Solución autosemejante de la ecuación de Schrödinger unidimensional para una partícula libre

24 de Junio de 2009

Sergio García-Cuevas González

Resumen

Se presenta una solución autosemejante de la ecuación de Schrödinger para una partícula libre unidimensional. Esta solución no es normalizable. El texto está acompañado de varias representaciones gráficas de la solución.

Lista de símbolos

A	Constante a determinar
B	Constante a determinar
C	Constante a determinar
$\mathbb{C}$	Campo complejo
η	Coordenada de semejanza
$f(\eta)$	Factor de la función de onda dependiente de la variable de semejanza
$g(\eta)$	Función auxiliar relacionada con la intensidad de la función de onda
$\Gamma(s)$	Función Gamma de Euler
$\hbar$	Constante de Plank reducida
i	Unidad imaginaria
I	Constante
$K(t)$	Factor de la función de onda dependiente del tiempo
$J_\nu(s)$	Función de Bessel de primera especie
m	Masa
ν	Variable auxiliar
ψ	Función de onda
$\mathbb{R}$	Campo real
s	Variable auxiliar
t	Coordenada temporal
x	Coordenada espacial
$Y_\nu(s)$	Función de Bessel de segunda especie

Índice

1. Planteamiento

Sea una partícula libre en un espacio unidimensional cuyo estado, caracterizado por la función de onda $\psi(x,t)$:

$$\begin{aligned} \psi\colon \mathbb{R}^2 &\to \mathbb{C} \\ (x,t) &\mapsto \psi(x,t) \end{aligned} \tag{1}$$

, evoluciona según la ecuación de Schrödinger ([3]):

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = 0 \tag{2}$$

La función de onda ha de mantener un valor nulo en el infinito:

$$\lim_{x\to\pm\infty} \psi(x,t) = 0 \tag{3}$$

Se busca una función de onda no trivial que verifique la ecuación (2) y la condición de contorno (3) y que además cumpla las condiciones de simetría, autosemejanza y conservación de la norma enunciadas en las subsecciones siguientes.

1.1. Simetría

Se espera que la función de onda sea simétrica con respecto del origen espacial:

$$\psi(x,t) = \psi(-x,t) \tag{4}$$

1.2. Autosemejanza

No hay longitud característica en la geometría del problema. Un sencillo análisis dimensional sugiere la introducción de una variable de semejanza:

$$\eta \equiv x\sqrt{\frac{2m}{\hbar t}} \tag{5}$$

La función de onda ha de ser en el caso más general el producto de dos funciones de una variable, una dependiente de la variable de semejanza y otra dependiente de una de las dos variables independientes originales.

1.3. Conservación de la norma

La norma, sea finita o no, ha de conservarse con el transcurso del tiempo.

2. Resolución

Usando la variable de semejanza η definida en la ecuación (5), se introduce la función auxiliar:

$$\begin{aligned} f\colon (0,\infty) &\to \mathbb{C} \\ \eta &\mapsto f(\eta) \end{aligned} \tag{6}$$

Igualando la función de onda ψ a la función auxiliar f:

$$\psi(x,t) \equiv (f \circ \eta)(x,t)$$

la norma no se conserva. En efecto:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x &= 2\int_{0}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x \\ &= \sqrt{\frac{\hbar t}{2m}} \int_{0}^{\infty} |f(\eta)|^2 \,\mathrm{d}\eta \\ &= \sqrt{t}\sqrt{\frac{\hbar}{2m}} I \end{aligned}$$

El análisis dimensional sugiere sólo tres longitudes características: 0, ∞ y $\frac{\hbar t}{2m}$; por lo tanto, si la norma ha de ser invariante y no nula, es necesario que sea infinita. Para lograr la conservación, se introduce la función auxiliar dependiente del tiempo:

$$\begin{aligned} K\colon (0,\infty) &\to \mathbb{C} \\ t &\mapsto K(t) \\ K(t) &\equiv C t^{\frac{-1}{4}} \end{aligned} \tag{7}$$

La función de onda queda definida así:

$$\psi(x,t) \equiv K(t) \cdot (f \circ \eta)(x,t) \tag{8}$$

Se cumple que la norma es constante:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x &= 2\int_{0}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x \\ &= 2\int_{0}^{\infty} |K(t) f(\eta)|^2 \,\mathrm{d}x \\ &= |C|^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2m}} \int_{0}^{\infty} |f(\eta)|^2 \,\mathrm{d}\eta \\ &= |C|^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2m}} I \end{aligned}$$

