En esta hoja vamos a resolver la ecuación de Schrödinger en el caso de una dimensión con $V = 0$. Recuerda que potencial nulo implica que no hay fuerzas y por eso se dice que corresponde a la *partícula libre*. En la propuesta de temario, corresponde al punto 4. Ya sé que que nos hemos saltado el 3. Creo que ver primero algún ejemplo, como el que analizamos aquí, te hará entender las propiedades con alguna perpectiva.

Antes de nada, tienes que saber un poco de la transformada de Fourier. Seguramente ya te haya aparecido en algún curso. Si no es así, no te preocupes que no daré nada por sabido. La *transformada de Fourier* de una función de variable real se define como

$$\widehat{f}(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-2\pi i x\xi}\, dx.$$

Aquí, como en todo tu trabajo, supondremos que las funciones que aparecen en las integrales son suficientemente buenas como para que tengan sentido. Es decir, no nos detendremos en dar hipótesis que aseguren la convergencia o regularidad, la supondremos.

La propiedad fundamental de la transformada de Fourier es la *fórmula de inversión*

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{f}(\xi) e^{2\pi i \xi x}\, d\xi.$$

Con ello hemos expresado f como una superposición, una integral, de “ondas puras” $e^{2\pi i\xi x}$ de frecuencia ξ poniéndolas amplitud $\widehat{f}(\xi)$. Cuando $\widehat{f}(\xi)$ está muy concentrada cerca de cierto valor, es que la f tiene mucho de esas frecuencias. Si conoces el desarrollo de Fourier de funciones periódicas, $f(x) = \sum a_n e^{2\pi i n x}$, es una extensión donde las frecuencias no son dicretas (los enteros) sino continuas (los reales).

1) Prueba las propiedades (siempre sin preocuparte de la convergencia: suponiendo que f, g y $f^{(k)}$ decaen a cero tan rápido como necesites para poder integrar)

$$(2\pi i\xi)^k \widehat{f}(\xi) = \widehat{f^{(k)}}(\xi) \qquad \text{y} \qquad (f * g)\widehat{\ } = \widehat{f}\,\widehat{g}.$$

donde $(f * g)(x)$ es la *convolución* $\int_{\mathbb{R}} f(t) g(x-t)\, dt$.

La primera propiedad permite pasar de derivadas a productos, lo cual se utiliza algunas veces para resolver ecuaciones diferenciales, como veremos más adelante. Hay otra propiedad que conviene que sepas, es la identidad de Parseval:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \bar{f} g = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\widehat{f}}\,\widehat{g}.$$

Si tienes curiosidad, puedes ver la prueba en [DM72].

Vamos a calcular la transformada de Fourier de las gaussianas, concretamente veremos que

(1) $$f(x) = e^{-ax^2} \quad \Longrightarrow \quad \widehat{f}(\xi) = \sqrt{\frac{\pi}{a}}e^{-\pi^2\xi^2/a} \qquad \text{para } a > 0.$$

Para ello, primero debes saber que

(2) $$I := \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\, dx = \sqrt{\pi}.$$

Seguro que has visto una prueba alguna vez usando Cálculo II. Por si lo quieres poner en tu trabajo, te cuento una prueba rara con Cálculo I tomada de [Apo74].

2) [Opcional] Demuestra que la función $y(x) = \left(\int_0^x e^{-t^2}dt\right)^2 + \int_0^1 (1+t^2)^{-1}e^{-x^2(1+t^2)}\, dt$ satisface $y' = 0$ (para ello, deriva bajo el signo integral y después haz el cambio $t \mapsto t/x$). Concluye entonces $\frac{\pi}{4} = \arctan 1 = \int_0^1 \frac{1}{1+t^2}\, dt = y(0) = y(\infty) = I^2/4$.

3) Prueba que si $f(x) = e^{-ax^2}$, $y(\xi) = \widehat{f}(\xi)$ satisface la EDO

(3) $$\begin{cases} y' + 2\pi^2 a^{-1}\xi y = 0, \\ y(0) = I/\sqrt{a}. \end{cases}$$

Indicación: Para la ecuación, integra por partes en $y'(\xi) = -2\pi i \int_{\mathbb{R}} xe^{-ax^2}e^{-2\pi i x\xi}\, dx$ y para la condición inicial, haz un cambio de variable en (2).

