

UNIVERSIDAD DE MURCIA

FACULTAD DE MATEMÁTICAS

La Ecuación de Schrödinger

Diego Alfonso Marín Muñoz

2020/2021

Declaración de originalidad

Diego Alfonso Marín Muñoz, autor del Trabajo de Fin de Grado “La Ecuación de Schrödinger”, bajo la tutela del profesor Gustavo Garrigós Aniorte, declara que el trabajo que presenta es original, en el sentido de que ha puesto el mayor empeño en citar debidamente todas las fuentes utilizadas, y que la obra no infringe el copyright de ninguna persona.

En Murcia, a 16 de julio de 2021

Fdo.: Diego Alfonso Marín Muñoz

A mi tutor Gustavo, por su incansable ayuda.

A mis padres y mi hermana, por aguantarme.

Índice general

Declaración de originalidad	I
Resumen	V
Abstract	XI
Capítulo 1. Preliminares	1
1. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo	1
2. El operador Hamiltoniano	4
Capítulo 2. El oscilador armónico	7
1. Introducción	7
2. Resolviendo la ecuación	8
3. Descartando soluciones	9
4. Normalización de las soluciones	14
5. Ecuación General	19
Capítulo 3. El laplaciano en la esfera	29
1. Introducción	29
2. Transformando la ecuación	31
3. Los polinomios de Legendre	33
4. Las funciones de Legendre forman una base ortogonal	35
5. Autovalores del operador laplaciano en la esfera	38
Capítulo 4. El átomo de hidrógeno	43
1. Formulación del modelo	43
2. Resolviendo la ecuación radial	45
3. Orbitales hidrogenoides	49
Capítulo 5. Apéndices	53
1. Algunos resultados auxiliares	53
2. La integral gaussiana	55
3. La fórmula de Green	56
4. El teorema de Weierstrass	60
5. Laplaciano en coordenadas esféricas	63
6. Las funciones gamma y beta	64
Bibliografía	67

Resumen

Según el libro de Levine [8, pág 2], la mecánica cuántica comienza en el año 1900 con los estudios del físico alemán Max Planck.

En uno de ellos, desarrolló una teoría para explicar los valores experimentales que se obtenían en la medición de la intensidad de la radiación de un *cuerpo negro* (un objeto que absorbe toda la luz que incide sobre el mismo), en la que supuso que los átomos del cuerpo negro podían emitir radiación solamente en cantidades discretas dadas por $h\nu$, donde ν es la frecuencia de la radiación y h es una constante de proporcionalidad. El éxito de la teoría de Planck para explicar la radiación del cuerpo negro supone (según [8]) el nacimiento de la mecánica cuántica.

En otro de sus estudios observaba los efectos de difracción e interferencia que se producían cuando un haz de luz pasaba a través de dos pequeños orificios adyacentes, con lo que se dieron muestras del comportamiento ondulatorio de la luz (que ya anticipaba Maxwell en el siglo XIX).

Poco después (en 1905), Einstein mostró que en algunas observaciones experimentales sobre la naturaleza de la luz (en particular, al estudiar el *efecto fotoeléctrico*, ver [8, pág 3]) ésta manifestaba un comportamiento *corpúscular* (aparentaba estar formada por partículas discretas, que Einstein llamó *fotones*).

Estos estudios sobre la naturaleza de la luz y los posteriores experimentos con electrones (es interesante el *experimento de la rendija*, explicado en el libro de Feynman [5, Chapter 1]) ponían de manifiesto una de las propiedades más extrañas de los objetos microscópicos: su dualidad en el comportamiento como *ondas* y como *partículas*.

