En 07/03/2022 hablamos de evolución temporal.

Para un sistema conservativo (H independiente de t) $H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$

1) Escribir $|\psi(t_0)\rangle$ en base de e-vectores de H

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_n \underbrace{c_n(t_0)}_{\langle\varphi_n|\psi(t_0)\rangle} |\varphi_n\rangle$$

2)

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t_0)\, e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} |\varphi_n\rangle$$

¿Cómo obtener $|\varphi_n\rangle$ y E_n en primer lugar?
En particular en la descripción en la base de posición

Partículas en potenciales independientes de t

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(R)$$

Queremos resolver $H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$ ec. de e-valores.
Proyectando a la base $\{|\vec{r}\rangle\}$

$$\langle\vec{r}|H|\varphi\rangle = E\langle\vec{r}|\varphi\rangle$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right)\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$$

(sigue siendo un problema de e-valores)

Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

Otra manera de llegar a esta ecuación:

1. $i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle = H|\psi\rangle$
2. Proyectamos a base de $\{|\vec{r}\rangle\}$ $\quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = \overbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right)}^{H}\psi(\vec{r},t)$
3. H no depende de t => separación de variables

$$\psi(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r})\,\Theta(t)$$

... Haciendo cuentas

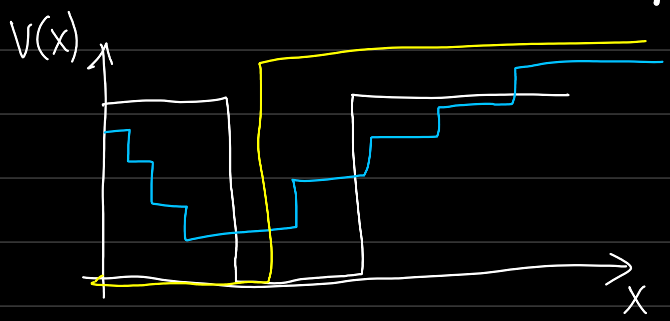
$$\overbrace{\frac{i\hbar}{\Theta}\frac{d\Theta}{dt}}^{\text{depende de } t} = \overbrace{\frac{1}{\varphi(\vec r)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi\right] + V(\vec r)}^{\text{depende de } \vec r} = cte = \hbar\omega$$

$$\frac{d\Theta}{dt} = -i\omega\Theta \quad \Rightarrow \quad \Theta(t) = e^{-i\omega t}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec r)\right]\varphi = \overbrace{\hbar\omega}^{E}\varphi$$

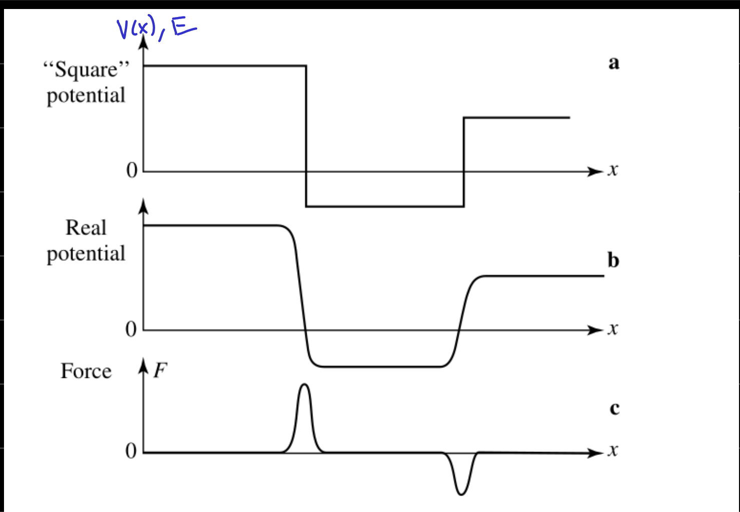
Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

Potenciales constantes por pedazos (1D)



