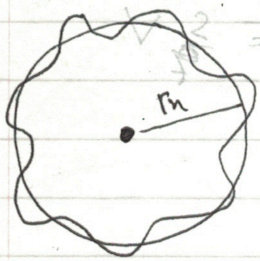
Regla de cuantización de Bohr-Sommerfeld



$$\boxed{\oint \frac{dq}{\lambda(q)} = n}\ , \quad n \in \mathbb{N} \qquad (1)$$

Condición para q' la onda interfiera constructivamente consigo misma

Se puede re-expresar como: $\boxed{\oint p(q)\,dq = nh}$ (2)

$dq = v\,dt$

$p = mv$

$$\oint p\,dq = \oint mv^2\,dt = 2\oint T\,dt = 2\tau\langle T\rangle = nh$$

Si el potencial es del tipo $V(q) = A q^s$

$\Rightarrow \langle T\rangle = \frac{s}{s+2} E$ ← energía total ⟶ Demostración como ejercicio

$\Rightarrow 2\tau \frac{s}{s+2} E = nh \Rightarrow \boxed{E_n = h\nu\left(\frac{s+2}{2s}\right)n}$ (3)

↳ puede ser función de E_n

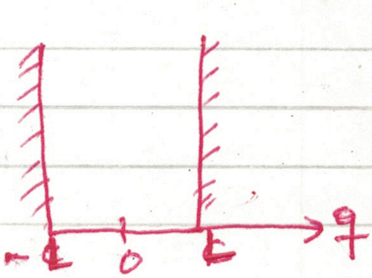
$(\nu \equiv 1/\tau)$

(i) Oscilador armónico: $V(q) = \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 \Rightarrow s = 2$

$\Rightarrow \boxed{E_n = n h\nu}$ (igual que Planck)

(ii) partícula en pozo-infinito.

$$V(q) = \begin{cases} 0 & |q| < c \\ \infty & |q| > c \end{cases} = \lim_{m\to\infty} \left(\frac{q}{c}\right)^m$$



En este caso, $s = m$, con $m \to \infty$

$$\tau = \frac{1}{\nu_E} = \frac{4L}{v} = 4L\sqrt{\frac{m}{2E}}$$ (este es un ejemplo de $\nu = \nu(E)$)

$$\Rightarrow E_n = h\nu_E\left(\frac{m'+2}{2m'}\right)n \xrightarrow[m'\to\infty]{} \frac{h\nu_E n}{2} = \frac{hn}{8L}\sqrt{\frac{2E_n}{m}}$$

$$\Rightarrow \boxed{E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\cdot n^2}$$

Teo. del Virial: $E = T + V \Rightarrow E = \langle T\rangle + \langle V\rangle$

Si $V = Aq^s \Rightarrow q\frac{\partial V}{\partial q} = sV \Rightarrow \boxed{\langle q\frac{\partial V}{\partial q}\rangle = s\langle V(q)\rangle}$

Luego, $\langle q\frac{\partial V}{\partial q}\rangle = \frac{1}{\tau}\oint q\frac{\partial V}{\partial q}dt \overset{\text{Newton}}{=} -\frac{m}{\tau}\oint q\frac{dv}{\cancel{dt}}\cancel{dt} =$

$$= -\frac{1}{\tau}\oint q\,dp \overset{PP}{=} \frac{1}{\tau}\oint p\,dq = \frac{1}{\tau}\oint mv^2dt = 2\langle T\rangle$$

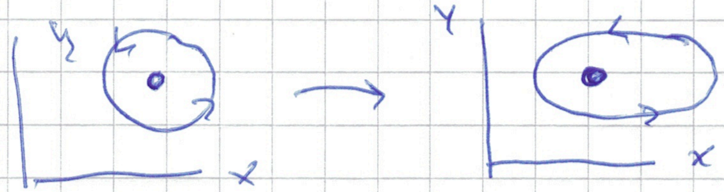
$$\Rightarrow s\langle V\rangle = 2\langle T\rangle \Rightarrow \langle V\rangle = (2/s)\langle T\rangle$$

$$E = \langle T\rangle + \frac{2}{s}\langle T\rangle = \left(\frac{s+2}{s}\right)\langle T\rangle$$

$$\boxed{\langle T\rangle = \left(\frac{s}{s+2}\right)E}$$

A. Sommerfeld: considera órbitas elípticas.

Átomo de H:



