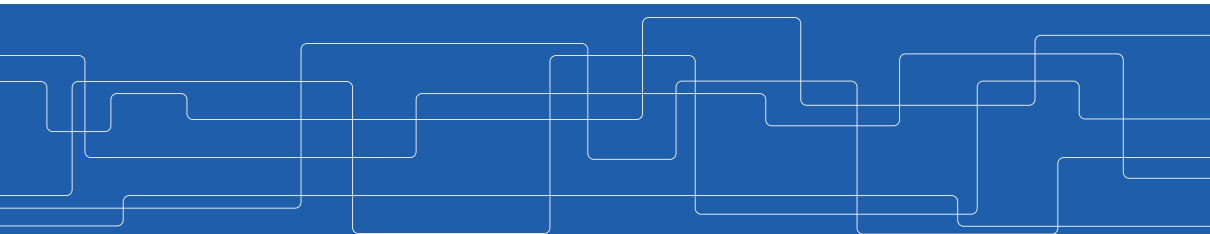




Una interpretación matemática de la Ecuación de Schrödinger

Armando Miguel Trejo Marrufo

Asesor: Pablo Castañeda



Ecuación Dependiente del Tiempo

- ▶ La dependencia del tiempo
- ▶ Formular el Problema de Valores Iniciales
- ▶ Soluciones Fuertes y Débiles
- ▶ Funciones de Prueba
- ▶ El paquete de Ondas
- ▶ La condición de variación lenta (SVEA)

Ecuación Dependiente del Tiempo de Schrödinger

Suponiendo que el movimiento de la partícula depende del tiempo, la siguiente ecuación modela este comportamiento

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + \mathcal{V}(x, t) \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}. \quad (1)$$

Primero veamos el caso de una **partícula libre**, para esto el potencial debe ser cero, es decir, $\mathcal{V}(x, t) = 0$. El caso de la función potencial distinta de cero lo veremos en la ecuación independiente del tiempo. Ahora, debemos suponer que la onda se comparta inicialmente de cierta forma

$$\psi(x, 0) = \psi_0(x),$$

donde $\psi_0(x) \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$

Así, el problema de valor inicial (PVI) a resolver es:

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, & x \in \mathbb{R}, t > 0 \\ \psi(x, 0) = \psi_0(x), & x \in \mathbb{R} \end{cases} \quad (2)$$

donde el siguiente Teorema nos da la solución.

Teorema

Supongamos $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$. Definamos $\psi(x, t)$ por:

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{m}{2i\hbar} (x - y)^2 \right] \psi_0(y) dy.$$

Entonces $\psi(x, t)$ satisface el PVI (2).

Para funciones generales $\psi_0(x, t) \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$, $\psi(x, t)$ no necesariamente satisface la ecuación de Schrödinger en el sentido clásico por que puede no ser diferenciable en la variable x o en la variable t . Por ello, las **funciones de prueba** son de utilidad, estas funciones buscamos que estén definidas en un conjunto compacto para garantizar que la integral en este intervalo sea finita. De esta forma, en lugar de evaluar $\psi(x, t)$ en cada punto de $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+$, se evalúa χ en intervalos abiertos. Así, para la ecuación de Schrödinger tenemos

Definición

Una función $\psi(x, t)$ satisface la ecuación libre ¹ de Schrödinger en el sentido débil, si para toda función de prueba $\chi \in C_D^\infty(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+)$ con soporte compacto $\mathcal{D} \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+$ se cumple:

$$\int_{\mathbb{R}^+} \int_{\mathbb{R}} \psi(x, t) \left[\frac{\partial \chi}{\partial t} - \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} \right] dx dt = - \int_{\mathbb{R}} \chi(x, 0) \psi(x, 0). \quad (3)$$

¹En el sentido de que consideramos $\mathcal{V}(x, t)$ como nula para $x \in \mathbb{R}$.

Soluciones Débiles de la Ecuación de Schrödinger

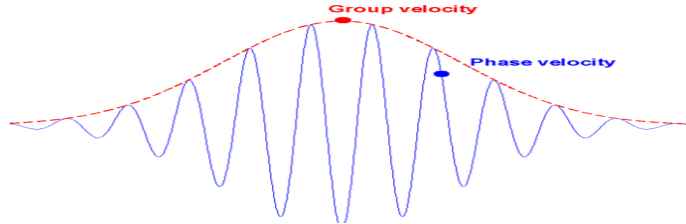
Lema

Sea $\psi(x, t)$ una función suave, en el sentido de tener primera derivada espacial y temporal, entonces $\psi(x, t)$ satisface la ecuación de Schrödinger en el sentido clásico si y solo si $\psi(x, t)$ satisface la ecuación de Schrödinger en el sentido débil.

