x^3 - 12x, H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$$

$$H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x$$

Todos los polinomios de Hermite de orden $n > 2$ se pueden expresar en términos de los dos primeros polinomios $H_0(x)$ y $H_1(x)$, de orden cero y uno respectivamente, mediante la siguiente relación de recurrencia.

$$H_n(x) = 2x H_{n-1}(x) - 2(n-1) H_{n-2}(x)$$

La función de onda normalizada del oscilador armónico es: $\psi_n(t) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\frac{1}{2}t^2} H_n(t)$

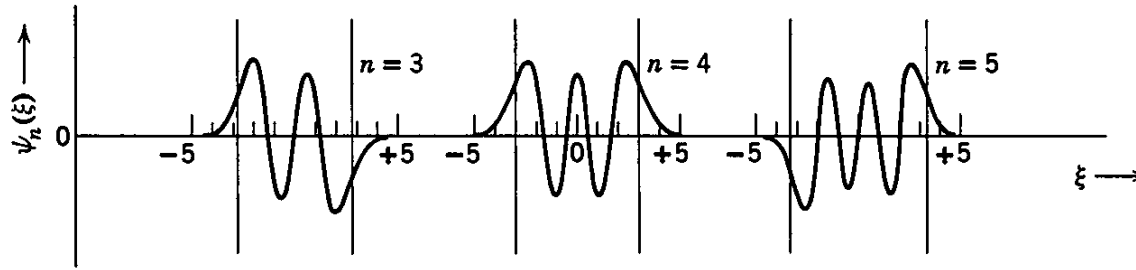
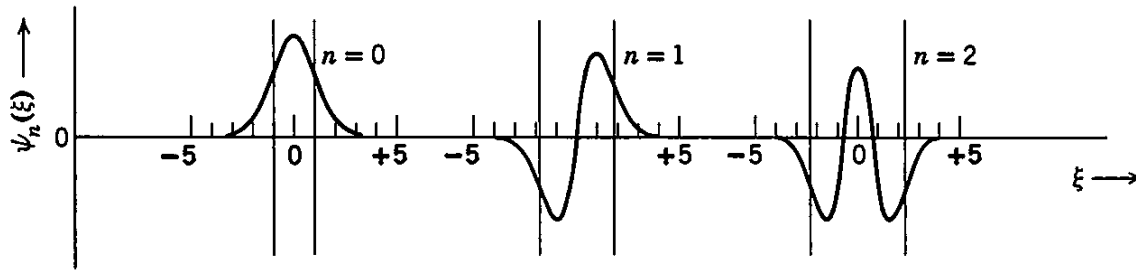


Figura 18. $\psi_n(\xi)$

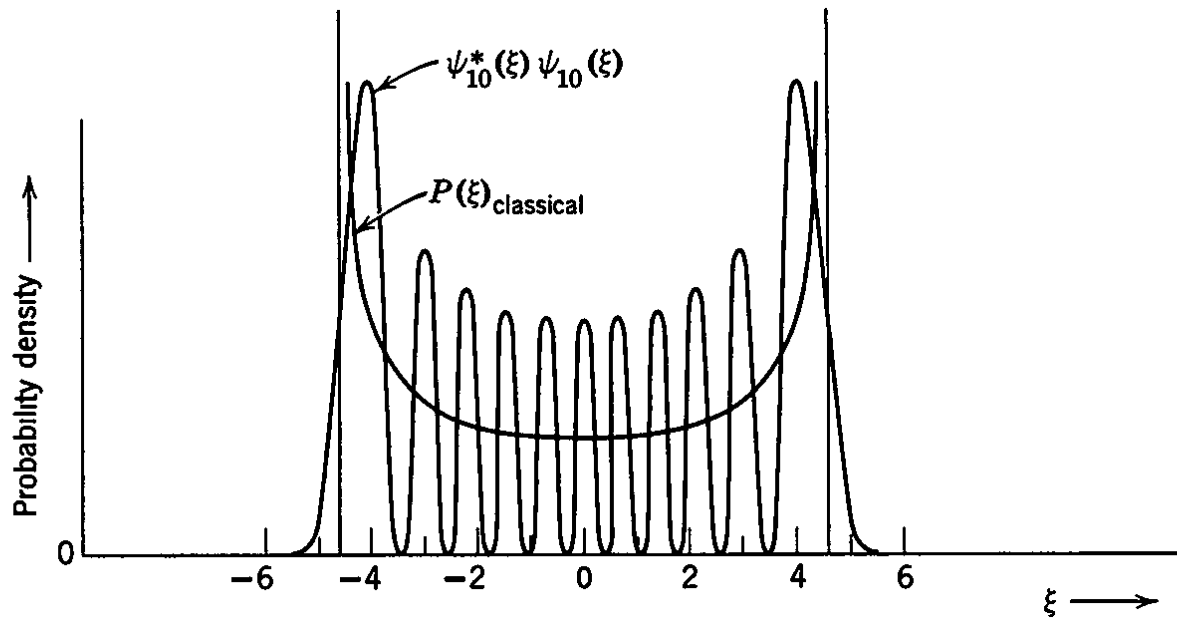


Figura 19. Paso al límite clásico para un oscilador.

Clásicamente la velocidad de la partícula se anula para la amplitud máxima. Por lo tanto la partícula está la mayoría del tiempo cerca de los extremos de la zona permitida clásicamente.

1. Muestre que $\langle \hat{K} \rangle_0 = \frac{1}{4} \hbar \omega$, $K = \frac{p^2}{2m}$, $\langle \rangle_0$ es el promedio en el nivel fundamental, $n = 0$.
2. $\langle \hat{V} \rangle_0 = \frac{1}{4} \hbar \omega$, $V = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$