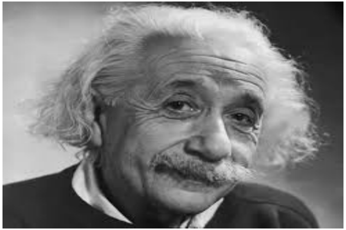
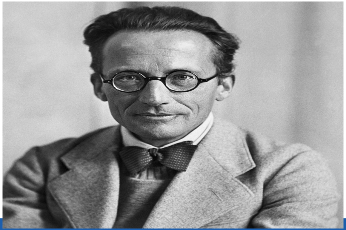
Una interpretación matemática de la Ecuación de Schrödinger

Armando Miguel Trejo Marrufo

- ¿Antecedentes? Dualidad onda-partícula $\Longrightarrow$ Louis de Broglie y Albert Einstein.



- ¿Cual es su importancia? Dinámica $\Longrightarrow$ describir la evolución de la función de onda en el tiempo.



Ecuación Dependiente del Tiempo

- La dependencia del tiempo
- 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

La ecuación de Schrödinger representa el movimiento de la partícula en el tiempo:

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

Primero modelar una **partícula líbre** necesitamos

$$\mathcal{V}(x,t) = 0$$

y la condición inicial

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

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

El problema de valor inicial (PVI) a resolver es:

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

Teorema

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

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

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

- ¿$\psi(x,t)$ es diferenciable en las variables x, t? $\implies$ **funciones de prueba**

Definición

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

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

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

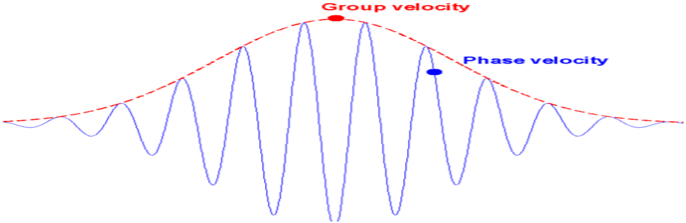
Soluciones Débiles de la Ecuación de Schrödinger

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.*

¿Qué es un Paquete de Ondas?

¿Las componentes de un paquete de ondas varían en el tiempo y en el espacio?



- Velocidad de Grupo $\implies A(x,t)$
- Velocidad de Fase $\implies \theta(x,t)$

Paquete de ondas como Condición Inicial

- La fase de onda inicial es $\theta(x,0) = (p_0 x)/\hbar$
- La amplitud inicial es $A_0(x)$

El PVI que resolvemos es

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \psi}{\partial t} = \dfrac{i\hbar}{2m}\dfrac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, \; x \in \mathbb{R}, \; t > 0, \\ \psi(x,0) = \psi_0(x) = A_0(x) e^{ip_0 x/h}, \; x \in \mathbb{R}. \end{cases} \tag{4}$$

donde $|\psi_0(x)| \leq A_0(x) \;\; \forall x \in \mathbb{R}$, 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:*

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

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

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

Slowly Varying Envelope Approximation

- El paquete de ondas $A_o(x)$ tiene crestas chatas $\implies$ constante sobre los periodos de la función $e^{ip_0 x/\hbar}$

- En notación Matemática

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

Ecuación Independiente del Tiempo

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

Recordamos la Ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + \mathcal{V}(x,t)\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}. \tag{6}$$

¿Cómo obtener el caso dependiente del tiempo? $\implies$ **separación de variables**

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

Así, la ecuación dependiente del tiempo es

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) + \mathcal{V}(x)\Psi(x) = E\Psi(x), \tag{7}$$

donde $E \in \mathbb{R}$

Pozo Infinito

¿Qué sucede cuando confinamos a una partícula a una región finita?
Requerimos

- Energía potencial muy grande

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

  donde A es un valor fijo.
- La partícula no escape de la región, es decir, $\Psi(x) = 0$.
- Modelar el comportamiento a través de

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -(2mE)/\hbar^2\Psi(x), \tag{8}$$

¿Cuál es la solución general? $\implies$ combinación lineal de senos y cosenos

$$\Psi(x) = a\,\mathrm{sen}(kx) + b\cos(kx),$$

donde encontrar los modos k_n asociados a la partícula nos permite encontrar la energía E_n asociada