Esta dualidad onda-partícula, junto con las mediciones experimentales discretas sobre los valores energéticos, suponen los principios fundamentales de la **mecánica cuántica**: estudiar las partículas subatómicas con modelos ondulatorios y sólo admitir valores teóricos discretos para la energía. Aquí entra en juego la *Ecuación de Schrödinger Dependiente del Tiempo* (1.1.1):

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(t, x)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V \Psi, \quad x \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^d, \quad t \in \mathbb{R}.$$

Esta es una ecuación en derivadas parciales que de alguna forma *explica* el comportamiento de las partículas elementales. La forma en la que esta ecuación sirve para modelizar el comportamiento de las partículas microscópicas se explica en el Capítulo 1 de este trabajo.

En él, se introduce la notación y los conceptos que van a utilizarse a lo largo del trabajo. Se empieza resolviendo esta ecuación por separación de variables planteándose una solución de la forma $\Psi(t, x) = \tau(t)\psi(x)$ con τ y ψ funciones diferenciables (en el sentido que se da en la Definición 1.1), obteniéndose una solución trivial para τ (ver Proposición 1.2) y llegándose a la *Ecuación de Schrödinger* (1.1.2) para ψ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V \psi = E \psi, \quad \text{en } \Omega \subset \mathbb{R}^d,$$

que es el objeto central de todo el trabajo. En los libros de física (los que hemos seguido nosotros son [5] y [8]) esta ecuación se estudia normalmente para modelos en los que $V = V(x)$ (este va a ser el caso de los modelos del **Oscilador Armónico** y del **Átomo de Hidrógeno**, que son los que vamos a estudiar nosotros), pero suele hacerse de forma no demasiado rigurosa, y dejándose sutilezas matemáticas sin explicar.

Siguiendo principalmente el libro de Levine [8] para introducir los modelos y las ecuaciones, nuestro objetivo con este trabajo es estudiar la ecuación de Schrödinger para los modelos antes

mencionados, obteniendo las soluciones clásicas de las ecuaciones, que obtienen los físicos, con el mayor rigor matemático posible.

Para conseguir esto, plantaremos siempre soluciones de (1.1.2) analíticas o que sean producto de funciones analíticas si tienen más de una variable (ver Definición 5.6 del Apéndice 1). Con el fin de encontrar todas las soluciones posibles, a menudo convendrá cambiar el enfoque del problema transformando el estudio de la E.D.P. (1.1.2) en el estudio de la teoría espectral de su operador diferencial asociado: el operador Hamiltoniano, que definimos en la sección 2 del capítulo 1.

DEFINICIÓN 0.1. Dada $V \in \mathcal{C}(\Omega)$ se define el siguiente operador diferencial (formal)

$$\hat{H} := -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V.$$

Nos referiremos a él como el **operador Hamiltoniano mecanocuántico** (o simplemente **operador Hamiltoniano**).

En analogía con la evidencia física de los valores de energía discretos en los experimentos, sólo buscaremos autofunciones con valores de E discretos (ver definiciones 1.5 y 1.6).

De este operador nos interesan un tipo particular de autofunciones:

DEFINICIÓN 0.2. Sea \hat{H} el operador Hamiltoniano mecanocuántico de un cierto sistema, definido sobre un subespacio X de $L^2(\Omega)$. Se dice que una cierta función $\psi \in X$ es una **función de onda** asociada al estado de energía $E \in \sigma_d(\hat{H})$ si ψ es una autofunción de \hat{H} de valor propio E y además

$$\|\psi\|_2^2 = \int_{\Omega} |\psi(x)|^2 dx = 1,$$

donde las integrales las tomamos siempre respecto de la medida de Lebesgue dx .

A los valores $E \in \sigma_d(\hat{H})$ los llamaremos **valores de energía admisibles** del sistema.

Así, en todo el trabajo pediremos a nuestras soluciones ψ de (1.1.2) al menos (junto con la condición de analiticidad antes mencionada) que estén en $L^2(\Omega)$ (ver Definición 1.4), donde el conjunto $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ será un abierto que dependerá del modelo que estemos estudiando.

