En la carpeta que te he dado está el plan sobre el trabajo. Por favor léetelo. Pongo también un documento sobre la ecuación de Schrödinger que, salvo pequeñas modificaciones, es una sección de [Cha13] y un artículo largo que también puedes encontrar en mi página [Cha15]. Mi motivación para escribirlo fue dar a conocer algunas cosas de física cuántica para gente que sabe matemáticas a un nivel universitario pero no necesariamente física. Por ello creo que es un buen punto de partida para tu trabajo, además de que está en español como tú preferías. Te he pasado una copia impresa de ambos documentos porque te voy a pedir que leas algunas secciones y creo que es más cómodo que lo tengas en papel. Recuerda que las versiones electrónicas las puedes descargar de mi página. Si encuentras posibles erratas o errores, por favor no dejes de hacérmelo notar.

Ya te comenté que voy a dirigir dos trabajos de fin grado en temas que originalmente correspondían al mismo título y que te he asignado a ti la parte que físicamente corresponde a que no haya espín. En concreto, mi intención es que veamos varias soluciones importantes de la ecuación de Schrödinger y entendamos su significado. Yo creo que eso ya da para hacer un buen trabajo y hay algunos temas adicionales que tengo en mente para añadir si nos da tiempo que lo harían aún mejor. No veremos la ecuación de Dirac a no ser que tengas mucho interés porque está relacionada con el espín. En la "propuesta de temario" puedes leer los epígrafes que he seleccionado. Posiblemente ninguno te suene demasiado o nada. No te preocupes que no tienes que saber nada de antemano.

Necesariamente tienes que aprender un poquito de las bases de la física cuántica y eso puede costarte un poco si no lo has visto antes. No queda más remedio que empezar por ahí porque es lo que da sentido a las soluciones que estudiaremos. En pocas palabras, lo que ocurrió históricamente es que a principios del siglo XX hubo primeros unos pasos un poco caóticos y a veces no muy fundamentados hasta que Schrödinger escribió su ecuación [Sch26] que ofrecía una manera matemática rigurosa de hacer los cálculos y explicaba por ejemplo por qué los niveles de energía del átomo de hidrógeno eran los que eran. Casi simultáneamente se empezó a gestar la llamada interpretación de Copenhague, que es la interpretación "oficial" de la mecánica cuántica. Es algo bastante raro (tanto que ni Einstein ni Schrödinger se la creyeron en toda su vida y ambos fallecieron unos 30 años después de su introducción). En esta hoja vamos a evitar este punto. El propósito principal es ver algunas ideas básicas y tener una idea acerca del origen de la ecuación de Schrödinger. Por cierto, si tienes interés en la historia inicial de la física cuántica o simplemente quieres tomar datos para tu trabajo, te recomiendo [SR05]. También te aviso de que en los libros populares de divulgación de física, la historia a menudo está muy desvirtuada, no te fíes mucho de ellos.

En el resto de esta hoja te voy a ir explicando algunas de las ideas básicas al tiempo que te recomiendo lecturas y te propongo ejercicios.

El título del artículo de Schrödinger es muy representativo de las ideas que estaban en el ambiente y que él materializó en su ecuación: "Una teoría ondulatoria de la mecánica de átomos y moléculas". Por diversas razones a principios del siglo XX se comenzó a pensar que las partículas en realidad eran ondas muy concentradas, pulsos que a nivel subatómico oscilaban mucho. Antes de nada, veamos un ejemplo matemático sencillo introduciendo la siguiente función (escribo siempre "sin" para el seno) que tiene similitudes con las ondas que aparecen en física cuántica:

$$u(x,t) = \Big(\frac{\sin(40x-30t)}{\sin(4x-3t)}\Big)^2\big(1+\cos(800x)\big).$$

1) Pinta su gráfica con un ordenador (por ejemplo con SAGE) para $x \in [-\pi/8, \pi/8]$ y algunos valores de t, por ejemplo algunos múltiplos de 0,15.

2) Habrás comprobado que según avanza t, la gráfica se traslada hacia la derecha. ¿Con qué velocidad?

3) ¿Qué habría que hacer para que estuviera todavía más concentrada conservando su velocidad? ¿Y cómo harías que fuera más deprisa o más despacio? Te sugiero que compruebes tus respuestas con el ordenador.

Las ondas asociadas a partículas, o a sistemas físicos en general, se llaman *funciones de onda* y una notación típica es $\Psi(\vec{x},t)$ con $\vec{x}=(x,y,z)$ el espacio y t el tiempo. Muchas veces se considera para simplificar el caso unidimensional, como si la partícula sólo fuera en una dirección, entonces se pone x en lugar de $\vec{x}$. Una cosa un poco llamativa al principio es que las funciones de ondas que se consideran desde los principios de la mecánica cuántica son complejas. Grosso modo eso es simplemente para no tener que separar senos y cosenos usando e^{ix} y lo mismo ya sabes que también se hace en el análisis de Fourier con el mismo fin. Como veremos, la cantidad física que se mide es $|\Psi|^2$, que es real, entonces no hay que darle más importancia a los números complejos de la que tienen. Cuando es posible, se suele multiplicar Ψ por una constante para que cumpla $\int_{\mathbb{R}^3}|\Psi|^2 dxdydz = 1$.