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

con lo cual la solución dependiente de la posición es

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{A}}\,\mathrm{sen}\left(\frac{n\pi x}{A}\right), n \in \mathbb{N}, \tag{9}$$

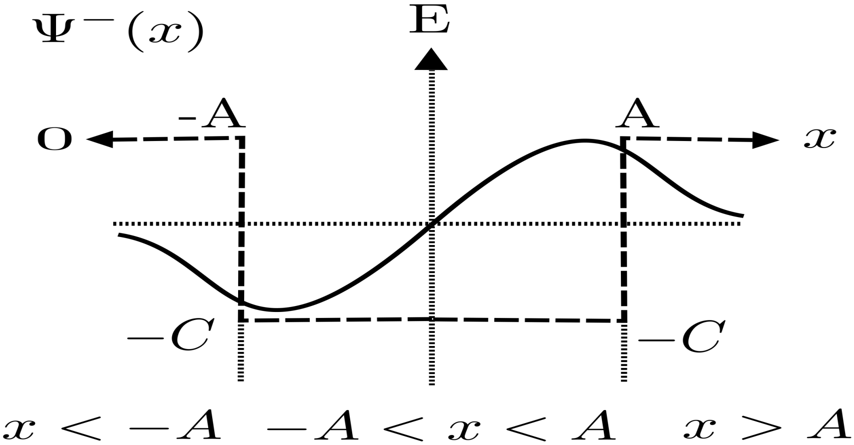
Pozo Finito

¿Qué sucede si la energía potencial es finita?, es decir

$$\mathcal{V}(x) = \begin{cases} -C, & x \in [-A, A], \\ 0, & x \notin [-A, A], \end{cases} \tag{10}$$

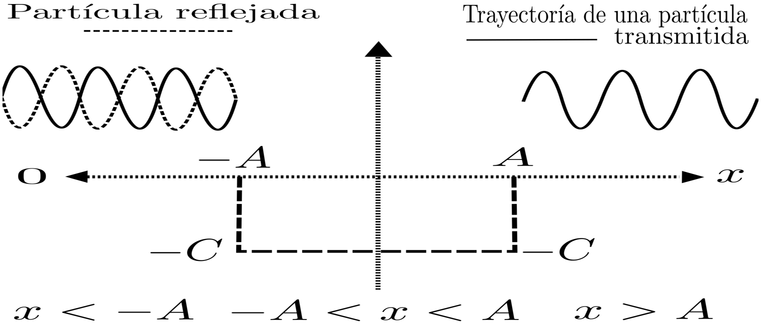
con $C > 0$. Obtendremos soluciones pares e impares

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



Notamos que los parámetros $a, b, \mathcal{E}$, y q varían la forma de la onda.

Tunelaje Cuántico



¿Cómo se determinan estos eventos?

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

El Operador de Schrödinger

- 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?

Es un mapeo entre dos espacios de funciones

¿Qué propiedades buscamos?

- Lineal $\implies A(\alpha\phi + \beta\Psi) = \alpha A\phi + \beta A\Psi$
- Acotado $\implies ||T\Psi|| \leq C||\Psi||$
- Autoadjunto $\implies A^*\phi = A\phi$ para toda $\phi \in Dom(A)$.

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:

$$Dom(A+B) := Dom(A) \cap Dom(B) \tag{11}$$

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 $-\Delta + V$

- Sea el operador Laplaciano $-\Delta\Psi = \mathcal{F}^{-1}(|k|^2\hat{\Psi})$ con correspondiente dominio

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

- Sea el operador Potencial V es autoadjunto con correspondiente dominio

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

¿Bajo qué condiciones garantizo que la suma de dos operadores no-acotados sea auto-adjunta?

Teorema (Kato-Rellich)

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 $Dom(A)$.

¿El operador de Schrödinger es autoadjunto?

¿Qué sucede cuando $\mathcal{V}(x)$ no es una función constante?

Por ejemplo, una función definida a trozos

$$\mathcal{V}(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{|x|}, & x \in (-\infty, \alpha) \cup (\alpha, \infty), \\ \dfrac{1}{\alpha}, & x \in [-\alpha, \alpha], \end{cases}$$

donde $\alpha > 0$ es un valor dado.

Teorema

Sea $\mathcal{V} : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ 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 $Dom(\Delta)$.