$$V(r) = -\frac{e^2 Z^2}{r} \quad (\text{o sea, } s = -1)$$

$$s = -1 \Rightarrow \langle T \rangle = -E \qquad (1)$$

$$T = \frac{1}{2} m \dot{r}^2 + \frac{1}{2} m r^2 \dot{\theta}^2 = T_r + T_\theta$$

$$\langle T_\theta \rangle = \left\langle \frac{1}{2} m r^2 \dot{\theta}^2 \right\rangle = \left\langle m r^2 \dot{\theta} \cdot \frac{1}{2} \dot{\theta} \right\rangle = \frac{L}{2} \langle \dot{\theta} \rangle = \frac{\hbar l}{2} \langle \dot{\theta} \rangle$$

pero $\langle \dot{\theta} \rangle = 2\pi \nu_E$ $\Rightarrow \langle T_\theta \rangle = \frac{\hbar l}{2} \cdot 2\pi \nu_e = \boxed{\frac{h l \nu_E}{2}}$

and $\langle T_r \rangle = \frac{n h}{2\tau} = \boxed{\frac{n h \nu_E}{2}}$

$$\Rightarrow E = -\langle T \rangle = -\frac{h \nu_E}{2} (n + l) \equiv -\frac{h \nu_E}{2} N$$

Kepler: $\tau^2 = \frac{m \pi^2}{2 Z e^2} R^3$, and $E = -\frac{Z e^2}{R}$

$$\Rightarrow E^2 = \frac{h^2 N^2}{4 \tau^2} = \frac{h^2 N^2}{4} \cdot \frac{2 Z e^2}{m \pi^2 R^3} = \frac{h^2 N^2 Z e^2}{2 \pi^2 m} \cdot \frac{E^3}{Z^3 e^6}$$

$$\Rightarrow 1 = \frac{N^2 h^2 E}{(Ze^2)^2 2\pi^2 m} \Rightarrow \boxed{E_{n\ell} = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{(n+\ell)^2}}$$

Una partícula no-relativista de masa m es mantenida en órbita circular alrededor del origen por una fuerza $f(r) = -kr$, donde k es una constante positiva.
(a) Demuestre que la energía potencial se puede escribir como

$$U(r) = kr^2/2$$

Asumiendo $U(r) = 0$ cuando $r = 0$.
(b) Asumiendo la cuantización de Bohr del momento angular de la partícula, muestre que el radio de la órbita de la partícula y su velocidad v pueden ser escritos como

$$v^2 = \left(\frac{n\hbar}{m}\right)\left(\frac{k}{m}\right)^{1/2} \qquad r^2 = \left(\frac{n\hbar}{k}\right)\left(\frac{k}{m}\right)^{1/2}$$

donde n es un entero.
(c) Por lo tanto, demuestre que la energía total de la partícula es

$$E_n = n\hbar\left(\frac{k}{m}\right)^{1/2}$$

(d) Si $m = 3 \times 10^{-26}$ kg y $k = 1180Nm^{-1}$, determine numericamente la longuitud de onda del fotón en nm que causará una transición entre niveles sucesivos de energía.

$$f = -kr$$

(a) $U = -\int f \cdot dr = +\int kr\,dr = \frac{k}{2}r^2 \qquad U(0)$ si $r = 0$

(b) $2\pi r = n\lambda = \frac{nh}{p} = \frac{nh}{mv}$

$\Rightarrow \boxed{r = \frac{n\hbar}{mv}}$ but $\frac{mv^2}{r} = kr \Rightarrow \boxed{v^2 = \frac{kr^2}{m}}$

$\Rightarrow r^2 = \frac{n^2\hbar^2}{m^2v^2} = \left(\frac{n\hbar}{m}\right)^2 \cdot \frac{m}{kr^2} \Rightarrow r^4 = \left(\frac{m}{k}\right)\left(\frac{n\hbar}{m}\right)^2$

$\Rightarrow r^2 = \left(\frac{n\hbar}{m}\right)\sqrt{\frac{m}{k}} = \frac{n\hbar}{\sqrt{mk}} = \frac{n\hbar}{\sqrt{mk}}\sqrt{\frac{k}{k}} = \boxed{\left(\frac{n\hbar}{k}\right)\sqrt{\frac{k}{m}}}$

