Una vez que has visto cómo van las cosas en el caso de la partícula libre, vamos a volver ahora a algunas propiedades teóricas de la ecuación de Schrödinger, el punto 3 de la propuesta de temario. El plan, es que después sigamos viendo en sucesivas hojas algunos ejemplos de soluciones explícitas y su interpretación, hasta culminar con el llamado "átomo de hidrógeno", que es más complicado.

Tal como la habíamos visto en la hoja 1, la ecuación de Schrödinger para una partícula en un campo de potencial V era la siguiente ecuación en derivadas parciales

$$(1) \qquad i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V\Psi,$$

donde $\Psi = \Psi(\vec{x}, t)$ con $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$, $t \in \mathbb{R}$ y $V = V(\vec{x})$ es una función real que sólo depende de la posición, ya que ésta es una situación tipo en los potenciales que aparecen en física.

Creo que ya te comenté que, curiosamente, cuando Schrödinger inventó su ecuación, no sabía lo que representaba Ψ, de hecho creía que era la densidad de carga. La interpretación que se dio poco después (con la oposición de Schrödinger y de Einstein) y que ha llegado hasta nuestros días, es parte de la *interpretación de Copenhague*. Por ahora no hace falta que leas nada de ella porque es un poco rara[1], cuando lleves avanzado el trabajo te contaré algo breve para que lo añadas al apartado 1. Recuerda que en la primera hoja te dije que lo que se puede medir es $|\Psi|^2$, no Ψ y que se suele suponer Ψ normalizada, de forma que $\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi|^2 = 1$. Pues bien, lo único que tienes que saber de la interpretación de Copenhague es que, suponiendo esta normalización, $|\Psi|^2$ es la densidad de probabilidad de detectar la partícula allí. Es decir, si quieres saber la probabilidad de encontrarla en una región $A \subset \mathbb{R}^3$ entonces tienes que calcular la integral $\int_A |\Psi|^2$.

1) Para la función de ondas antes del problema 4 de la hoja 1, halla la probabilidad de que detectemos la partícula a distancia mayor que $10a^{-1}$. ¿Es grande o pequeña?

En términos físicos, con la imagen clásica el electrón del hidrógeno debería seguir un círculo de radio a^{-1} y en el problema has calculado la probabilidad de que lo detectemos diez veces más lejos.

Ahora se plantea un problema matemático interesante. La probabilidad de que la partícula esté en cualquier sitio debe ser 1, siempre. No puede ser que la probabilidad se pierda dejando de ser uno según evoluciona la partícula. Por otra parte, $\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi|^2$ es una función que depende de t y suena raro que tenga que ser constantemente uno si sólo hemos normalizado en el instante inicial. Para que la interpretación en términos de probabilidades tenga sentido,

[1] Por si tienes curiosidad, en mis notas [Cha15] está en el apartado "Lo que no te vas a creer de física cuántica".

matemáticamente debe existir un teorema que afirme que:

$$\text{Para cada solución de (1) se cumple que} \qquad \int_{\mathbb{R}^3} |\Psi(\vec{x},t)|^2 \, d\vec{x} \qquad \text{no depende de } t.$$

En los tres ejercicios siguientes te doy indicaciones para que pruebes este teorema. Igual que en la hoja anterior, vamos a supone que Ψ y sus derivadas parciales espaciales tienden a cero en el infinito lo suficientemente rápido para que no haya problemas con la convergencia (en otro caso, $\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi|^2$ podría no tener sentido).

2) Usando (1) y su conjugado, demuestra

$$i\hbar \frac{\partial(\Psi\overline{\Psi})}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\big(\overline{\Psi}\Delta\Psi - \Psi\Delta\overline{\Psi}\big).$$

3) Considera la función vectorial $\vec{J} = \frac{\hbar i}{2m}(\overline{\Psi}\nabla\Psi - \Psi\nabla\overline{\Psi})$ con ∇ el operador gradiente. Explica por qué sus coordenadas son reales y demuestra

$$\frac{\partial(\Psi\overline{\Psi})}{\partial t} = \nabla \cdot \vec{J} \tag{2}$$

donde $\nabla \cdot \vec{J}$ indica la divergencia de $\vec{J}$.