① Son fáciles de resolver

② Los efectos cuánticos son importantes cuando el potencial varía en distancias chicas comparadas con $\lambda = \frac{h}{p}$



$$F = -\frac{dV}{dx}$$

En una region de potencial constante

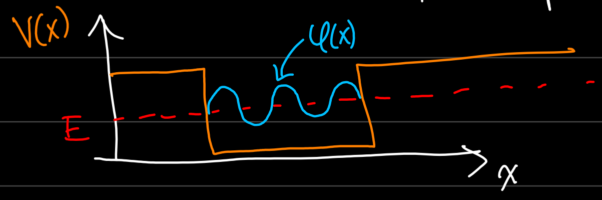
$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\varphi(x) = 0$$

constante

Soluciones

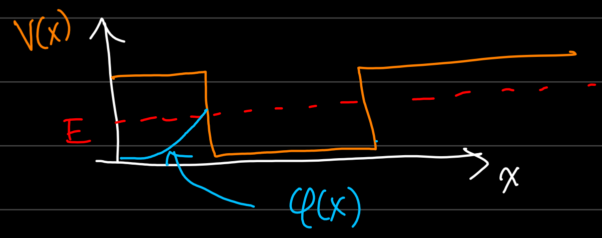
(i) Caso $E > V$; definimos $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)} \in \mathbb{R}$

$$\varphi(x) = A e^{ikx} + A' e^{-ikx}$$; A y A' por determinarse



(ii) Caso $E < V$; definimos $\rho = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V - E)} \in \mathbb{R}$

$$\varphi(x) = B e^{\rho x} + B' e^{-\rho x}$$; B y B' por determinar



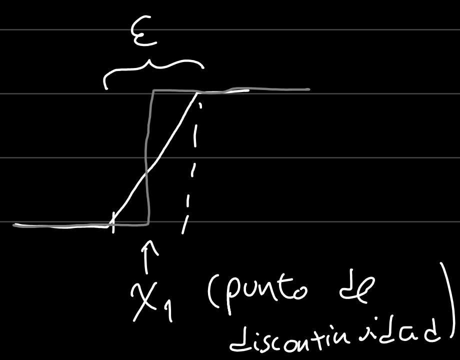
(iii) Caso $E = V$; $\varphi'' = 0 \Rightarrow \varphi = Ax + B$

Condiciones de frontera

Veremos que en las fronteras $\varphi(x)$ debe ser continua
$\frac{d}{dx}\varphi(x)$ debe ser continua

Pensando en un $V_\varepsilon(x)$, $V(x)$

$$\lim_{\varepsilon \to 0} V_\varepsilon(x) = V(x)$$



$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi_\varepsilon(x) = \frac{2m}{\hbar^2}\left[V_\varepsilon(x) - E\right]\varphi_\varepsilon(x)$$ integrando de $x_1-\eta$ a $x_1+\eta$

$$\frac{d}{dx}\varphi_\varepsilon(x_1+\eta) - \frac{d}{dx}\varphi_\varepsilon(x_1-\eta) = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_1-\eta}^{x_1+\eta}\left(V_\varepsilon(x) - E\right)\varphi_\varepsilon(x)\,dx$$

Si $\varphi_\varepsilon(x)$ es acotado en $(x_1-\eta, x_1+\eta)$ entonces la integral $\to 0$ cuando $\eta \to 0$

- Por propiedades de ecs. diferenciales φ_ε es acotada y también $\varphi = \lim_{\varepsilon\to 0}\varphi_\varepsilon$ es acotada

$\therefore \frac{d}{dx}\varphi_\varepsilon(x_1+\eta) - \frac{d}{dx}\varphi_\varepsilon(x_1-\eta) \xrightarrow[\eta\to 0]{} 0$ (y también para φ)

$\therefore \frac{d\varphi}{dx}$ es continua en la frontera (donde $V(x)$ salta)

$\therefore \varphi$ es continua en la frontera

- Ojo Si $V(x)$ es discontinua $\frac{d^2\varphi}{dx^2}$ también

- Esto sólo se vale para $V(x)$ acotado.

Receta para resolver la ec. de Schrödinger indep. del tiempo para potenciales continuos por pedazos.