Demostración

Qué es un Paquete de Ondas?

Las componentes de un paquete de ondas se mueven a distintas velocidades. Es útil pensar que éstas varían en el tiempo y en el espacio.



Por un lado, la velocidad a la cual la parte externa (la cobertura) se propaga en el espacio se conoce como velocidad de grupo y queda determinada por $A(x, t)$. Por otro lado, la rapidez a la cual las ondas individuales dentro de la cobertura se mueven se conoce como velocidad fase y queda determinada por $\theta(x, t)$.

Paquete de ondas como Condición Inicial

Supongamos que la fase de onda inicial es $\theta(x, 0) = (p_0 x)/\hbar$, debido a que el momento inicial de la partícula es p_0 , y que para $t = 0$ la amplitud inicial es $A_0(x)$, tendremos el Problema de Valor Inicial siguiente:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0, \\ \psi(x, 0) = \psi_0(x) = A_0(x)e^{ip_0 x/\hbar}, \quad x \in \mathbb{R}. \end{array} \right. \quad (4)$$

donde $|\psi_0(x)| \leq A_0(x) \quad \forall x \in \mathbb{R}$, es decir, $A_0(x)$ envuelve al paquete de ondas.

Solución del Paquete de ondas como Condición Inicial

Teorema

La solución del PVI (4) con condición inicial $\theta(x, 0) = p_0 x / \hbar$ y $A(x, 0) = A_0(x)$ está dado por:

$$\begin{aligned}\theta(x, t) &= \frac{p_0}{\hbar} \left(x - \frac{p_0}{2m} t \right), \\ A(x, t) &= A_0 \left(x - \frac{p_0}{m} t \right),\end{aligned}$$

las cuáles dan como solución a la Ecuación Libre de Schrödinger el paquete de ondas:

$$\psi(x, t) = A_0 \left(x - \frac{p_0}{m} t \right) \exp \left[i \frac{p_0}{\hbar} \left(x - \frac{p_0}{2m} t \right) \right]. \quad (5)$$

Slowly Varying Envelope Approximation

El paquete de ondas $A_o(x)$ es una función que varía lentamente respecto al espacio, es decir, se debe satisfacer que la razón de crecimiento de la curva de la amplitud sea de magnitud más pequeña que una constante veces la altura de la amplitud. En notación matemática

$$A_0''(\kappa) \ll A_0(\kappa) \left(\frac{p_0}{\hbar} \right)^2,$$

Físicamente, el paquete de ondas inicial debe tener crestas chatas para que sea constante sobre los periodos de la función $e^{ip_0x/\hbar}$.

Ecuación Independiente del Tiempo

- ▶ Derivación a partir del caso dependiente del tiempo
- ▶ Pozo Infinito
- ▶ Pozo Finito
- ▶ Tunelaje Cuántico

Proponemos como solución de (1) a

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

por el método de separación de variables y después de una serie de operaciones algebraicas llegamos a

$$i\hbar \frac{T'(t)}{T(t)} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\Psi''(x)}{\Psi(x)} + \mathcal{V}(x),$$

donde notamos que si variamos x el lado dependiente del término t no varía y viceversa. Por lo que, estos términos son iguales a alguna constante $E \in \mathbb{R}$, así

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\Psi''(x)}{\Psi(x)} + \mathcal{V}(x) = E \implies \hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x), \quad (6)$$

donde $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \mathcal{V}(x)$ se conoce como el *Hamiltoniano*.

Pozo Infinito

Consideramos el caso de confinar a una partícula en un intervalo finito $[0, A]$ con A un valor fijo, para esto, pedimos que la energía potencial en este intervalo sea nula.

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \in [0, A], \\ \kappa, & x \notin [0, A], \end{cases}$$

donde κ toma valores muy grandes, es decir, $\kappa \rightarrow \infty$. Además, pedimos $\Psi(x) = 0$ en las fronteras, para que la partícula no escape de la región. Así, tendremos

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -k^2\Psi(x), \quad (7)$$

con $k^2 = (2mE)/\hbar^2$ y $E > 0$.