$c = \lambda\nu$

$E = \hbar\omega$

luego, $v^2 = \frac{\cancel{k}}{m} \cdot \left(\frac{n\hbar}{\cancel{k}}\right)\sqrt{\frac{k}{m}} = \boxed{\left(\frac{n\hbar}{m}\right)\sqrt{\frac{k}{m}}}$

$E = K + U = \frac{1}{2}\cancel{m} \cdot \left(\frac{n\hbar}{\cancel{m}}\right)\left(\frac{k}{m}\right)^{1/2} + \frac{1}{2}\cancel{k} \cdot \left(\frac{n\hbar}{\cancel{k}}\right)\left(\frac{k}{m}\right)^{1/2} = \boxed{n\hbar\left(\frac{k}{m}\right)^{1/2}}$

(c) $m = 3 \times 10^{-26}$ kg, $k = 1180\ N\,m^{-1} \Rightarrow \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} = \boxed{1.983 \times 10^{14}\ Hz}$

$\left.\begin{array}{l} E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \\ E_{n+1} = (n + \frac{3}{2})\hbar\omega \end{array}\right\} \Delta E = \hbar\omega = 6.626 \times 10^{-34}\ \frac{m^2 kg}{s} \times 1.983 \times 10^{14} =$

$= \qquad = \frac{hc}{\Delta E} = \quad \boxed{9511\ nm}$

9.511×10^{-6}

Construyendo la ec. de Schrodinger

$\lambda = \frac{h}{p}$ → ¿cuál es la "ec. de onda" para una partícula?

onda infinita: $\psi = A\cos(kx - \omega t)$ (0)

Pulso finito = superposición de ondas planas, queremos q' el pulso finito también satisfaga la misma ec. q' la onda plana ⇒ Ec. debe ser LINEAL

E. total partícula $= \hbar\omega$ ← frec. onda.

$$E = \hbar\omega$$
$$= \frac{p^2}{2m} + V = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V \qquad (1)$$

$$(0) \rightarrow \frac{\partial\psi}{\partial x} = -Ak\sin(kx - \omega t)$$
$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -Ak^2\cos(kx - \omega t) = -k^2\psi$$

pero $k^2 = \frac{2m(E-V)}{\hbar^2}$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi} \qquad (2)$$

$k = cte$, o sea $V = cte$ ⇒ (2) solo reformula de Broglie.

Idea de Schrödinger: Ec. (2) es válida también cuando $V = V(x)$.

Introduciendo el tiempo:

$$\psi = A\cos(kx-\omega t)$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \omega A\sin(kx-\omega t)$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = -\omega^2 A\cos(kx-\omega t) = -\omega^2\psi \qquad (3)$$

de $\quad E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi \quad$ y usando $\omega = E/\hbar$

$$\Rightarrow \quad \hbar\omega\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi \qquad (3')$$

si intentamos unir (3) en (3'):

$$\hbar^2\omega^2\psi^2 = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi\right]^2$$

$$-\hbar^2\psi\frac{d^2\psi}{dt^2} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi\right]^2 \qquad \text{NO LINEAL}$$

Idea: usar $\psi = Ae^{i(kx-\omega t)}$ (como en óptica)

$$\Rightarrow \frac{\partial\psi}{\partial t} = -i\omega A e^{i(kx-\omega t)} = -i\omega\psi$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\psi \qquad (4)$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi} \qquad (5)$$

Ec. de S. t-dependiente en 1D.

$\psi(x) \to$ no observable

<u>Intensidad</u> $= |\psi|^2 = \psi\psi^* = A^*A = |A|^2 \in \mathbb{R}$

<u>Justificación</u>: acuerdo con incontable experimentos

$|\psi(x,t)|^2 :=$ densidad de probabilidad de hallar la partícula en posición x, en el instante t $= |\psi(x,t)|^2 dx\,dt$

CONSTRUYENDO LA EC. DE SCHRÖDINGER

Schrödinger 1er intento

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$$ (partícula libre)

$\psi = A e^{i(kx - \omega t)}$ $\qquad E = \hbar\omega \;,\; \vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -i\omega\psi \Rightarrow \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = -\omega^2\psi = -\frac{E^2}{\hbar^2} \Rightarrow \boxed{E^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}}$$

$$\Rightarrow \boxed{-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi = -\hbar^2c^2\nabla^2\psi + m^2c^4}$$ Ec. de Klein-Gordon

No resulta para los e^-s!