(1) Para cada region j, usar
$$\begin{cases} \varphi_j(x) = A_j e^{ik_j x} + A_j' e^{-ik_j x} & ; E>V \\ \varphi_j(x) = B_j e^{\rho_j x} + B_j' e^{-\rho_j x} & ; E<V \\ \varphi_j(x) = A_j x + B_j & ; E=V \end{cases}$$

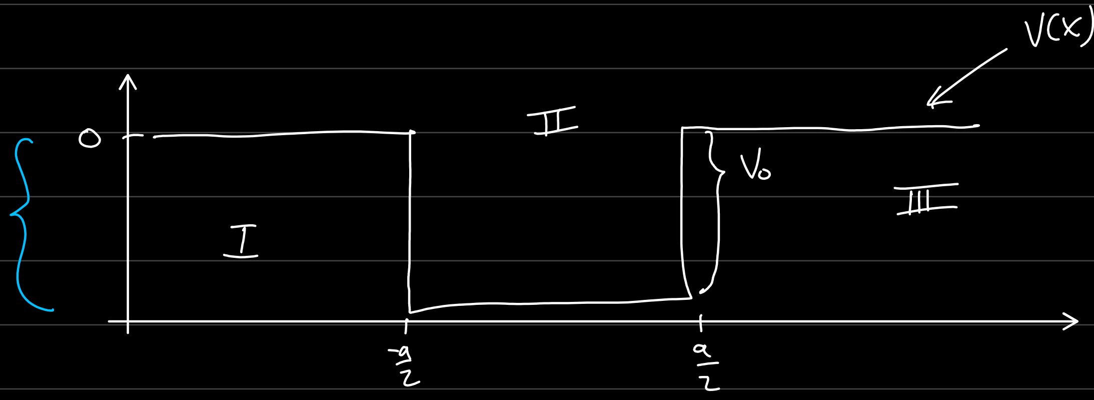
(2) Determinar constantes utilizando condiciones de frontera

$$\varphi_j(x_j) = \varphi_{j+1}(x_j)$$
$$\frac{d\varphi_j}{dx}(x_j) = \frac{d\varphi_{j+1}}{dx}(x_j)$$

x_j es donde $V(x)$ salta

Pozo finito

$$K = \left(\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}\right)^{1/2}$$



Caso $-V_0 < E < 0$

$$\varphi_I(x) = B_1 e^{\rho x} + \cancel{B_1'}^{\,0} e^{-\rho x}$$
$$\varphi_{II}(x) = A_2 e^{ikx} + A_2' e^{-ikx}$$
$$\varphi_{III}(x) = \cancel{B_3}^{\,0} e^{\rho x} + B_3' e^{-\rho x}$$

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

$$\rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Como φ debe ser acotada

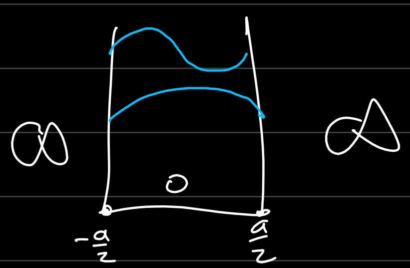
En $-\frac{a}{2}$ frontera I y II

$$\varphi_I\left(-\tfrac{a}{2}\right) = \varphi_{II}\left(-\tfrac{a}{2}\right) \Rightarrow B_1 e^{-\rho\frac{a}{2}} = A_2 e^{-ik\frac{a}{2}} + A_2' e^{ik\frac{a}{2}}$$
$$\varphi_I'\left(-\tfrac{a}{2}\right) = \varphi_{II}'\left(-\tfrac{a}{2}\right) \Rightarrow B_1 \rho e^{-\rho\frac{a}{2}} = A_2 ik e^{-ik\frac{a}{2}} - A_2' ik e^{ik\frac{a}{2}}$$

⋮

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ \infty & \text{otro caso} \end{cases}$$

Para



En donde $V(x) = \infty$
$\varphi(x) = 0$

$\varphi(-\frac{a}{2}) = 0 \quad ; \quad \varphi(\frac{a}{2}) = 0$