Ya en el capítulo 2, empezamos con el estudio de uno de los modelos más famosos de la mecánica cuántica: el del Oscilador Armónico. Se comienza haciendo una introducción al problema físico siguiendo el libro [8], concluyendo que la función de onda $u(x)$ debe cumplir la ecuación (2.1.1)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u''(x) + 2\pi^2\nu^2mx^2u(x) = Eu(x), \quad x \in \mathbb{R},$$

para ciertos valores de energía $E \in \mathbb{R}$ a determinar. En vez de resolver esta ecuación directamente, reduciendo a constantes más manejables se estudia la E.D.O. (2.2.2)

$$-u''(x) + (ax)^2u(x) = bu(x)$$

en la sección 2 de este capítulo. Para resolverla, se plantean sucesivamente algunos cambios de variable, $v(\xi) = u\left(\frac{\xi}{\sqrt{a}}\right)$ y $v(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}}f(\xi)$, que la transforman en la nueva E.D.O. (2.2.4)

$$-f''(\xi) + 2\xi f'(\xi) + (1 - \lambda)f(\xi) = 0.$$

Plantando una solución en serie de potencias de esta ecuación llegamos de forma natural a los *Polinomios de Hermite* $H_M(x)$ (ver Definición 2.3).

La ecuación tiene además otras soluciones no polinómicas, pero utilizando el Lema 2.2 de comparación de series demostramos que dichas soluciones se pueden descartar. De forma más precisa, demostramos el siguiente resultado

TEOREMA 0.3. *La función $v(\xi)$ es solución no nula de*

$$-v''(\xi) + \xi^2 v(\xi) = \lambda v(\xi) \quad \text{y} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |v(\xi)|^2 d\xi < +\infty,$$

si, y sólo si $\lambda = 2M + 1$ para algún $M \in \mathbb{N}_0$ y

$$v(\xi) = C e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_M(\xi).$$

De aquí se deduce el Corolario 2.5, que termina con el estudio de la Ecuación de Schrödinger del Oscilador Armónico.

Una vez encontradas todas las soluciones $v_M(\xi)$, para conseguir las funciones de onda del oscilador armónico hay que normalizarlas en $L^2(\mathbb{R})$. Esto es lo que hacemos en la sección 3 del capítulo 2, en la que utilizamos el operador Hamiltoniano asociado a (2.2.2), es decir

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_{xx} + 2\pi^2 \nu^2 m x^2.$$

A partir de aquí sigo unos apuntes proporcionados por mi tutor G. Garrigós. Lo primero que hacemos es definir un dominio adecuado para este operador (la *clase de Schwartz*, Definición 2.7), y comprobamos que el dominio contiene a las funciones $e^{-\xi^2/2} H_M(\xi)$ que hemos encontrado.

Para calcular las normas en $L^2(\mathbb{R})$ de las funciones $e^{-\xi^2/2} H_M(\xi)$, utilizamos una descomposición del operador

$$\hat{H} = \frac{DD^* + D^*D}{2},$$

donde $D = \partial_x + x$ y $D^* = -\partial_x + x$ se denominan respectivamente operadores de *destrucción* y *creación*, ver Definición 2.12 y Lema 2.13. Tras desarrollar varias propiedades elementales de estos operadores (ver lemas 2.14, 2.15 y 2.16) se consigue demostrar el resultado central de la sección: el Teorema 2.6, que nos aporta las normas explícitas de nuestras autofunciones $e^{-\xi^2/2} H_M(\xi)$, con $M \in \mathbb{N}_0$.

Terminamos la sección dando en el Corolario 2.17 la forma final de las funciones de onda del oscilador armónico, que denotamos por u_M .