Por decir algo concreto, con cálculos que veremos en su momento, el electrón del átomo de hidrógeno en su estado fundamental tiene la función de onda (con x, y, z en metros y t en segundos)

$$\Psi(\vec{x},t) = \frac{a^{3/2}}{\sqrt{\pi}}e^{-a\sqrt{x^2+y^2+z^2}+ibt} \qquad \text{donde} \quad a = 1{,}8897\cdot 10^{10} \quad \text{y} \quad b = 2{,}0671\cdot 10^{16}$$

4) ¿En qué tamaño dirías que está aproximadamente concentrada esta función de onda? Estudia si se cumple $\int_{\mathbb{R}^3}|\Psi|^2 dxdydz = 1$.

De acuerdo, nos podemos creer que las partículas son ondas tan concentradas que sólo vemos su naturaleza oscilante a niveles subatómicos pero entonces la fórmula $\vec{F} = m\vec{a}$ y cosas por el estilo que servían para estudiar la mecánica de las partículas no parecen muy aplicables en este nuevo contexto, hay que inventar una nueva fórmula. Ésa es la famosa *ecuación de Schrödinger* que para una partícula en un campo de potencial V tiene esta pinta tan fea:

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

Esto del potencial (la energía potencial) si se quiere relacionar con la fuerza, es algo que cumple $\vec{F} = -\nabla V$. La $\hbar$ es la constante de Planck normalizada ($= h/2\pi$) y tiene un valor pequeñísimo en el sistema de unidades habitual: $1{,}0546 \cdot 10^{-34} Js$. Es importante que sea pequeño pero cuando se tiene un poco de soltura, uno se inventa otras unidades (llamadas de Planck) en las que $\hbar = 1$, e incluso se podrían reescalar las cosas para que $m = 1/2$, por eso la ecuación aparece a veces en libros de matemáticas como $i\partial\Psi/\partial t = -\Delta\Psi + V\Psi$. Nosotros no lo haremos aquí porque estos cambios de escala requieren cierta práctica. Por supuesto, la versión en una dimensión espacial es

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

Muchos cálculos de tu trabajo la haremos con ella.

Sobre todo en los libros más formalistas, se dice que la ecuación de Schrödinger (en una forma un poco más general que la anterior) es un axioma de la mecánica cuántica, es decir, algo que uno se cree y no se deduce, pero claramente una ecuación tan rara tuvo que salir de algún sitio.

Una explicación rápida (sólo intenta que te suene bien) es que por diversos experimentos se sabía que las "ondas puras" correspondientes a momento p (masa por velocidad) y energía E eran de la forma $e^{i(px-Et)/\hbar}$ que al sustituir en la ecuación de Schrodinger da

$$Ee^{i(px-Et)/\hbar} = \frac{p^2}{2m}e^{i(px-Et)/\hbar} + Ve^{i(px-Et)/\hbar} \qquad \Leftrightarrow \qquad E = \frac{p^2}{2m} + V$$

y esto es verdad porque $p^2/2m = \frac{1}{2}mv^2 =$ energía cinética y cuando se le suma la energía potencial da la energía total. Las funciones de onda son combinaciones lineales de estas ondas puras y como la ecuación de Schrodinger es lineal, también deben cumplirla.

5) Lee las secciones §1.1 y §1.2 de mis notas [Cha15] (el artículo largo en las fotocopias) y después §3.3 sólo hasta el primer párrafo de la p. 47.

6) [Muy fácil pero para ver si lo entiendes] Considera el ejemplo calculado en §1.2 ¿Cuál es el potencial en $0 < x < 1$ de la ecuación de Schrodinger que satisface?

7) [También muy fácil] ¿Qué significa eso de que la ecuación de Schrodinger es lineal?

Antes de seguir vamos a ver una cosa curiosa: Si nos dan la fuerza, la energía potencial está sólo definida salvo una constate aditiva porque $\vec{F} = -\nabla V = -\nabla(V + \text{cte})$ pero la ecuación de Schrödinger no va a tener la misma solución al cambiar V por $V + \text{cte}$. ¿No es esto contradictorio?

8) Digamos que Ψ cumple la ecuación de Schrödinger para cierto potencial V, comprueba que $\widetilde{\Psi} = e^{iAt}\Psi$ con $A \in \mathbb{R}$ resuelve la ecuación de Schrödinger para un potencial $\widetilde{V}$. ¿Qué relación hay entre ambos? ¿Por qué V y $V + \text{cte}$ llevan a la misma física? Recuerda que hemos dicho que lo que se mide es $|\Psi|^2$.