4) Integra en ambos miembros de (2), aplica el teorema de la divergencia y deduce el resultado que buscamos (recuerda que puedes suponer que Ψ y $\vec{J}$ decaen a cero en el infinito).

Como habrás visto en algún curso, el método de separación de variables para resolver en ecuaciones en derivadas parciales [Eva10, §4] [Ros74, §14] consiste en buscar las soluciones de la forma $X(\vec{x})T(t)$. De alguna manera, todas las soluciones se pueden obtener con "combinaciones lineales" a partir de estas soluciones especiales que tienen separado el espacio del tiempo. En física se les suele llamar soluciones *estacionarias*. Hasta donde yo sé, en matemáticas no reciben un nombre especial.

5) Comprueba que si $X(\vec{x})T(t)$ es una solución de (1), entonces T'/T es una constante (por separación de variables). Suponiendo que $T : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}$ es una función acotada, deduce $T(t) = e^{iKt}$ para cierta constante $K \in \mathbb{R}$. En los dos ejercicios siguientes suponemos esta hipótesis de acotación y por tanto $T(t) = e^{iKt}$.

6) Prueba que si $X(\vec{x})T(t)$ es una solución de (1), entonces $\overline{X}(\vec{x})T(t)$ también lo es, donde la barra indica el conjugado.

7) Explica por qué las soluciones $X(\vec{x})T(t)$ y $\overline{X}(\vec{x})T(t)$ generan el mismo el mismo subespacio vectorial (sobre $\mathbb{C}$) que $X_1(\vec{x})T(t)$ y $X_2(\vec{x})T(t)$ con $X_1 = X + \overline{X}$ y $X_2 = i(X - \overline{X})$, que son reales, y por tanto podemos suponer que en las soluciones estacionarias X es siempre una función real, y así lo haremos a partir de ahora.

Comparando con la fórmula de Planck $E = h\nu = \hbar\omega$ y con lo que has leído en mis notas, parece natural decir que $-\hbar K$ es algo que deberíamos llamar energía, por eso escribiremos $-E/\hbar$ en vez de K. No le des muchas vueltas a esto, matemáticamente es cambiar el nombre de la variable. También es común escribir $\psi(\vec{x})$ en lugar de $X(\vec{x})$, a fin de cuentas ψ es la parte espacial de una función de ondas Ψ que resuelve la ecuación de Schrödinger.

8) Muestra que, con la notación anterior, las soluciones estacionarias de (1) son

$$\Psi(\vec{x},t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(\vec{x}) \qquad \text{con} \qquad \Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\big(E - V(\vec{x})\big)\psi = 0.$$

Esta ecuación satisfecha por ψ, por razones obvias, se suele llamar *ecuación de Schrödinger independiente del tiempo*. Fíjate que se podría reescribir como

$$H\psi = E\psi \qquad \text{con} \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V.$$

Este operador H se llama *Hamiltoniano* y lo que dice la ecuación es que ψ es una autofunción suya y que la "energía" E es su autovalor correspondiente, por eso en física se suele llamar a ψ "energy eigenstate" (autoestado de energía).

En varios casos, como en el ejemplo que has leído en [Cha15] y otros que estudiarás en tu trabajo, las cosas funcionan como en álgebra lineal (pensando en H como en una matriz) y sólo hay un conjunto discreto de valores posibles de E, los autovalores. En otros casos, como el que has visto de la partícula libre en $\mathbb{R}$, el espectro se vuelve continuo y no hay valores de E "cuantizados".

9) Cualquier función 1-periódica en x, y y z suficientemente regular, se escribe de manera única como una serie de Fourier $\sum_{\vec{n}\in\mathbb{Z}^3} a_{\vec{n}} e^{2\pi i\vec{n}\cdot\vec{x}}$ con $\vec{x} = (x,y,z)$. Sabiendo esto, estudia si una partícula con $m = 1$ bajo un potencial $V = 0$ y con ψ 1-periódica en cada variable, puede tener $E = 14\hbar^2\pi^2$ ¿Y $E = 40\hbar^2\pi^2$?

