Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación U.N.C.

Métodos Matemáticos de la Física II - Segundo parcial (09/06/16): Soluciones[1]

Problema 1: El estado de una partícula cuántica libre (sin fuerzas) de masa m pero confinada a moverse en el interior C de un cuadrado plano de lado 1 está dado por una función de onda $\psi(x, y, t)$ compleja que satisface la ec. (de Schrödinger)

$$i\hbar\psi_t = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi \ , \quad (x, y) \in C \ , \quad t \in \mathbb{R} \ , \tag{1}$$

con $\psi \equiv 0$ en ∂C para todo $t \in \mathbb{R}$. Con la excepción de e), nada de lo que sigue depende de la parametrización de C que elegimos como

$$C = \{(x, y) : \ 0 < x < 1, 0 < y < 1\} \ .$$

a) Caracterice (no es necesario calcularlas explícitamente) a las soluciones donde la variable temporal está separada de las variables espaciales; estas soluciones se llaman estacionarias.

b) Verifique que el Laplaciano actuando en (el abierto) C con condición de Dirichlet en ∂C es un operador simétrico. ¿Que puede decir sobre el signo de los autovalores correspondientes? Determine todos los autovalores que pueda y sus multiplicidades. ¿Que información le permitiría deducir que los autovalores encontrados son todos?

c) Muestre que si $-\Delta\phi = \lambda\phi$ en C y $\phi \equiv 0$ en ∂C entonces lo mismo vale para la función $\widetilde{\phi}(x, y) := \phi(y, x)$ y para las funciones $\phi \pm \widetilde{\phi}$.

d) ¿Porque es cierto que para las soluciones estacionarias $|\psi(x, y, t)|^2$ no depende de t?

e) La función de onda: $\exp\{-i\pi^2\hbar t/m\} [\cos(\pi(x - y)) - \cos(\pi(x + y))]$, ¿es estacionaria?

Solución: Si $\psi(\boldsymbol{x}, t) = \phi(\boldsymbol{x})T(t)$ es solución no nula de (1) entonces

$$i\hbar T'\phi = -\frac{\hbar^2}{2m}T(\Delta\phi)$$

y si, además, $\psi|_{\partial C} \equiv 0$ entonces $\phi|_{\partial C} \equiv 0$. Con el argumento usual[2]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta\phi) = E\phi \ , \quad \phi|_{\partial C} \equiv 0 \ ;$$

$$T(t) = Ce^{-iEt/\hbar} \ .$$

Por lo tanto la respuesta de a) es: *la función*

$$\psi(\boldsymbol{x}, t) = \phi(\boldsymbol{x})T(t)$$

es solución estacionaria de (1), si y sólo si ϕ es autofunción del Laplaciano sobre C con condición de Dirichlet homogenea al autovalor $-2mE/\hbar^2$ y $T(t) = Ce^{-iEt/\hbar}$ con C constante arbitraria no nula.

[1] G.A.R.

[2] Hay t_o tal que $T(t_o) \neq 0$ luego

$$i\hbar\frac{T'(t_o)}{T(t_o)}\,\phi = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta\phi)$$

o sea que con $\lambda := T'(t_o)/T(t_o)$,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta\phi) = i\hbar\lambda\phi \ , \quad i\hbar T'\phi = T(i\hbar\lambda)\phi$$

de donde $T' = \lambda T$ y $T(t) = Ce^{\lambda t}$.

