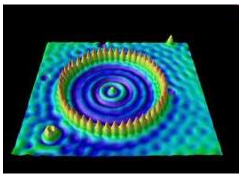
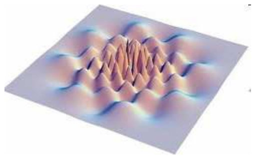
SCHROEDINGER_1





SCHROEDINGER

La ecuacion de Schroedinger

Scroedinger siguio hasta cierto punto los postulados de De Broglie primeramente intento una teoria completamente relativista pero luego termino haciendo algo "clasico"

El habló de ondas representadas por una funcion $\Psi(x,t)$

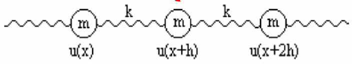
La Ecuacion de Ondas usual

$$\boxed{\frac{\partial^2}{\partial x^2}y = \frac{1}{w^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}y}$$

con w la velocidad de propagacion

Si se estudia el siguiente problema

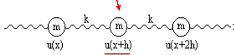
Partícula de interés



Se empieza escribiendo la ecuacion de la fuerza para la masa

$$F = ma(t) = m \cdot \frac{\partial^2}{\partial t^2}u(x+h,t)$$

$$F = F_{x+2h} + F_x =$$



$$= k[u(x+2h,t) - u(x+h,t)] + k[u(x,t) - u(x+h,t)]$$

Para la masa en la posicion *(x+h)*

$$m \cdot \frac{\partial^2}{\partial t^2}u(x+h,t) = k[u(x+2h,t) - u(x+h,t)] + k[u(x,t) - u(x+h,t)]$$

Desarrollo en serie de *f*

$$f(x \pm h) = f(x) \pm hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + O(h^3).$$

Restando con h y -h

$$f(x+h) - f(x-h) = 2hf'(x) + O(h^3),$$

Para la primer derivada

$$\boxed{f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2).}$$

Sumando en vez de restar

$$f(x+h) + f(x-h) = 2f(x) + h^2 f''(x) + O(h^4)$$

obtenemos

$$\boxed{f''(x) = \frac{f(x+h) + f(x-h) - 2f(x)}{h^2} + O(h^2)}$$

Como la segunda es la expresion de la derivada segunda

$$\boxed{m \cdot \frac{\partial^2}{\partial t^2} u(x+h,t) = \frac{KL^2}{M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x,t)}$$

una posible solucion es $y(x,t) = A \sin(kx - wt)$

$$m \cdot \frac{\partial^2}{\partial t^2} u(x+h,t) = k[u(x+2h,t) - u(x+h,t)] + k[u(x,t) - u(x+h,t)]$$

$$f''(x) = \frac{f(x+h) + f(x-h) - 2f(x)}{h^2} + O(h^2)$$

Tenemos que segun De Broglie

$$\lambda = h/p$$

$$v = E/h$$

Por otro lado, Schroedinger tomó

$$\boxed{E = p^2/(2m) + V}$$

[En vez de $E = p^2/(2m) + V + m_0c^2$]

Luego

$$\boxed{v = E/h = p^2/(2mh) + V/h}$$

$$k = 1/\lambda = p/h$$

Suponiendo en ppo. que V es constante

$$dv = \frac{2p\,dp}{2mh}$$

de donde con $dk = dp/h$ la velocidad de grupo queda como

$$\boxed{g = \frac{dv}{dk} = \frac{2p\,dp}{2mh} \frac{1}{dp/h} = p/m = v'}$$

Condiciones a satisfacer

a) ser consistente con las ecuaciones anteriores

b) deberia ser linea en $\Psi(x,t)$ para que valga superposicion es decir que tambien sea solucion la combinacion:

$$\Psi(x,t) = a\Psi(x,t) + b\Psi(x,t)$$

c) La energia potencial V es en general una funcion de x , t, si $V(x,t) = V_0 \Rightarrow$

$$F = -\frac{\partial V(x,t)}{\partial x} = 0$$

Sea la siguiente forma de las euaciones previas

$$K = 2\pi k$$

$$\omega = 2\pi\nu$$

Entonces

$$p = \hbar K$$

$$E = \hbar\omega$$

Tenemos

$$\frac{\hbar^2 K^2}{2m} + V(x,t) = \hbar\omega$$

Para estar de acuerdo a la **condicion a**)$\Rightarrow$

$\Psi(x,t)$ debe ser consistente con esta ultima ecuacion $\frac{\hbar^2 K^2}{2m} + V(x,t) = \hbar\omega$