$\Rightarrow$ tomar límite no-relativista

$$E = (p^2c^2 + m^2c^4)^{1/2} \simeq mc^2 + \frac{p^2}{2m} + \cdots$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[mc^2 + \frac{p^2}{2m} + \cdots\right]\psi$$

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + mc^2\psi}$$

puede eliminarse

$\psi \rightarrow e^{-\frac{imt}{\hbar}}\psi$ $\qquad$ desaparece el término cte.
No afecta $|\psi|^2$.

Ec. de Schrödinger tiempo-independiente

Muchas veces, es posible $\Psi(x,t) = \psi(x)\phi(t)$.
Sup. $V(x,t) = V(x)$.

$$\Rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)\phi(t) + V(x)\psi(x)\phi(t) = i\hbar\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)\psi \qquad \Big/ \frac{1}{\psi(x)\phi(t)}$$

$$\Rightarrow \quad \underbrace{\frac{1}{\psi(x)}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi(x)\right\}}_{\text{solo fn. de } x} = \underbrace{i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d\phi}{dt}}_{\text{solo fn. de } t} \qquad (17)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V\psi = c\psi \quad y \quad i\hbar\frac{d\phi}{dt} = c\phi$$

$\Rightarrow \phi(t) \propto e^{+ict/\hbar}$ → fn. complejo oscilatorio, con frecuencia ν, tq. $\nu = c/h$

Pero, se debe tener $\nu = E/h$ $\Rightarrow$ $\boxed{C = E}$

$$\Rightarrow \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi} \qquad (18)$$

"Ec de S. t-indep"

$\psi(x)$ es también una "autofunción" del operador

$$L = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

$$\check{L}\,\psi(x) = E\,\psi(x) \qquad (19)$$

operador autofn. autovalor

$$\rho(x,t) = \psi^* \psi \qquad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \Rightarrow \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} H\psi$$

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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\cdot\psi + \psi^*\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}(H\psi^*)\psi - \frac{i}{\hbar}\psi^* H\psi$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\left[\psi^* H\psi - (H\psi^*)\psi\right]$$

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

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

$$\frac{i\hbar}{2m}\vec{\nabla}\cdot\left[\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right] = \vec{\nabla}\cdot\vec{J}$$

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right)$$

$$y \quad \boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{J}}$$

Ec. de continuidad

(JUGANDO)

Playing: $-\psi'' + \bar{V}(x)\psi = \bar{E}\psi$

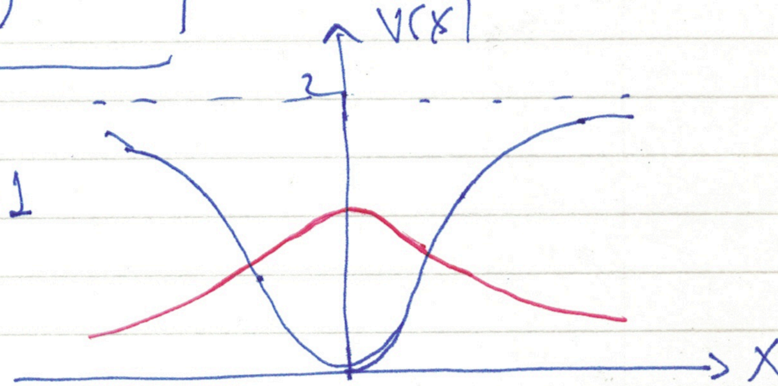
donde $\bar{V}(x) \equiv \frac{2m}{\hbar^2} V(x)$; $\bar{E} \equiv \frac{2m}{\hbar^2} E$

Given $\psi(x) \neq 0$, $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$, and given $\bar{E}$,

$$\Rightarrow \boxed{\bar{V}(x) = \frac{\psi''(x) + \bar{E}\psi(x)}{\psi(x)}}$$

① $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \operatorname{sech}(x)$; $\bar{E} = 1$

$\Rightarrow \bar{V}(x) = -2\tanh^2(x)$



② $\psi(x) = \frac{(1/\pi)}{1+x^2}$

$\Rightarrow \bar{V}(x) = \frac{x^4 + 8x^2 - 1}{(x^2+1)^2}$