Sabemos (y veremos en b)) que el Laplaciano con condiciones de borde homogeneas de Dirichlet es simétrico (o auto-adjunto) y admite una sucesión infinita de autovalores de multiplicidad finita todos negativos. De aquí deducimos que el número E es real y positivo. Observe que la dimensión (física) de un autovalor del Laplaciano es $(\text{largo})^{-2}$ y ya que $[\hbar] = \text{energía} \cdot \text{tiempo}$ se obtiene que $[E] = \text{energía}$.

b) Por la segunda identidad de Green (aplicada al abierto C)

$$\int_C (u(\Delta v) - v(\Delta u)) d\boldsymbol{x} = \int_{\partial C} \left(u\frac{\partial v}{\partial n} - v\frac{\partial u}{\partial n} \right) d\sigma = 0$$

si tanto u como v se anulan en ∂C. Luego, el Laplaciano con condición de borde homogenea de Dirichlet sobre C (o cualquier abierto de borde suave –no es el caso de C) es simétrico:

$$\langle u, \Delta v \rangle = \langle \Delta u, v \rangle \ ,$$

donde $\langle f, g \rangle = \int_C \overline{f(\boldsymbol{x})} g(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x}$ es el producto escalar usual. En particular, si $\Delta u = \lambda u$ entonces $\lambda \langle u, u \rangle = \langle u, \lambda u \rangle = \langle u, \Delta u \rangle = \langle \Delta u, u \rangle = \langle \lambda u, u \rangle = \overline{\lambda} \langle u, u \rangle$ de modo que si $u \neq 0$, λ es real.
Pero, por la primera identidad de Green, si $\Delta u = \lambda u$ entonces

$$\lambda \int_C u^2 \, d\boldsymbol{x} = \int_C u(\Delta u) \, d\boldsymbol{x} = -\int_C (\nabla u)^2 \, d\boldsymbol{x} + \int_{\partial C} u(\nabla u) \cdot \boldsymbol{n} \, d\sigma = -\int_C (\nabla u)^2 \, d\boldsymbol{x} \ ;$$

luego, si $u \neq 0$, también $\int_C u^2 \, d\boldsymbol{x} \neq 0$ de modo que $\lambda \leq 0$. Pero, si $\lambda = 0$ entonces $\int_C (\nabla u)^2 \, d\boldsymbol{x} = 0$ de modo que $\nabla u \equiv 0$ y por esto $u = const.$; ya que $u|_{\partial C} \equiv 0$, se sigue que $u \equiv 0$. Concluimos que $\lambda < 0$.
Para encontrar autovalores de Δ en C con condición homogenea de Dirichlet en el borde, planteamos

$$\phi(x, y) = X(x)Y(y) \ , \ \ X(0) = X(1) = Y(0) = Y(1) = 0 \ ;$$

entonces $\Delta\phi = \lambda\phi$ si (y sólo si)

$$X''Y + XY'' = \lambda XY \ .$$

Con el argumento de siempre (vea nota al pie anterior)

$$X'' = \alpha X \ , \ \ Y'' = \beta Y \ , \ \ \lambda = \alpha + \beta \ . \tag{2}$$

Repitiendo el argumento recién realizado para ver que $\lambda < 0$ ahora con el problema de autovalores

$$Z'' = \gamma Z \ , \ \ Z(0) = Z(1) = 0 \ ,$$

concretamente: de

$$\gamma \int_0^1 Z^2 \, dx = \int_0^1 Z Z'' \, dx = Z Z' |_0^1 - \int_0^1 (Z')^2 \, dx = -\int_0^1 (Z')^2 \, dx \ ,$$

deducimos que $\gamma < 0$. Y como $Z(x) = a\cos(\sqrt{|\gamma|}x) + b\sin(\sqrt{|\gamma|}x)$, la condición de borde necesita que $a = 0$ y que $\sin(\sqrt{|\gamma|}) = 0$ de modo que $\sqrt{|\gamma|} = n\pi$ con n entero no-nulo. Como el seno es impar el autovalor $\gamma = -n^2\pi^2$ es simple (i.e., no degenerado) con autofunción proporcional a $\sin(n\pi)$ donde n es un entero positivo. Luego, en (2), $\alpha, \beta < 0$ (ergo $\lambda < 0$ que ya teniamos) y, especificamente, $\alpha = -n^2\pi^2$, $\beta = -k^2\pi^2$ y todos los autovalores que admiten autofunciones en variables cartesianas separables son