Para estar de acuerdo con la **condicion b**)

la ecuacion que satisface $\Psi(x,t)$ solo puede contener terminos del tipo:

$$\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}, \frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}, \ldots \text{ o } \frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}, \frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial t^2}, \ldots$$

(no puede tener terminos independientes o del tipo $[\Psi(x,t)]^n$)

Sea la funcion de onda sencilla

$$\Psi(x,t) = sin(Kx - \omega t)$$

Calculando algunas derivadas se obtiene

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x} = K\cos(Kx - \omega t) \qquad \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -K^2\sin(Kx - \omega t)$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\omega\cos(Kx - \omega t) \qquad \frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = -\omega^2\sin(Kx - \omega t)$$

que debe ser consistente con $\frac{\hbar^2 K^2}{2m} + V(x,t) = \hbar\omega$

Elegimos entonces "el orden de derivacion" a fin de obtener esta relacion entre los parametros. Parece tentador probar con:

$$\boxed{\alpha\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V_0\Psi = \beta\frac{\partial\Psi}{\partial t}}$$

Pero esto no da porque aparecen senos y cosenos (pero observar que aparecen las constantes correctas i.e $K^2,\ V,\ \omega$

$$\boxed{-\alpha K^2\sin(Kx-\omega t) + V_0\sin(Kx-\omega t) = -\beta\omega\cos(Kx-\omega t)}$$

Lo cual es incorrecto pues quiero que como resultado aparezca una combinacion de parametros multiplicando a Ψ

Probamos entonces con

$$\boxed{\Psi = \gamma\sin(Kx-\omega t) + \cos(Kx-\omega t)}$$

Rescatando las derivadas apropiadas, ahora obtenemos

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -K^2\cos(Kx-\omega t) - K^2\gamma\sin(Kx-\omega t)$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\omega\gamma\cos(Kx-\omega t) + \omega\sin(Kx-\omega t)$$

Resulta entonces para

$$\boxed{\alpha\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V_0\Psi = \beta\frac{\partial\Psi}{\partial t}}$$

Resulta que la siguiente expresion es iguala 0

$$\boxed{\begin{aligned}&\alpha[-K^2\cos(Kx-\omega t)] + V_0\cos(Kx-\omega t) +\\ &\beta[\omega\gamma\cos(Kx-\omega t)] +\\ &\alpha[-K^2\gamma\sin(Kx-\omega t)] + V_0\gamma\sin(Kx-\omega t) +\\ &-\beta\omega\sin(Kx-\omega t) \quad =0\end{aligned}}$$

$$\boxed{[-\alpha K^2 + V_0 + \beta\omega\gamma]\cos(Kx-\omega t) + [-\alpha K^2\gamma + V_0\gamma - \beta\omega]\sin(Kx-\omega t) = 0}$$

Como sin y cos son ortogonales entonces para que esto valga para todo x y $t \Rightarrow$

$$\boxed{\begin{aligned}-\alpha K^2 + V_0 &= -\beta\gamma\omega\\ -\alpha K^2 + V_0 &= \beta\omega/\gamma\end{aligned}}$$

junto con la condicion sobre la Energia

$$\boxed{\frac{\hbar^2K^2}{2m} + V_0 = \hbar\omega}$$

De las dos primeras restando mam

$$0 = \beta\gamma\omega + \beta\omega/\gamma \Rightarrow \gamma = -1/\gamma \Rightarrow$$

$$\gamma^2 = -1 \Rightarrow \boxed{\gamma = \pm i}$$

Entonces

$$\boxed{\alpha K^2 - V_0 = \pm i\beta\omega}$$

De donde con $\frac{\hbar^2 K^2}{2m} + V_0 = \hbar\omega$ podemos asociar

$$\boxed{\begin{array}{c} \alpha = -\frac{\hbar^2}{2m} \\ \pm i\beta = -\hbar \Rightarrow \beta = \pm i\hbar \end{array}}$$