La solución general de la ecuación (7) es una combinación lineal de senos y cosenos

$$\Psi(x) = a(kx) + b \cos(kx),$$

donde k, a, b son constantes a determinar. Así al encontrar k_n podemos encontrar los autovalores E_n asociados al Hamiltoniano

$$k_n = \frac{n\pi}{A}, E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mA^2}, n \in \mathbb{N}.$$

y al considerar los modos asociados a la partícula, llegamos a la solución dependiente de la posición

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{A}} \left(\frac{n\pi x}{A} \right), n \in \mathbb{N}, \quad (8)$$

Pozo Finito

Tomando una región par $[-A, A]$ porque nos permite obtener soluciones pares e impares. Consideramos la energía potencial dentro de esta región es de la siguiente forma

$$V(x) = \begin{cases} -C, & x \in [-A, A], \\ 0, & x \notin [-A, A], \end{cases} \quad (9)$$

donde C es positiva. Así, recordando (6) tenemos

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \begin{cases} -(c - \mathcal{E})\Psi, & |x| \leq A, \\ \mathcal{E}\Psi, & |x| > A. \end{cases} \quad (10)$$

donde consideramos los siguientes términos $\mathcal{E} = (-2mE)/\hbar^2$, $c = (2mC)/\hbar^2$ y $E < 0$

Solución Par

Para el comportamiento de la partícula fuera y dentro del pozo, tenemos las siguientes ecuaciones respectivamente

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \mathcal{E}\Psi, \quad \frac{d^2\Psi}{dx^2} = -q^2\Psi,$$

cuya solución general es

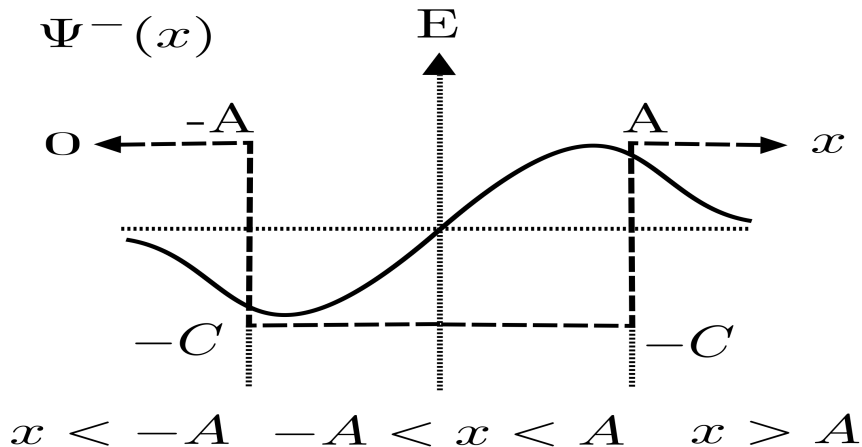
$$\Psi(x) = \begin{cases} ae^{\sqrt{\mathcal{E}}x}, & x < -A, \\ b \cos(qx), & |x| \leq A, \\ ae^{-\sqrt{\mathcal{E}}x}, & x > A, \end{cases} \quad (11)$$

con a, b constantes a determinar. Notamos que los parámetros a, b, \mathcal{E} , y q varían la forma de la onda. Por ejemplo, mientras mayor sea q mayor será el número de crestas y mientras menor sea \mathcal{E} mayor será el área abarcada por las colas de la función.

Solución Impar

Buscamos que $\Psi(x) = -\Psi(-x)$, es decir, funciones impares. Así,

$$\Psi(x) = \begin{cases} -ae^{\sqrt{\mathcal{E}}x}, & x < -A, \\ \tilde{a}(qx), & |x| \leq A, \\ ae^{-\sqrt{\mathcal{E}}x}, & x > A. \end{cases} \quad (12)$$



Tunelaje Cuántico

En este caso $E > 0$, así $\mathcal{E} = 2mE/\hbar^2$, la ecuación de interés es:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \begin{cases} -\mathcal{E}\Psi, & x \in (-\infty, -A) \cup (A, \infty), \\ -(c + \mathcal{E})\Psi & |x| \leq A. \end{cases} \quad (13)$$

con correspondiente solución:

$$\Psi(x) = \begin{cases} Me^{i\sqrt{\mathcal{E}}x} + Be^{-i\sqrt{\mathcal{E}}x}, & x < -A, \\ T(qx) + D \cos(qx), & x \in [-A, A], \\ Fe^{i\sqrt{\mathcal{E}}x}, & x > A. \end{cases} \quad (14)$$

donde al buscar que $\Psi(x)$ y $\Psi'(x)$ sean continuas en los límites de la región $\pm A$, obtendremos un sistema de ecuaciones para determinar las constantes M, B, T, D y F .