$$\lambda_{n,m} := -\pi^2(n^2 + k^2) \ , \ \ n, k \in \{1, 2, \cdots\} \ ,$$

con autofunciones que son combinaciones lineales arbitrarias de

$$u_{n,k}(x, y) := \sin(n\pi x)\sin(k\pi y) \ , \ \ u_{k,n}(x, y) = \sin(k\pi x)\sin(n\pi y)$$

cuando $n \neq k$ (de modo que estos autovalores son a lo menos doblemente degenerados); y con autofunción proporcional a

$$u_{n,n} = \sin(n\pi x)\sin(n\pi y)$$

si $n = k$. La información más precisa sobre la multiplicidad es complicada; ver la solución del problema 3 de la guía 3[3]. La pregunta es: ¿ Es cierto que $\{\lambda_{n,k} : n, k = 1, 2, \cdots\}$ son todos los autovalores del Laplaciano sobre C con condición de Dirichlet homogena? Para responder esto hay que saber si $\{u_{n,k} : n, k = 1, 2, \cdots\}$ forman un sistema completo de funciones linealmente independientes. La independencia lineal es inmediata ya que es consecuencia de que autofunciones a autovalores distintos son automáticamente ortogonales (ya que el laplaciano en cuestión es simétrico) y, además, que para $n \neq k$

$$\int_C u_{n,k}(x,y)u_{k,n}(x,y) = 0 \ .$$

La completitud se puede obtener de aquella de la familia de funciones $\{\sin(n\pi x) : n = 1, 2, \cdots\}$ que es completa en el espacio vectorial de funciones continuas sobre el intervalo $[0, 1]$.

c) Si $\widetilde{\phi}(x, y) = \phi(y, x)$ entonces

$$\left(\frac{\partial\widetilde{\phi}}{\partial x_1}\right)(x,y) = \lim_{h\to 0}\frac{\widetilde{\phi}(x+h,y)-\widetilde{\phi}(x,y)}{h} = \lim_{h\to 0}\frac{\phi(y,x+h)-\phi(y,x)}{h} = \left(\frac{\partial\phi}{\partial x_2}\right)(y,x) = \widetilde{\left(\frac{\partial\phi}{\partial x_2}\right)}(x,y) \ ,$$

y, análogamente,

$$\left(\frac{\partial\widetilde{\phi}}{\partial x_2}\right)(x,y) = \widetilde{\left(\frac{\partial\phi}{\partial x_1}\right)}(x,y) \ .$$

En notación más usual:

$$\frac{\partial\widetilde{\phi}}{\partial x} = \widetilde{\frac{\partial\phi}{\partial y}} \ , \quad \frac{\partial\widetilde{\phi}}{\partial y} = \widetilde{\frac{\partial\phi}{\partial x}} \ .$$

De esto se obtiene

$$\frac{\partial^2\widetilde{\phi}}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\widetilde{\frac{\partial\phi}{\partial y}} = \widetilde{\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}} \ ,$$

y análogamente para la segunda derivada respecto de y. Entonces

$$\Delta\widetilde{\phi} = \widetilde{\Delta\phi}\ ^4.$$

Luego, si $\Delta\phi = \lambda\phi$, se obtiene $\Delta\widetilde{\phi} = \widetilde{\Delta\phi} = \widetilde{\lambda\phi} = \lambda\widetilde{\phi}$; y, por linealidad, $\Delta(\phi \pm \widetilde{\phi}) = \lambda(\phi \pm \widetilde{\phi})$. Notese: la función $\phi_\pm := \phi \pm \widetilde{\phi}$ tiene la propiedad $\widetilde{\phi_\pm} = \pm\phi_\pm$ o sea es simétrica resp. anti-simétrica bajo la transformación $(x, y) \mapsto (y, x)$.