$\alpha K^2 - V_0 = i\beta\omega$

Como

$\square\frac{K^2}{2m} + V_0 = \square\omega$

Entonces con

$\gamma = i$

$\beta = i\square$

$\alpha = -\frac{\square^2}{2m}$

obtenemos

$--\frac{\square^2}{2m}K^2 + V_0 = -ii\square\omega =$

$\boxed{\frac{\square^2}{2m}K^2 + V_0 = \square\omega}$

Hay dos soluciones , tomamos $\gamma = i$ y $\beta = i\hbar$, resultando

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V_0\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}}$$

Si V_0 no es constante se postula que

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

Observar que esta es una ecuacion de segundo orden en derivadas parciales pero **compleja**. Como $\gamma = i$ La solucion para Ψ (particula libre) es

$$\Psi = \cos(Kx - \omega t) + \gamma\sin(Kx - \omega t) \Rightarrow$$

$$\boxed{\Psi = \cos(Kx - \omega t) + i\sin(Kx - \omega t)}$$

Interpretacion de la Ecuacion de Schroedinger

Si la solucion es compleja, donde esta el observable fisico?

En 1926 Born propuso el postulado siguiente:

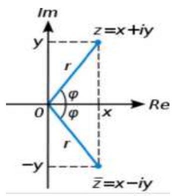
Si en un instante t se realiza una medicion para localizar la particula asociada con una funcion de onda $\Psi(x,t)$ entonces la probabilidad $P(x,t)dx$ que la particula se encuentre entre x y $x + dx$ es

$$\boxed{P(x,t)dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx}$$

Donde $\Psi^*(x,t)$ es el complejo conjugado de $\Psi(x,t)$ es decir

$$\Psi(x,t) = \mathrm{Re}(x,t) + i\,\mathrm{Im}(x,t) \Rightarrow$$

$$\Psi^*(x,t) = \mathrm{Re}(x,t) - i\,\mathrm{Im}(x,t)$$



Entonces

$$\Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = (\mathrm{Re}(x,t) - i\,\mathrm{Im}(x,t))(\mathrm{Re}(x,t) + i\,\mathrm{Im}(x,t))$$
$$= \mathrm{Re}(x,t)\,\mathrm{Re}(x,t) + \mathrm{Im}(x,t)\,\mathrm{Im}(x,t)$$

Que es real

Tambien podemos usar la notacion

$$\Psi(x,t) = \exp[i(Kx - \omega t)] \Rightarrow$$
$$\Psi^*(x,t) = \exp[-i(Kx - \omega t)]$$

Como $\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$ es real esta bien asociarlo con $P(x,t)$

(no esta mal a priori)

Ecuacion de balance para la probabilidad

a) Para Ψ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

a) Para Ψ^*

Tomando en cuenta que

$$(z+w)^* = z^* + w^*$$
$$(z-w)^* = z^* - w^*$$
$$(zw)^* = z^* w^*$$

Entonces para Schrodinger

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\right)^* + (V\Psi)^* = \left(i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)^* \Rightarrow$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)^*\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\right)^* + (V)^*(\Psi)^* = (i\hbar)^*\left(\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)^*$$

Resulta entonces

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2} + V\Psi^* = -i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}$$

Multiplicando apropiadamente las ecuaciones anteriores (la conjugada por Ψ, la no conjugada por Ψ^* y restando

$$\Psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi\right) - \Psi\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2} + V\Psi^*\right)$$
$$= \Psi^*\left(i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right) - \Psi\left(-i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right)$$

o

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\right) + (V\Psi^*\Psi - V\Psi\Psi^*)$$
$$= i\hbar\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right)$$

$$(V\Psi^*\Psi - V\Psi\Psi^*) = (V\Psi^*\Psi - V(\Psi^*\Psi)^*)$$

$$\begin{aligned}(V\Psi^*\Psi - V\Psi\Psi^*) &= (V\Psi^*\Psi - V(\Psi^*\Psi)^*)\\ &= V(\Psi^*\Psi - (\Psi^*\Psi)^*)\\ &= V(|\Psi|^2 - (|\Psi|^2)^*)\\ &= V(|\Psi|^2 - |\Psi|^2) = 0\end{aligned}$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\right) = i\hbar\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right)}$$

$$\boxed{\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right) = \frac{\partial}{\partial t}\Psi^*\Psi}$$

Entonces

$$\frac{i\hbar}{2m}\int_{x1}^{x2}\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right)dx = \frac{\partial}{\partial t}\int_{x1}^{x2}\Psi^*\Psi dx$$