En la última sección de este capítulo nos desmarcamos completamente del libro de Levine. Nuestro objetivo entonces es estudiar la E.D.P. dependiente del tiempo (2.5.19)

$$\left. \begin{aligned} -\frac{\hbar}{i} \Psi_t &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \|x\|^2 \Psi \\ \Psi(0, x) &\equiv f(x) \\ \Psi(t, \cdot) &\in L^2(\mathbb{R}^d), \quad t \in \mathbb{R} \end{aligned} \right\}$$

Empezamos definiendo una clase \mathcal{A}_d de soluciones Ψ *admisibles* (ver Definición 2.18), y demostramos un teorema de unicidad de soluciones admisibles para la ecuación anterior; ver Teorema 2.19 y Corolario 2.20. El método utilizado es un argumento con una función de energía similar a los que se vieron en el curso de grado de E.D.P.

A continuación estudiamos cuándo existe solución de la ecuación, dependiendo de la condición inicial f . Para $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$, proponemos entonces un nuevo tipo de soluciones:

DEFINICIÓN 0.4. *Dada $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$, diremos que una sucesión $(\Psi^N)_{N \geq 0} \subset \mathcal{A}_d$ es una **solución aproximada a f** de la E.D.P.*

$$-\frac{\hbar}{i} \Psi_t = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + \|x\|^2 \Psi,$$

si Ψ^N es solución de la ecuación anterior para cada N y además se tiene que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \|\Psi^N(0, \cdot) - f\|_2 = 0.$$

Volviendo al caso $d = 1$ (en que (2.5.19) es la ecuación del oscilador armónico dependiente del tiempo), comenzamos probando que el conjunto

$$\left\{ u_n(x) = c_n H_n(x) e^{-x^2/2} \right\}_{n \in \mathbb{N}_0}$$

forma una base ortonormal de $L^2(\mathbb{R})$ (para lo que utilizamos una caracterización clásica de las bases en los espacios de Hilbert, ver Teorema 2.25, y herramientas propias del análisis de Fourier, ver Definición 2.26). A partir de aquí ya podemos deducir que para cada condición inicial $f \in L^2(\mathbb{R})$ una solución aproximada de las definidas antes viene dada explícitamente por

$$\Psi^N(t, x) = \sum_{n=0}^N \langle f, u_n \rangle e^{-i(2n+1)\pi\nu t} u_n(x), \quad N \geq 1;$$

ver Teorema 2.33. Con este resultado cerramos el capítulo 2.

En el capítulo 3, empezamos introduciendo el modelo mecano-cuántico de una partícula sometida a una fuerza central, que sirve como preámbulo al modelo del átomo de Hidrógeno (este se estudia en el Capítulo 4).

Utilizando coordenadas esféricas en el espacio y algunas consideraciones físicas, se llega a la ecuación (3.1.4)

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{1}{a} V(r) \psi + \frac{1}{r^2} \Delta_{\mathbb{S}^2} \psi = -\lambda \psi,$$

donde $\Delta_{\mathbb{S}^2}$ denota el operador Laplaciano restringido a la esfera unidad, que tiene la forma (3.1.2). Se plantea entonces una solución de la forma $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$, y se llega a las ecuaciones (3.1.5) y (3.1.6):

$$\begin{cases} -\Delta_{\mathbb{S}^2} Y = \mu Y \\ Y \in L^2(\mathbb{S}^2) \end{cases}$$

y

$$\begin{cases} r^2 R'' + 2rR' + R \left(-\frac{V(r)}{a} r^2 + \lambda r^2 - \mu \right) = 0 \\ R \in L^2((0, +\infty), r^2 dr) \cap C([0, +\infty)). \end{cases}$$

En el resto del capítulo, se estudia en profundidad la primera de estas dos ecuaciones; en el capítulo 4 se estudiará la segunda ecuación en el caso concreto del átomo de hidrógeno (es decir, cuando $V(r) = -\frac{1}{r}$).