4) Resuelve (3) (es de variables separables, la ξ es la x del curso de EDO) y deduce (1).

Una vez que ya has adquirido un poquito de experiencia con la transformada de Fourier, vamos con los ejercicios que te servirán para tu trabajo. Lo que escribas me lo tienes que entregar. Utiliza $\hbar$ en lugar de $h = 2\pi\hbar$ cuando lo redactes.

5) Lee en [Cha13b] la Proposición 1 hasta el final de su demostración. Supongo que sigues la notación, $e(x) = e^{2\pi i x}$ y el $\widehat{\ }$ que aparece dado la vuelta significa la transformada inversa, es decir, una función cuya transformada es la que te dan.

6) Escribe, para el trabajo, una explicación con tus palabras (quizá como una proposición, como prefieras) que pruebe que la solución de la ecuación de Schrödinger en una dimensión para la partícula libre ($V = 0$) viene dada por (7) y (9).

7) Ahora lee el caso del “paquete gaussiano”, que ocupa la mayor parte de las páginas 7 y 8 de [Cha13b]. Escríbelo con tus propias palabras. Soy consciente de que las cuentas no están muy detalladas y son un poco rollo. Tu misión es comprobarlas y escribirlas de la manera que te parezca más adecuada para entenderlas.

De acuerdo, hemos hecho un ejemplo y nos ha salido que a escala “normal” todo funciona como si el espacio fuera velocidad inicial por tiempo, como en el caso clásico. Lo que vamos a ver que esto es algo que tiene mayor generalidad. Bajo condiciones iniciales adecuadas, una solución con $V = 0$ de la ecuación de Schrödinger en primera aproximación se mueve en línea recta.

Para ello debes conocer la *aproximación de fase estacionaria* que da una buena aproximación de una integral oscilatoria. En un caso particular se puede enunciar como:

$$\int_{-\infty}^{\infty} A(x)e^{2\pi i\lambda P(x)}\,dx \sim \frac{A(x_0)}{\sqrt{\pm\lambda P''(x_0)}}e^{2\pi i(\lambda P(x_0)\pm 1/8)}$$

donde A es una función “buena” que decae en el infinito, P es un polinomio de segundo grado, x_0 el valor para el que $P'(x_0)$ y $\pm$ es el signo de $P'' = P''(x_0)$. La aproximación es buena cuando $\lambda \to +\infty$, ya que el error está acotado por $C\lambda^{-3/2}$, con C constante para A y P fijados.

La demostración no es muy difícil pero creo que sería cargarte de trabajo y puedes darlo por sabido. Si tienes curiosidad mira por ejemplo [Tao04] o [Cha13a, 2.2.1].

8) Imagina que ponemos de condición inicial en la ecuación de Schrödinger $\Psi(x,0) = B(x)e^{imv_0x/\hbar}$ donde $B(x)$ es una función concentrada alrededor del origen, $B \in C_0^\infty([-\delta,\delta])$. Aplica la aproximación de fase estacionaria a (9) con $\lambda = \hbar^{-1}$, la cual es adecuada porque $\hbar$ es muy pequeño. Explica el resultado obtenido e interprétalo como que la gráfica de B se mueve con velocidad v_0 por el eje X según t varía, al tiempo que oscila internamente. Escribe todo esto para completar lo anterior y así componer en total una sección sobre la partícula libre. Intenta que esta primera versión de la sección ocupe menos de 5 páginas.

Referencias

[Apo74] T. M. Apostol. *Mathematical analysis.* Addison-Wesley Publishing Co., Reading, Mass.-London-Don Mills, Ont., second edition, 1974.

[Cha13a] F. Chamizo. Aplicaciones del análisis armónico. `http://www.uam.es/fernando.chamizo/libreria/`, 2012/13.

[Cha13b] F. Chamizo. Consideraciones muy básicas sobre la ecuación de Schrödinger. `http://www.uam.es/fernando.chamizo/physics/physics.html`, 2012/13.

[DM72] H. Dym and H. P. McKean. *Fourier series and integrals.* Academic Press, New York, 1972. Probability and Mathematical Statistics, No. 14.

[Tao04] T. Tao. Lecture notes 8 for 247B. `http://www.math.ucla.edu/%7Etao/247b.1.07w/notes8.pdf`, 2004.