Al resolver el sistema de ecuaciones anteriores, obtenemos el valor del coeficiente de Reflexión \mathcal{R}

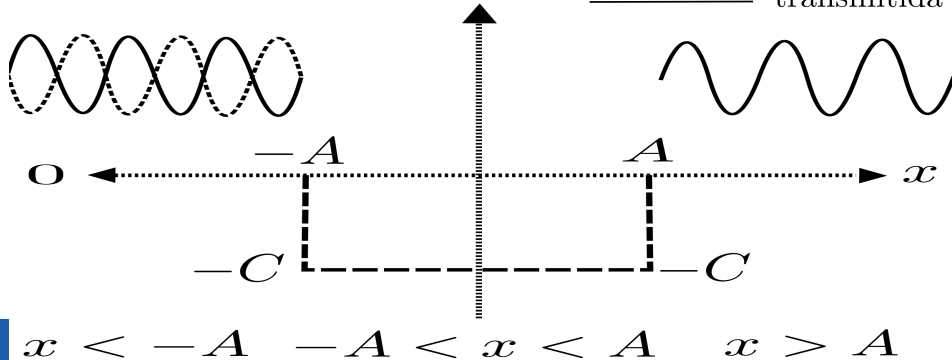
$$\mathcal{R}(E) = \left[\frac{C^2}{4(C+E)E} \right]^2 (2qA) \frac{|F|^2}{|M|^2}.$$

y del coeficiente de Transmisión \mathcal{T}

$$\mathcal{T}(E) = \left[1 + \left(\frac{C^2}{4(C+E)E} \right)^2 (2qA) \right]^{-1}.$$

Partícula reflejada

Trayectoria de una partícula transmitida



El Operador de Schrödinger

- ▶ Espacio de Hilbert
- ▶ Operador Lineal y Autoadjunto
- ▶ Dominio de la suma de Operadores
- ▶ Operador Laplaciano y Potencial
- ▶ Teorema de Kato-Rellich
- ▶ Generalizaciones de la Función Potencial $\mathcal{V}(x)$

¿Qué es un Operador?

Un mapeo entre dos espacios de funciones. En otras palabras, es una aplicación que toma como entrada una función (un *vector*) en un espacio de dimensión infinita, y le asigna otra función en un espacio de dimensión infinita.

Definición (Espacio de Hilbert)

Un **espacio de Hilbert** \mathcal{H} es un espacio vectorial \mathcal{H} sobre un campo \mathbb{R} ó \mathbb{C} equipado con un **producto interno** $\langle \cdot, \cdot \rangle$, tal que \mathcal{H} es completo, en el sentido que cada sucesión de Cauchy converge en este espacio, bajo la norma asociada al producto interno.

Operador Lineal

Definición

Sea \mathcal{H} un espacio de Hilbert. El mapeo $A : \text{Dom}(A) \subseteq \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$, donde $\text{Dom}(A)$ es un subespacio denso de \mathcal{H} , es un **operador lineal** si dados $\phi, \Psi \in \text{Dom}(A)$ se cumplen que

$$A(\alpha\phi + \beta\Psi) = \alpha A\phi + \beta A\Psi,$$

$\forall \alpha, \beta$ constantes arbitrarias (notése que $\alpha\phi + \beta\Psi \in \text{Dom}(A)$ al ser un subespacio).

Definición (Operador Acotado)

Un operador lineal $T : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ es **acotado** si existe una constante $C > 0$ tal que $\|T\Psi\| \leq C\|\Psi\|$ para toda $\Psi \in \mathcal{H}$.

donde $\text{Dom}(A) = \mathcal{H}$.

Operador Autoadjunto

Recordamos que los operadores no-acotados A están definidos en un subespacio denso de \mathcal{H} . Equivalentemente su adjunto A^* está definido en un subespacio de \mathcal{H} , pues, el funcional $\langle \phi, A\psi \rangle$, (con $\psi \in \text{Dom}(A)$), puede no estar acotado para cualquier $\phi \in \mathcal{H}$. De esta forma, una vez que el funcional está acotado, por el Lema de Riesz vemos para que vectores $\phi \in \mathcal{H}$ existe el adjunto A^* .