Para resolver la ecuación (3.1.5), se separa variables en $Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$, y se obtienen así las dos ecuaciones diferenciales ordinarias, (3.2.7) y (3.2.8):

$$\begin{cases} \Theta'' = -\delta\Theta, & \theta \in (0, 2\pi) \\ \Theta(0) = \Theta(2\pi) \quad \text{y} \quad \Theta'(0) = \Theta'(2\pi) \end{cases}$$

y

$$\begin{cases} \Phi'' + \frac{\cos \phi}{\sin \phi} \Phi' + \mu \Phi = \frac{\delta}{\sin^2 \phi} \Phi, & \phi \in (0, \pi) \\ \exists \Phi(0^+), \exists \Phi(\pi^-). \end{cases}$$

La primera de las dos ecuaciones la vimos en el curso de grado de E.D.P., y tiene soluciones sólo cuando $\delta = m^2$ con $m \in \mathbb{Z}$, en cuyo caso $\Theta(\theta) = e^{\pm im\theta}$ (ver Proposición 3.1).

Para estudiar, la segunda ecuación, planteamos cambios de variable hasta llegar a la ecuación (3.2.10):

$$\begin{cases} (1-x^2) u''(x) - 2x(|m|+1) u'(x) + (\mu - |m|(|m|+1)) u(x) = 0, & x \in (-1, 1) \\ \exists \lim_{x \rightarrow 1} (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} u(x), & \exists \lim_{x \rightarrow -1} (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} u(x). \end{cases}$$

Esta ecuación la resolvemos en la sección 3 del capítulo, y el método para hacerlo difiere del utilizado en la ecuación del oscilador armónico. Lo que hacemos es estudiar primero el caso $m = 0$ y $\mu = l(l+1)$ con $l \in \mathbb{N}_0$, en el que la ecuación adquiere una forma familiar (se transforma en la *ecuación de Legendre*, como vemos en [12, pág 432]) de la que ya se conocen algunas soluciones explícitas: los *polinomios de Legendre*, que denotamos por $P_l^0(x)$ (ver Definición 3.2 y Proposición 3.3).

Posteriormente, a partir de dichos polinomios, se definen las *funciones de Legendre*

$$P_l^{|m|}(x) := (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \partial_x^{|m|} [P_l^0(x)], \quad \text{para } l \geq |m|,$$

que son soluciones de la EDO (3.2.10) cuando $\mu = l(l+1)$ (ver Definición 3.4 y Corolario 3.6).

A partir de aquí cambiamos el enfoque de nuevo al análisis funcional: en la sección 3.4 demostramos que, para cada $m \in \mathbb{Z}$, el conjunto $\{P_l^{|m|}\}_{l \geq |m|}$ forma una base ortogonal de $L^2((-1, 1))$ y calculamos las normas de sus elementos en este espacio. De esta forma, normalizando las funciones del conjunto anterior, y las de $\{e^{im\theta}\}_{m \in \mathbb{Z}}$ en $L^2((0, 2\pi))$, obtenemos bases ortonormales de sendos espacios.

A partir de la propiedad de base, y utilizando un resultado de análisis funcional (ver Proposición 3.13), demostramos que los respectivos operadores diferenciales

$$\mathcal{L}_m := - (1 - x^2) \partial_x^2 + 2x \partial_x + \frac{m^2}{1 - x^2}, \quad \text{y} \quad \partial_\theta^2,$$

(con dominios adecuados) sólo admiten las autofunciones $\{P_l^{|m|}\}_{l \geq |m|}$ y $\{e^{im\theta}\}_{m \in \mathbb{Z}}$ que ya llevamos calculadas (ver Corolario 3.14).

Por último, utilizando un resultado sobre bases tensoriales en espacios de Hilbert (ver Proposición 3.15), conseguimos demostrar que las funciones de la forma

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = e^{im\theta} P_l^{|m|}(\cos \phi), \quad l \geq |m|, \quad m \in \mathbb{Z},$$

(llamadas *armónicos esféricos*, Definición 4.1 del capítulo siguiente) forman de hecho una base ortogonal de $L^2(\mathbb{S}^2)$. Por tanto, una nueva aplicación de la Proposición 3.13 nos permitirá concluir que éstas son todas las autofunciones posibles del operador $-\Delta_{\mathbb{S}^2}$, y que sus valores propios son $\mu = l(l+1)$, con $l \in \mathbb{N}_0$ (ver Teorema 3.17). Este resultado concluye el capítulo 3.