Aunque el espacio tiene tres dimensiones, las ecuaciones de la física matemática se escriben muchas veces suponiendo que tiene una, tanto en los cursos de matemáticas como en los de física, así se suele estudiar antes la ecuación de ondas $u_{tt} = u_{xx}$ que la de verdad $u_{tt} = \Delta u$. También lo hemos hecho nosotros con la ecuación de Schrödinger. Hay dos razones para ello, una es que las cosas sean más simples y otra, que debido a algunas simetrías a veces es posible reducir la dimensión. Vamos a finalizar esta hoja con un resultado para el caso unidimensional que no se cumple en tres dimensiones. Consideramos entonces ahora

$$\psi = \psi(x) \quad \text{que satisface} \qquad \psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\big(E - V(x)\big)\psi(x) = 0.$$

10) Demuestra que si ψ_1 y ψ_2 son dos funciones no idénticamente nulas que satisfacen esta ecuación para un E fijado, entonces la derivada de $\psi_2\psi_1' - \psi_1\psi_2'$ es nula.

11) Si ψ_i y ψ_i' tienden a cero cuando $x \to \infty$, demuestra que la derivada de $\log|\psi_1/\psi_2|$ es nula (en los puntos con $\psi_i \neq 0$). Si te resulta más sencillo, puedes suponer que ψ_1 y ψ_2 son no negativas, pero no es necesario.

12) Concluye el siguiente resultado: Dado E, si hay una solución no idénticamente nula con $\lim_{x\to\infty}\psi(x) = \lim_{x\to\infty}\psi'(x) = 0$, entonces todas las soluciones con esta propiedad difieren en multiplicar por una constante.

El interés que tiene este resultado es que implica que una vez que normalizamos $\int_{\mathbb{R}}\psi^2 = 1$, sólo hay una solución salvo cambiar el signo. En física se dice que no hay *degeneración*, para indicar que no hay diferentes estados que puedan corresponder a la misma energía. Si recuerdas lo que leíste en mis notas acerca del desdoblamiento de las líneas espectrales, es el caso contrario. Cada línea indica una energía y que se puedan desdoblar indica que había varias posibles de onda que correspondían a ella. Esto lo digo como una ilustración vaga, no lo tomes como algo que debas estudiar.

Ahora vamos con lo que tienes que entregar.

13) Escribe la primera versión para el apartado 3 de la propuesta de temario "Conservación de la probabilidad y otras propiedades" que contenga los tres resultados matemáticos que has obtenido en esta hoja acerca de la ecuación de Schrödinger. Las directrices que te recomiendo son:

1. Comienza hablando un poco de lo de la probabilidad, di que es algo fundamental en mecánica cuántica y parte de la interpretación de Copenhague. Mira por ejemplo [Wik16], para incluir las fechas y a quién se debe pero no te entretengas con ello porque es difícil. Añade el ejemplo de 1), mencionando que corresponde al electrón del átomo de hidrógeno.

2. Enuncia el resultado de conservación de la probabilidad como un teorema y pruébalo siguiendo los ejercicios 2), 3) y 4). Este punto y el anterior deberían ocuparte a lo más página y media (seguramente te ocupará menos).

3. Habla unas líneas del método de separación de variables, mencionando algunos ejemplos que conozcas (ecuación del calor, de ondas) o algo que encuentres en las referencias que te he dado o en otras. A continuación resuelve los ejercicios 5)–8) redactándolo de manera que esté todo hilado. El objetivo es introducir la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Pon después el ejemplo de 9) para explicar que, dependiendo de la situación, no todos los valores de E dan lugar a soluciones. En total estimo que una página o algo más deberían ser suficientes. Si necesitas más, no te preocupes.

4. Di algo sobre eso de pasar de tres dimensiones a una (puedes utilizar mis palabras ajustándolas como quieras), enuncia el resultado del ejercicio 12) como teorema y pruébalo siguiendo el esquema 10)–12). El límite para esto es una página de la cual te sobrará espacio, prácticamente seguro.

Referencias

[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.

[Eva10] L. C. Evans. *Partial differential equations*, volume 19 of *Graduate Studies in Mathematics*. American Mathematical Society, Providence, RI, second edition, 2010.

[Ros74] S. L. Ross. *Differential equations*. Xerox College Publishing, Lexington, Mass.-Toronto, Ont., second edition, 1974.

[Wik16] Wikipedia. Copenhagen interpretation — wikipedia, the free encyclopedia, 2016. [Online; accessed 28-November-2016].