Que da

$$\boxed{\frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right]_{x1}^{x2} = \frac{\partial}{\partial t}\int_{x1}^{x2}\Psi^*\Psi dx}$$

Tomando en cuenta que

$$\Psi = \exp[i(Kx - \omega t)]$$

$$\Psi^* = \exp[-i(Kx - \omega t)] \Rightarrow$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\Psi = iK\exp[i(Kx - \omega t)] = iK\Psi$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\Psi^* = -iK\exp[-i(Kx - \omega t)] = -iK\Psi^*$$

De donde reemplazando

$$\boxed{-\frac{\hbar}{m}[K\Psi^*\Psi]_{x_1}^{x_2} = \frac{\partial}{\partial t}\int_{x_1}^{x_2}\Psi^*\Psi dx}$$

Como $\hbar K/m = p/m = v'$, resulta

$$\boxed{(v\Psi^*\Psi)_{x=x1} - (v\Psi^*\Psi)_{x=x2} = \frac{\partial}{\partial t}\int_{x1}^{x2}\Psi^*\Psi dx}$$

como $\Psi^*\Psi$ es la probabilidad
y la estamos multiplicando por la velocidad $\Rightarrow$
lo que tenemos es el flujo de probabilidad en $x1$ - el flujo de $x2$.

Luego es el flujo neto en la region limitada por $x1$ y $x2$.

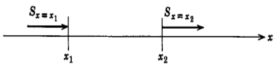


Figure 7–1. Illustrating the one dimensional conservation equation.

Esto esta igualado a la variacion temporal de la probabilidad total en ese intervalo o region. Luego esto es una ecuacion de conservacion, la variacion temporal de probabilidad en la region es igual al flujo neto!!!

$$(vP)_{x=x1} - (vP)_{x=x2} = \frac{\partial}{\partial t}\int_{x1}^{x2} P dx \Rightarrow$$

$$\boxed{(S)_{x=x1} - (S)_{x=x2} = \frac{\partial}{\partial t}\int_{x1}^{x2} P dx}$$

Donnde S es el flujo de probabilidad

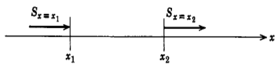


Figure 7–1. Illustrating the one dimensional conservation equation.

Esto es la variacion de la probabilidad de encontrar la particula en la region de interes

Como es una densidad de probabilidad

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx = 1$$

$$\boxed{S(x,t) = v\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)}$$

Donde $V(x,t)$ debe variar suavemente en la region de interes

El Flujo neto es

$$\boxed{S(x,t) = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\right]_{x1}^{x2}}$$

Schroedinger independiente del tiempo

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

Dada esta ecuacion tenemos $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)$ y $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)$, el operador que correlaciona x y t es $V(x,t)$

entonces si $V(x,t)$ es independiente del tiempo podemos plantear

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\phi(t)$$

Entonces con $V(x,t) \to V(x)$ tenemos

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

Entonces

$$\phi(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + V(x)\psi(x)\right] = \psi(x)\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi(t)\right] \Rightarrow$$

$$\underbrace{\frac{1}{\psi(x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + V(x)\psi(x)\right]}_{\text{En x}} = \underbrace{\frac{1}{\phi(t)}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi(t)\right]}_{\text{En t}}$$

Como tenemos toda la dependencia en x de un lado y la en t en el otro

$$\frac{1}{\psi(x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + V(x)\psi(x)\right] = C$$

$$\frac{1}{\phi(t)}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi(t)\right] = C$$

De donde

$$\frac{1}{\phi(t)}\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi(t)\right] = C \Rightarrow \phi(t) = \exp\left(\frac{-iCt}{\hbar}\right)$$

o sea que podemos escribir

$$\boxed{\phi(t) = \cos\left(\frac{Ct}{\hbar}\right) - i\sin\left(\frac{Ct}{\hbar}\right)}$$

De donde

$$\nu = \frac{C}{2\pi\hbar} = \frac{C}{h} \text{ pero } \nu = \frac{E}{h} \Rightarrow$$

$$\boxed{\phi(t) = \exp(-iCt/\hbar) = \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)}$$

Finalmente

$$\boxed{\Psi(x,t) = \psi(x)\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)}$$

Las soluciones $\psi(x)$ no son necesariamente complejas

Cuantificacion de la Energia en Schroedinger

Consideremos un problema en el que

$$V(x,t) = V(x)$$

En este caso sabemos que

$$\boxed{\Psi(x,t) = \psi(x)\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)}$$

Que condiciones debe satisfacer $\psi(x)$ y cuales son los valores de E?