d) De acuerdo a la caracterización de a) y a que E es real (y positivo) por b), para una solución estacionaria se tiene

$$|\psi(\boldsymbol{x},t)| = |\phi(\boldsymbol{x})e^{-iEt/\hbar}| = |\phi(\boldsymbol{x})|\,|e^{-iEt/\hbar}| = |\phi(\boldsymbol{x})| \ .$$

e) De acuerdo a la caracterización de a) la función

$$\exp\{-i\pi^2\hbar t/m\}\underbrace{[\cos(\pi(x-y)) - \cos(\pi(x+y))]}_{=:\phi(\boldsymbol{x})}$$

es solución estacionaria de la ec. de Schrödinger si con $E/\hbar = \pi^2\hbar/m$ o sea $E = \pi^2\hbar^2/m$, el número $\lambda = -2mE/\hbar^2 = -2\pi^2$ es autovalor del Laplaciano con condición homogenea de Dirichlet. Lo que es cierto

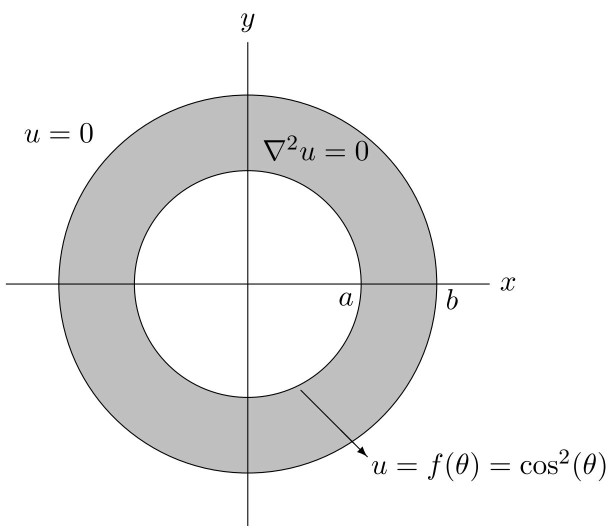
[3] Es fácil verificar que los autovalores $\lambda_{n,n} = -2n^2\pi$ son simples. Los otros, $\lambda_{n,k}$ con $n \neq k$ son a lo menos dobles; pero, por ejemplo, $\lambda_{1,8} = -65\pi^2 = \lambda_{4,7}$ y este autovalor es cuadruple.

[4] Otra manera de escribir lo mismo es: $S\Delta S = \Delta$ o bien $S\Delta = \Delta S$ donde $S\phi := \widetilde{\phi}$. Observe que $S^{-1} = S$. Y esto concuerda con nuestra usual definición de que Δ es invariante ante la transformación (lineal) S.

por b) ya que $\lambda_{1,1} = -2\pi^2$. Además, $\phi(\boldsymbol{x})$ debe ser múltiplo de $u_{1,1} = \sin(\pi x)\sin(\pi y)$; lo que también se cumple pues

$$\begin{aligned}\cos(\pi(x-y)) - \cos(\pi(x+y)) &= \cos(\pi x)\cos(\pi y) + \sin(\pi x)\sin(\pi y) - [\cos(\pi x)\cos(\pi y) - \sin(\pi x)\sin(\pi y)] \\ &= 2\sin(\pi x)\sin(\pi y)\ .\end{aligned}$$

Problema 2: Resuelva la ecuación de Laplace dentro del anillo circular delimitado por $a < r < b$ y $0 < \theta < 2\pi$ (ver figura) con las condiciones de borde indicadas. [*Hint*: $\cos^2(\theta) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\cos(2\theta)$]



Solución: Buscamos todas las armónicas en el anillo que separan en variables polares (r, φ), o sea $\Phi(r, \varphi) = R(r)Z(\varphi)$ y $\Delta\Phi = 0$ en el anillo. Como siempre, obtenemos

$$R'' + r^{-1}R' - \lambda r^{-2}R = 0\ ,\quad Z'' = -\lambda Z\ ,$$

con λ real. Pero Z debe ser 2π-periódica de modo que necesariamente $\lambda = n^2$ con $n \in \mathbb{N}$ y entonces Z es combinación lineal arbitraria de $\cos(n\varphi)$ con $\sin(n\varphi)$. La ec. radial correspondiente al valor $\lambda = n^2$ es una ec. de Euler

$$r^2R'' + rR' - n^2R = 0\ ,\quad a < r < b\ ,$$

con solución

$$R_n(r) = \begin{cases} \alpha_o + \beta_o \ln(r) & ,\quad \text{si } n = 0 \\ \alpha_n r^n + \beta_n / r^n & ,\quad \text{si } n \geq 1 \end{cases}\ .$$