Antes de seguir vamos completar un poco lo que ya has leído.

9) Lee las secciones §1.3 y §1.4.

La justificación anterior de la ecuación de Schrödinger es más débil que la que usó originalmente Schrödinger. Desde el siglo XIX se sabía que la ecuación de ondas para altas frecuencias degenera en otra ecuación cuyas soluciones son "rayos". Por ejemplo, esa aproximación funciona en óptica (la luz visible tiene una frecuencia del orden de $5 \cdot 10^{14}$ oscilaciones por segundo). Un láser en principio es una onda electromagnética pero no tiene mucha pinta de onda sino de trayectoria rectilínea como la que seguiría una partícula en ausencia de fuerzas. También explicamos la reflexión en un espejo o el comportamiento de las lentes de manera sencilla con rayos de luz, no con ondas. En cierto modo, Schrödinger se preguntó qué ecuación tendría que poner en lugar de la de ondas para que con altas frecuencias degenerase esencialmente en $\vec{F} = m\vec{a}$. Esto es lo que se atisba en el original [Sch26] entre muchas parrafadas y pocas fórmulas pero para seguir este razonamiento hay que meterse en la formulación de Hamilton-Jacobi de la mecánica y eso no lo vamos a hacer aquí. En el documento corto que te adjunto, cuento una versión muy simplificada (que deriva de [GP78]) que no necesita conocimientos sobre esa formulación y que se acerca al modo de proceder original.

10) Lee las páginas 1–4 de "Consideraciones muy básicas sobre la ecuación de Schrödinger".

Ya sé que lo primero te resultará un poco repetitivo pero te vendrá bien haberlo leído por dos sitios.

Como tema complementario, sin entrar en detalles, te propongo un ejercicio sobre la relación entre la *ecuación de ondas* de velocidad constante v_0, que casi seguro que conoces,

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = v_0^2 \Delta u \qquad u = u(\vec{x}, t),$$

y la *ecuación eikonal* que regula los rayos, que casi seguro que no conoces

$$\Big(\frac{\partial \phi}{\partial t}\Big)^2 = v_0^2 |\nabla \phi|^2 \qquad \phi = \phi(\vec{x}, t).$$

Supongamos que tenemos una onda de amplitud A y fase ϕ, es decir, algo de la forma $u(\vec{x},t) = A(\vec{x},t)e^{i\phi(\vec{x},t)}$. Para que oscile mucho vamos a suponer $\phi(\vec{x},t) = \Lambda\Phi(\vec{x},t)$ con Λ una constante gigantesca, que después haremos tender a infinito. Está claro, sólo pensando en las cuentas (¿lo ves?), que

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2} & = \mathsf{algo}_0 + \mathsf{algo}_1\Lambda + \mathsf{algo}_2\Lambda^2 \\ \Delta u & = \mathsf{algo}'_0 + \mathsf{algo}'_1\Lambda + \mathsf{algo}'_2\Lambda^2 \end{cases}$$

11) Considerando $\lim_{\Lambda\to\infty} \Lambda^{-2}\big(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - v_0^2\Delta u\big)$, prueba que si u satisface la ecuación de ondas entonces $\mathsf{algo}_2 = \mathsf{algo}'_2$. Calcula y simplifica esta ecuación para obtener la ecuación eikonal.

Los ejercicios que te he puesto hasta ahora son para que leas cosas y para que te entrenes. Si tienes dudas me puedes preguntar pero no hace falta que me los mandes escritos en limpio. El único ejercicio que tienes que entregarme es el siguiente:

12) Con lo que has aprendido, redacta con tus palabras algo que pueda ir en la sección 2 de la propuesta de temario: "Orígenes de la ecuación de Schrödinger". Debe incluir al menos las dos formas que hemos visto de deducir la ecuación de Schrödinger. Quizá cuando lo escribas es imposible evitar incluir algunas ideas básicas que irán en el apartado uno. No te preocupes, ya lo separaremos o juntamos los dos apartados. Algunos de los ejercicios que has resuelto antes podrías incluirlos como ilustración.

Referencias

[Cha13] F. Chamizo. Aplicaciones del análisis armónico. `http://www.uam.es/fernando.chamizo/libreria/`, 2012/13.

[Cha15] F. Chamizo. Un poco de física cuántica para chicos listos de primero (del grado de física o matemáticas). `http://www.uam.es/fernando.chamizo/physics/physics.html`, 2015.

[GP78] A. Galindo and P. Pascual. *Mecánica cuántica.* Alhambra, Madrid, 1978.

[Sch26] E. Schrödinger. An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. *Phys. Rev.*, 28:1049–1070, Dec 1926.

[SR05] J. M. Sánchez-Ron. *Historia de la física cuántica. vol. 1: El periodo fundacional (1860-1926).* Drakontos. Crítica, D.L.2001, Barcelona, 2005.