Las autofunciones $\psi(x)$ deben ser tales que aquello que este ligado a la observacion este bien definido

La "parte observable" de $\Psi(x,t)$ es

$$\boxed{P(x,t)dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx}$$

y/o

$$\boxed{S(x,t) = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right]}$$

Luego para que estas magnitudes esten bien definidas, DEBERA CUMPLIRSE

1	$\psi(x)$	*finita*
2	$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$	*finita*
3	$\psi(x)$	*continua*
4	$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$	*continua*

Pues de no ser asi...si **no** se **cumple**

Pues de no ser asi...si **no** se **cumple**

1	$\psi(x)$	*finita*	1)$\Rightarrow$ la probabilidad no esta definida
2	$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$	*finita*	2)$\Rightarrow$ S no esta bien definida
3	$\psi(x)$	*continua*	3)$\Rightarrow$no se cumple 2)
4	$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$	*continua*	4) $\Rightarrow$ como

$$\frac{1}{\psi(x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + V(x)\psi(x)\right] = C$$

$$\Rightarrow$$

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

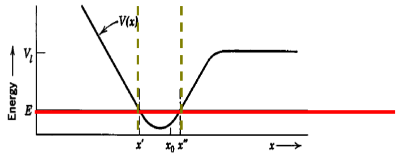
$$\Rightarrow$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi(x)$$

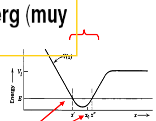
Entonces para $V(x)$ y E finitos con $\psi(x)$ finita por 1) $\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)$ luego $\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$ debe ser continua

finita

Sea el siguiente caso:



Ahora vemos el metodo con los dedos del Eisberg (**muy instructivo**)



a) solo conocemos $V(x)$ pero no el valor E

b) Segun el grafico anterior hay dos intersecciones de E con $V(x)$ y por lo tanto hay tres regiones , dos en las cuales $E < V(x)$ y una con $E > V(x)$

c)Supongamos que integramos numericamente a partir de un punto x_0 con $x' < x_0 < x''$ tomando que $\psi(x_0) = 1$ (irrelevante pues luego se normaliza) Tambien daremos un valor a $\frac{\partial}{\partial x}\psi(x_0)$

Condicion inicial arbitraria

Como se realiza la integracion numerica?

Si $[x - x_0]$ es muy pequeño, desarrollando a primer orden obtenemos para $\psi(x_1)$

$$\boxed{\psi(x_1) \approx \psi(x_0) + \left[\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\right]_{x0}[x_1 - x_0] \Rightarrow}$$

$$\boxed{\psi(x_1) - \psi(x_0) = \left[\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\right]_{x0}[x_1 - x_0]}$$

Para $\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$ se hace (Si $[x - x_0]$ es muy pequeño y $\left[\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\right]_{x0}$ finito, como debe ser)

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E]\psi(x) \Rightarrow$$

$$\frac{d}{dx}\left[\frac{d}{dx}\psi(x)\right] = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E]\psi(x) \Rightarrow$$

$$\boxed{d\left[\frac{d}{dx}\psi(x)\right] = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E]\psi(x)dx} \Rightarrow$$

Reemplazando

Por la aproximación anterior

$$\left[\frac{d}{dx}\psi(x)\right]_{x1} - \left[\frac{d}{dx}\psi(x)\right]_{x0} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E]\left[\psi(x_0) + \left[\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\right]_{x0}[x_1-x_0]\right]*$$

$$\left[\frac{d}{dx}\psi(x)\right]_{x1} - \left[\frac{d}{dx}\psi(x)\right]_{x0} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E][\psi(x_0)][x_1-x_0]$$

$$+\cancel{\frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E]\left[\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\right]_{x0}[x_1-x_0]^2}$$