Definición

Un operador lineal A no-acotado en \mathcal{H} es **auto-adjunto** si

$$\text{Dom}(A^*) = \text{Dom}(A), \quad (15)$$

y $A^*\phi = A\phi$ para toda $\phi \in \text{Dom}(A)$.

Definición (Dominio de la suma de Operadores)

Sean A, B dos operadores lineales no-acotados en \mathcal{H} , entonces $A+B$ es el operador con dominio:

$$\text{Dom}(A + B) := \text{Dom}(A) \cap \text{Dom}(B) \quad (16)$$

y dado por $(A + B)\Psi = A\Psi + B\Psi$.

Definición (Espectro Puntual)

Sea A un operador lineal no-acotado en \mathcal{H} y $\lambda \in \mathbb{C}$. Cuando para $\phi \in \mathcal{H}$ con $\phi \neq 0$ se cumple que

$$(A - \lambda I)\phi = 0,$$

entonces λ está en el **espectro puntual**. Cuando $\Psi \neq 0$ y $\lambda \in \mathbb{C}$ satisfacen la relación $A\Psi = \lambda\Psi$ entonces decimos que Ψ es un autovector de A y λ un autovalor de A .

El Operador de Schrödinger $-\Delta + V$

Proposición (Operador Laplaciano)

Sea Δ el operador laplaciano definido como

$$-\Delta \psi = \mathcal{F}^{-1}(|k|^2 \hat{\psi}),$$

en el dominio:

$$\text{Dom}(\Delta) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \mid |k|^2 \hat{\psi}(k) \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})\},$$

donde $\hat{\psi}$ es la Transformada de Fourier de ψ y \mathcal{F}^{-1} denota la Transformada Inversa de Fourier. Entonces Δ es auto-adjunto.

Operador Potencial

Proposición (Operador Potencial)

Sea $\mathcal{V} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ una función integrable de $x \in \mathbb{R}$. Sea V el operador potencial con dominio:

$$\text{Dom}(V) = \{\Psi \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \mid \mathcal{V}(x)\Psi(x) \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})\}$$

y definido como:

$$V[\Psi](x) = \mathcal{V}(x)\Psi(x).$$

Entonces $\text{Dom}(V)$ es denso en $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ en el sentido de que la cerradura del dominio de V es $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$, y V es auto-adjunto en este dominio.

Teorema de Kato-Rellich

Al considerar el operador de Schrödinger $\hat{H} = \Delta + V$, sabemos por la Definición (16) que $Dom(\Delta) \cap Dom(V)$ es el subespacio en el cual \hat{H} está definido. Sin embargo, esta intersección puede ser muy pequeña para que \hat{H} sea auto-adjunto, por ejemplo, si el vector nulo es el único elemento. De esta forma, la pregunta natural es ¿bajo qué condiciones garantizo que la suma de dos operadores no-acotados sea auto-adjunta?

Teorema

Sean A y B operadores lineales auto-adjuntos no-acotados en \mathcal{H} . Supongamos que $Dom(A) \subset Dom(B)$ y que existen constantes positivas a, b con $a < 1$ tal que

$$||B\Psi|| \leq a||A\Psi|| + b||\Psi||$$

para toda $\Psi \in Dom(A)$, entonces $A+B$ es auto-adjunto en el $Dom(A)$.

Self-Adjointness of Schrödinger Operator

Anteriormente hemos visto el caso del pozo cuadrado, donde $\mathcal{V}(x)$ era una función constante dentro de un intervalo. Generalizemos ahora el estudio al considerar a \mathcal{V} como una función que se puede descomponer como la suma de una función integrable cuadráticamente y otra acotada.

Teorema

Sea $\mathcal{V} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ una función integrable que puede expresarse como la suma de dos funciones reales V_1 y V_2 , con $V_1 \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ y $V_2 \in L^\infty(\mathbb{R}, \mathbb{C})$. Entonces el operador de Schrödinger $-\hbar^2 \Delta / 2m + V$ es auto-adjunto en $\text{Dom}(\Delta)$.

El resultado anterior nos permite generalizar distintos casos de la función $\mathcal{V}(x)$, garantizando que el operador es auto-adjunto y por lo tanto su espectro es real.