Planteamos que la solución buscada es combinación lineal (infinita) de estas soluciones que separan en variables polares

$$u(r, \varphi) = R_o(r) + \sum_{n=1}^{\infty} R_n(r)[c_n \cos(n\varphi) + d_n \sin(n\varphi)]\ .$$

De la condición exterior $u(b, \varphi) = 0$ para todo $\varphi \in [0, 2\pi]$ obtenemos por la unicidad de los coeficientes de Fourier que

$$R_o(b) = 0\ ,\quad R_n(b)c_n = R_n(b)d_n = 0\ ,\quad n \geq 1\ .$$

La única solución que no conduce a $u = 0$ es

$$R_n(b) = 0\ ,\quad n \geq 0\ ;$$

o sea

$$\alpha_o = -\beta_o \ln(b)\ ,\quad \alpha_n = -\beta_n b^{-2n}$$

de modo que

$$u(r,\varphi) = \beta_o \ln(r/b) + \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n b^{-n} \left((b/r)^n - (r/b)^n\right) [c_n \cos(n\varphi) + d_n \sin(n\varphi)] \ .$$

Con la condición interior $u(a,\varphi) = [1+\cos(2\varphi)]/2$ y la unicidad de los coeficientes de Fourier obtenemos como únicos coeficientes no nulos

$$\beta_o = \frac{1}{2\ln(a/b)} \ , \quad \beta_2 = \frac{b^4 a^2}{b^4 - a^4} \ , \quad c_2 = 1/2 \ .$$

Por lo tanto,

$$u(r,\varphi) = \frac{1}{2\ln(a/b)} \ln(r/b) + \frac{a^2(b^4 - r^4)}{2r^2(b^4 - a^4)} \cos(2\varphi) \ .$$

Problema 3: Si T es una distribución, definase la transformada de Fourier $\widehat{T}$ como la distribución

$$\widehat{T}(\varphi) := T(\widehat{\varphi})$$

donde φ es una función de prueba con transformada de Fourier

$$\widehat{\varphi}(k) = (2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}} e^{-ikx} \varphi(x)\, dx \ .$$

Considere la función $x \mapsto (x-1)^2$ como distribución y determine la transformada de Fourier de esta distribución.

Solución: A una función f se le asocia la distribución T_f dada por

$$T_f(\varphi) := \int_{\mathbb{R}} f(x)\varphi(x)\, dx \ .$$

Por lo tanto, con la convención/definición dada

$$\widehat{T_f}(\varphi) = T_f(\widehat{\varphi}) = \int_{\mathbb{R}} f(x)\widehat{\varphi}(x)\, dx \ .$$

Se puede proceder de varias maneras. Una es usando que

$$\int_{\mathbb{R}} \widehat{h}(x)\widehat{g}(x)\, dx = \int_{\mathbb{R}} h(x)g(x)\, dx$$

que nos produce – $\mathcal{F}$ denota la transformada de Fourier –

$$\widehat{T_f}(\varphi) = \int_{\mathbb{R}} [\widehat{\mathcal{F}^{-1}(f)}](x)\widehat{\varphi}(x)\, dx = \int_{\mathbb{R}} [\mathcal{F}^{-1}(f)](x)\varphi(x)\, dx = T_{\mathcal{F}^{-1}(f)}(\varphi) \ ;$$

de modo que

$$\widehat{T_f} = T_{\mathcal{F}^{-1}(f)} \ .$$

Y esto nos conduce a calcular la anti-transformada de Fourier de f. ¡A esto volveremos!