Muy pequeño por suposición $[x_1 - x_0]$

De donde

$$\boxed{\left[\frac{d}{dx}\psi(x)\right]_{x1} - \left[\frac{d}{dx}\psi(x)\right]_{x0} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E][\psi(x)]_{x0}[x_1-x_0]}$$

$$\left[\frac{d}{dx}\psi(x)\right]_{x1} - \left[\frac{d}{dx}\psi(x)\right]_{x0} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E]\left[\psi(x_0) + \left[\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\right]_{x0}[x_1-x_0]\right] \quad [x_1-x_0]$$

$$\left[\frac{d}{dx}\psi(x)\right]_{x1} - \left[\frac{d}{dx}\psi(x)\right]_{x0} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E][\psi(x_0)][x_1-x_0]$$

$$+\frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E]\left[\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\right]_{x0}[x_1-x_0]^2$$

De donde (con $[x_1-x_0] << 1$)

$$\left[\frac{d}{dx}\psi(x)\right]_{x1} - \left[\frac{d}{dx}\psi(x)\right]_{x0} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E][\psi(x)]_{x0}[x_1-x_0]$$

Resumiento

$$\boxed{\psi(x_1) = \psi(x_0) + \left[\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\right]_{x0}[x_1-x_0]}$$

$$\boxed{\left[\frac{d}{dx}\psi(x)\right]_{x1} = \left[\frac{d}{dx}\psi(x)\right]_{x0} + \frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E][\psi(x)]_{x0}[x_1-x_0]}$$

E es un parámetro que variamos

-

De este modo se va avanzando de punto a punto

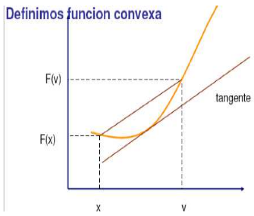
Dados Ψ_j y Ψ'_j calculamos Ψ_{j+1} y Ψ'_{j+1}

Observamos que

a) si $[V(x)-E] < 0 \Rightarrow$ para

$$\begin{cases} [\psi(x)] > 0 \Rightarrow \Delta\left[\frac{d}{dx}\psi(x)\right] < 0 \\ [\psi(x)] < 0 \Rightarrow \Delta\left[\frac{d}{dx}\psi(x)\right] > 0 \end{cases}$$

O tambien usando $\boxed{\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E]\psi(x)}$

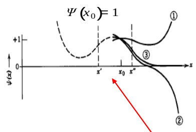


$f''(z) \geq 0$

Fija la curvatura de la función De onda

si $[V(x)-E]<0$ y $[\psi(x)]>0 \Rightarrow \frac{d^2}{dx^2}\psi(x) \leq 0 \Rightarrow$ es cóncava

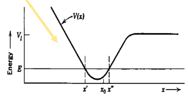
si $[V(x)-E]<0$ y $[\psi(x)]<0 \Rightarrow \frac{d^2}{dx^2}\psi(x) \geq 0 \Rightarrow$ es convexa



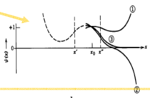
Estoy jugando con la primer derivada

Luego en la region $x' < x_0 < x''$ con la condicion inicial elegida empezamos concava

Cuando se cruza x'' pasamos a $[V(x)-E]>0$ si ocurre como en la figura $[\psi(x)]>0$ luego cambia la curvatura



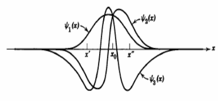
De las 3 soluciones que aparecen en la figura resulta que dos de ellas dan lugar a una ψ que diverge mientras que se puede ajustar la cosa (por el valor de la derivada en x_0 para que se vaya a 0 (que es la unica aceptable dada las circumstancias.



La cuestion es que cambiando el valor de E y el valor de $\frac{d}{dx}\psi(x)$ eventualmente lograremos ajustar las cosas para que en los dos extremo se vaya a 0

Mas aun resulta que se obtienen una serie de valores E_1, E_2 etc para los cuales podemos resolver la situacion.

Es decir para ajustar que se haga 0 en infinito

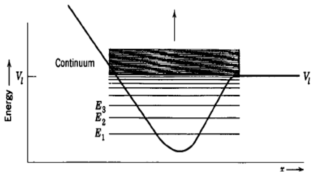


Observar que

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E]\psi(x)$$

Entonces si tenemos varios valores de E cuanto mayor es E mayor es la curvatura (digamos en x_0) luego la curvatura mayor corresponde a moyor energia.

Si ahora el potencial es del tipo



Aqui solo debemos ajustar "de un lado" y en este caso para todo valor de E podemos conseguir una solucion.