Usando la definición de la ecuación (8) para la función de onda, la ecuación de Schrödinger (2) queda reformulada de la siguiente manera:

$$f'' - \frac{i\eta}{2}f' - \frac{i}{4}f = 0 \tag{9}$$

Las primas indican derivación con respecto al argumento. Para deducir la ecuación (9) se ha hecho uso de las siguientes igualdades:

$$\begin{aligned}
K' &= -\frac{K}{4t} \\
\frac{\partial \eta}{\partial t} &= -\frac{\eta}{2t} \\
\frac{\partial \eta}{\partial x} &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar t}} \\
\frac{\partial \psi}{\partial t} &= K f' \frac{\partial \eta}{\partial t} + K' f \\
&= -\frac{K}{t}\left(\eta f' - \frac{1}{4} f\right) \\
\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= K f'' \left(\frac{\partial \eta}{\partial x}\right)^2 \\
&= \frac{K}{t}\frac{2m}{\hbar} f''
\end{aligned}$$

La ecuación (9) admite una simplificación adicional. Introduciendo la función auxiliar:

$$\begin{aligned}
g \colon (0, \infty) &\to \mathbb{R} \\
\eta &\mapsto g(\eta)
\end{aligned} \tag{10}$$

y definiendo la función f como:

$$f(\eta) \equiv e^{i\frac{\eta^2}{8}} g(\eta) \tag{11}$$

la ecuación (9) queda sin constantes imaginarias:

$$g'' + \frac{\eta^2}{16} g = 0 \tag{12}$$

Se trata de una ecuación de Bessel en una forma generalizada ([2]). Es verificada por la siguiente función:

$$g(\eta) = A\sqrt{|\eta|} J_{\frac{1}{4}}\left(\frac{\eta^2}{8}\right) + B\sqrt{|\eta|} Y_{\frac{1}{4}}\left(\frac{\eta^2}{8}\right) \tag{13}$$

Se ha tomado el valor absoluto de η para garantizar una solución real y simétrica.

Las funciones $J_\nu(s)$ y $Y_\nu(s)$ son las funciones de Bessel de primera y segunda especie ([2], [1]).

Hay que notar que el cuadrado de la función $g(\eta)$ es proporcional al cuadrado del valor absoluto de la función de onda:

$$[K(t)g(\eta)]^2 = |\psi(x,t)|^2 \tag{14}$$

La derivada de la función $g(\eta)$ es:

$$g'(\eta) = A\frac{\eta\sqrt{|\eta|}}{4}\left\{J_{-\frac{3}{4}}\left(\frac{\eta^2}{8}\right) + Y_{-\frac{3}{4}}\left(\frac{\eta^2}{8}\right)\right\} \tag{15}$$

La continuidad de la deriva en el origen queda garantizada cuando:

$$A = -B \tag{16}$$

Por otra parte, es interesante fijar el valor de B de modo que el valor de $g(0)$ sea igual a la unidad:

$$B = \frac{\pi}{2\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)} \tag{17}$$

La función $\Gamma(s)$ es la función Gamma de Euler ([2], [1]).

Haciendo uso de (16) y (17), la función $g(\eta)$ adopta finalmente la siguiente forma:

$$g(\eta) = \frac{\pi\sqrt{|\eta|}}{2\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)}\left\{J_{\frac{1}{4}}\left(\frac{\eta^2}{8}\right) - Y_{\frac{1}{4}}\left(\frac{\eta^2}{8}\right)\right\} \tag{18}$$

La forma de la función $g(\eta)$ queda ilustrada en las figuras 1 y 2:

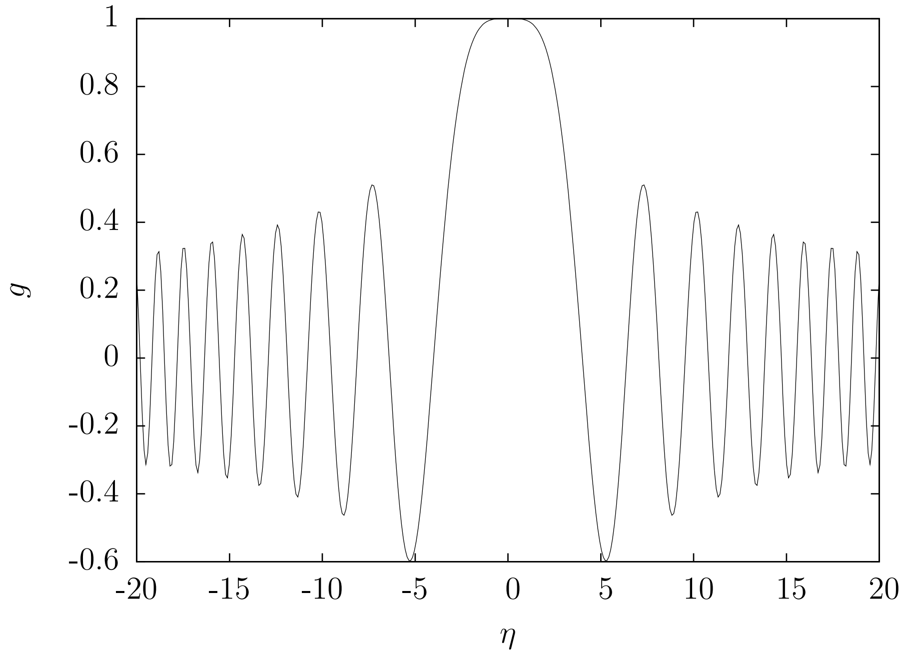

Figura 1: Función auxiliar $g(\eta)$.

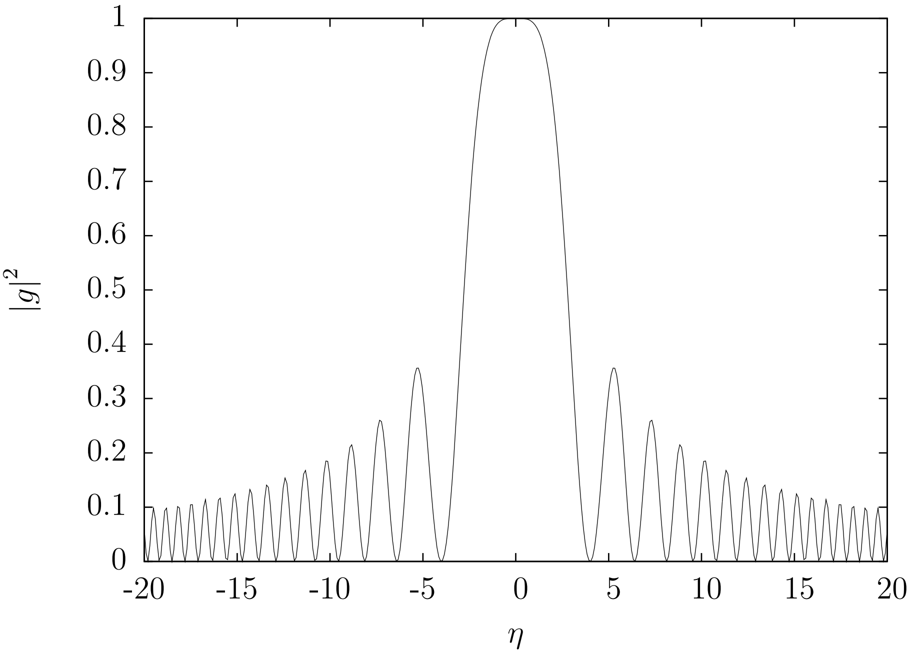

Figura 2: Cuadrado de la función auxiliar $g(\eta)$.

Pasando a variables físicas, la función de onda es:

$$\psi(x,t) = \frac{\pi}{2C\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)}\sqrt[4]{\frac{2m}{\hbar}}\sqrt{\frac{|x|}{t}} \left\{J_{\frac{1}{4}}\left(\frac{mx^2}{4\hbar t}\right) - Y_{\frac{1}{4}}\left(\frac{mx^2}{4\hbar t}\right)\right\} \left\{\cos\left(\frac{mx^2}{4\hbar t}\right) + i\sin\left(\frac{mx^2}{4\hbar t}\right)\right\} \tag{19}$$

La forma de la función de onda queda determinada por la función auxiliar $f(\eta)$:

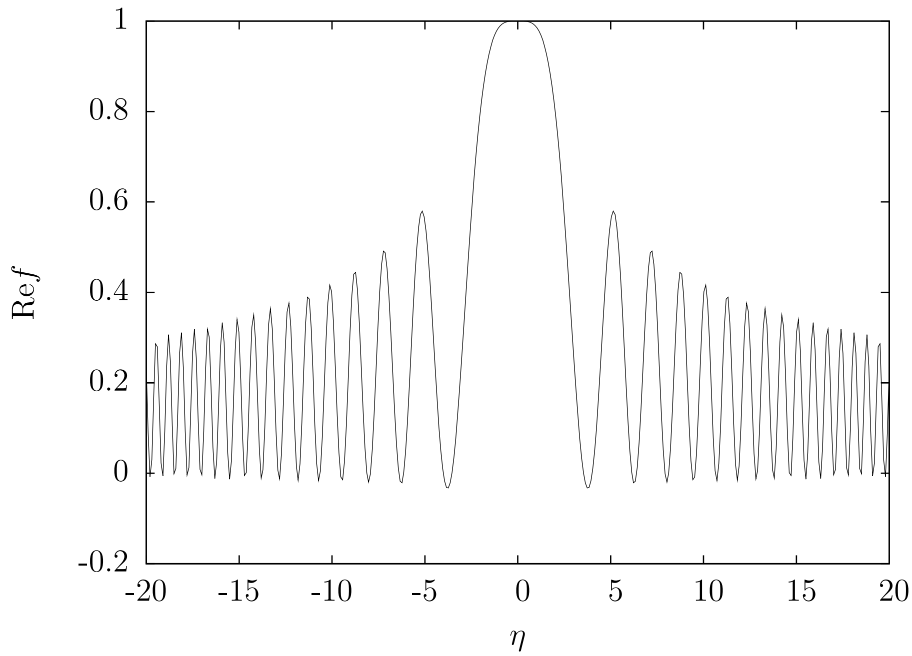

Figura 3: Parte real de la función auxiliar $f(\eta)$.

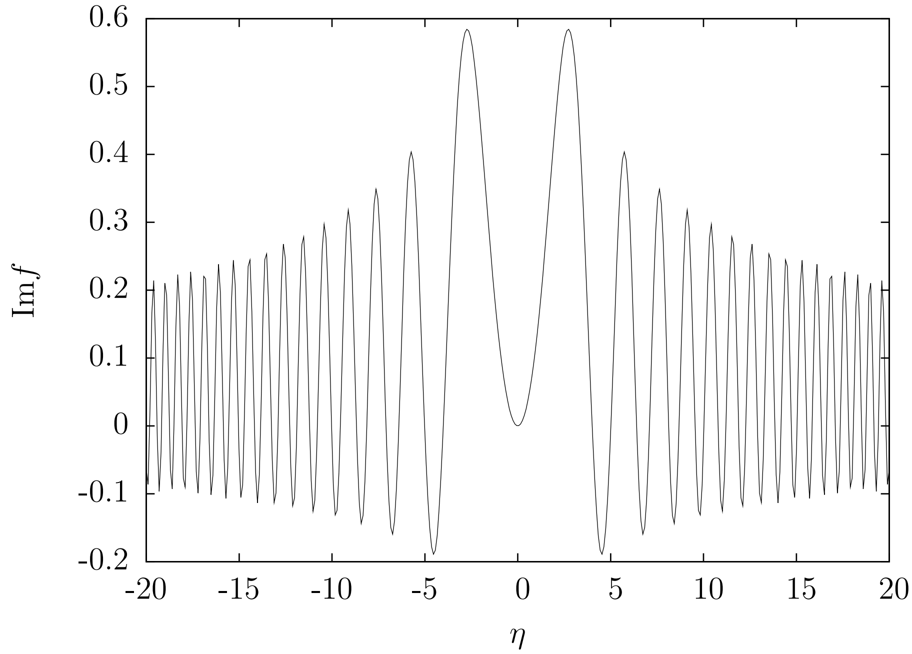

Figura 4: Parte imaginaria de la función auxiliar $f(\eta)$.

Queda confirmado que la norma de la función de onda es independiente de t pero infinita debido a que el cuadrado de $g(\eta)$ da lugar a una integral divergente:

$$\begin{aligned} \|\psi\|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 \, \mathrm{d}x \\ &= 2\int_{0}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 \, \mathrm{d}x \\ &= 2\int_{0}^{\infty} |K(t)g(\eta)|^2 \sqrt{\frac{\hbar t}{2m}} \, \mathrm{d}\eta \\ &= 2\sqrt{\frac{|C|^2 \hbar}{2m}} \int_{0}^{\infty} [g(\eta)]^2 \, \mathrm{d}\eta \\ &= \infty \end{aligned} \tag{20}$$

La intensidad de la función de onda tiene por envolvente:

$$|\psi(x,t)|^2 \leq \frac{8\,|C|^2\,\pi}{\left[\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)\right]^2 |x|} \tag{21}$$

De esta manera, se aprecia que la condición de contorno se cumple desde el instante singular $t = 0$.

Referencias

[1] Abramowitz, Milton y Stegun, Irene A. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables.* Dover, Nueva York, novena edición, 1964. ISBN 0-486-61272-4.

[2] Bell, William Wallace. *Special Functions for Scientists and Engineers.* Dover, Londres, primera edición, 1968. ISBN 0-486-43521-0.

[3] Yndurain, Francisco José. *Mecánica Cuántica.* Ariel, Barcelona, segunda edición, 1990. ISBN 84-344-8060-3.