La otra es –aparentemente– más directa en nuestro caso específico $f(x) = (x-1)^2$. Usamos la definición de la función δ_a y la relaciónes

$$(2\pi)^{-1} \int_{\mathbb{R}} \widehat{g}(x)\, dx = g(0) = \delta_o(g) \ ;$$

$$(\delta_a)'(g) = -\delta_a(g) \ , \quad (\delta_a)''(g) = \delta_a(g'') \ .$$

Ya que

$$\widehat{T_f}(\varphi) = \int_{\mathbb{R}} (x^2 - 2x + 1)\widehat{\varphi}(x)\, dx = (2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}^2} (x^2 - 2x + 1)\varphi(t)e^{-itx}\, dt\, dx \ ;$$

y

$$(2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}^2} \varphi(t)e^{-itx}\, dt\, dx = \int_{\mathbb{R}} \widehat{\varphi}(x)\, dx = \sqrt{2\pi}\varphi(0) = \sqrt{2\pi}\, \delta_0(\varphi) \ ;$$

$$(2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}^2} (-2x)\varphi(t)e^{-itx}\, dt\, dx = -\frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}^2} \varphi(t) \left(i\frac{\partial}{\partial t} e^{-itx} \right) dt\, dx = -\frac{2i}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} dx(-1) \int_{\mathbb{R}} \varphi'(t)e^{-itx}\, dt$$

$$= 2i \int_{\mathbb{R}} \widehat{\varphi'}(x)\, dx = 2i\, \sqrt{2\pi}\varphi'(0) = 2i\, \sqrt{2\pi}\delta_0(\varphi') = -2i\sqrt{2\pi}(\delta_0)'(\varphi) \ ;$$

$$(2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}^2} x^2\varphi(t)e^{-itx}\, dt\, dx = \frac{-1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} dx \int_{\mathbb{R}} \varphi(t) \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} e^{-itx} \right) dt = \frac{-1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} dx \int_{\mathbb{R}} \varphi''(t)e^{-itx}\, dt$$

$$= - \int_{\mathbb{R}} \widehat{\varphi''}(x)\, dx = -\sqrt{2\pi}\varphi''(0) = -\sqrt{2\pi}\delta_0(\varphi'') = -\sqrt{2\pi}(\delta_0)''(\varphi) \ ;$$

obtenemos

$$\widehat{T_f}(\varphi) = \sqrt{2\pi} \left(\delta_0 - 2i\delta_0' - \delta_0'' \right)(\varphi) \ ,$$

vale decir

$$\widehat{T_{(x-1)^2}} = \sqrt{2\pi} \left(\delta_0 - 2i\delta_0' - \delta_0'' \right) \ .$$

Volvemos a la anti-transformada de Fourier de $f(x) = (x-1)^2 = x^2 - 2x + 1$. La anti-transformada de la función $\iota(x) = 1$ es formalmente

$$\widehat{\iota}(x) = (2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}} e^{itx}\, dt = \sqrt{2\pi}\delta_0(x) \ ,$$

ya que (usando lo ya usado)

$$\int_{\mathbb{R}} \widehat{\iota}(x)\varphi(x)\, dx = (2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}^2} e^{itx}\varphi(x)\, dx\, dt = \int_{\mathbb{R}} \widehat{\varphi}(-t)\, dt = \int_{\mathbb{R}} \widehat{\varphi}(t)\, dt = \sqrt{2\pi}\, \varphi(0) = \sqrt{2\pi}\delta_0(\varphi) \ .$$

Analogamente, se calculan las anti-transformadas de Fourier de las funciones $x \mapsto x$ y $x \mapsto x^2$ obteniendose formalmente

$$\widehat{x} = i\sqrt{2\pi}\, \delta_0' \ , \ \ \widehat{x^2} = -\sqrt{2\pi}\, \delta_0'' \ .$$