Finalmente, en el último capítulo de este trabajo se estudia el modelo del átomo de hidrógeno, que siguiendo el libro [8] vemos que se reduce al estudio de la E.D.O. (4.1.5)

$$r^2 R'' + 2rR' + (2kr + \lambda r^2) R = l(l+1)R, \quad r \in (0, \infty),$$

(donde k tiene un cierto valor constante), sujeta a las condiciones

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr < \infty \quad \text{y} \quad \exists R(0^+).$$

Antes de resolverla, observamos que podemos limitarnos a buscar soluciones con $\lambda = -\mu^2 < 0$. Justificar este último hecho requiere un resultado de análisis funcional que se sale del ámbito del trabajo (pero damos una referencia [15, Corollary 10.4, pág 223]).

Mediante cambios de variable, transformamos la ecuación anterior en $R(r)$, obteniendo primero la ecuación (4.2.6)

$$u''(r) + \frac{2l+2}{r} u'(r) + \left(\frac{2k}{r} - \mu^2 \right) u(r) = 0,$$

y posteriormente la ecuación

$$sg''(s) + (2l+2-s)g'(s) + \left(\frac{k}{\mu} - (l+1) \right) g(s) = 0,$$

que podemos reconocer como una ecuación de tipo Laguerre.

Para el estudio de esta E.D.O. debemos utilizar un resultado auxiliar: puesto que los coeficientes de la ecuación presentan una singularidad en $s = 0$, no podemos asegurar que al plantear una solución en serie de potencias desarrollada en el origen, $g(s) = \sum_{n \geq 0} a_n s^n$, no nos estemos dejando soluciones por el camino (pues $g(s)$ en principio sólo es analítica en $s \in (0, +\infty)$).

Utilizando el Teorema 4.2 sobre puntos singulares-regulares de una EDO (que sacamos del libro de Coddington) y la condición del límite en el origen, $\exists g(0^+)$, vemos que podemos proceder de modo análogo a como hicimos para resolver la ecuación de Hermite sin temor a dejarnos soluciones.

Es decir, una vez planteado el candidato a solución en forma de serie de potencias, $g(s) = \sum_{n \geq 0} a_n s^n$, llegamos a que este tiene que ser un *Polinomio de Laguerre generalizado* $L_N^{(\alpha)}(s)$ (ver Definición 4.3), de orden $\alpha = 2l+1$ y de grado $N = \frac{k}{\mu} - (l+1) \in \mathbb{N}_0$. Por otro lado, descartamos

las soluciones que corresponden a $N \notin \mathbb{N}_0$, utilizando de nuevo el Lema 2.2 de comparación de series, que muestra que dichas soluciones no cumplen la condición de integrabilidad en L^2 requerida.

Así llegamos a encontrar todas las soluciones $R(r)$ de (4.1.5) en $L^2((0, +\infty), r^2 dr)$, que son de la forma

$$R_N(r) = r^l e^{-\frac{kr}{N+l+1}} L_N^{2l+1} \left(\frac{2kr}{N+l+1} \right);$$

ver Teorema 4.5.

Terminamos el capítulo dando las soluciones clásicas de la ecuación de Schrödinger del átomo de hidrógeno: las funciones

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_n(r) Y_{l,m}(\theta, \phi), \quad \text{con } l \in \mathbb{N}_0, n \geq l, m \in \{-l, \dots, l\},$$

que acompañadas de su constante de normalización (que calculamos en la Proposición 4.10) nos aportan las funciones de onda del átomo de Hidrógeno que se calculan en los libros de física (ver [8, pág 142] y [5, (19.52)]), llamados *orbitales hidrogenoides*. La forma explícita de estas funciones de onda se da en el Teorema 4.11, que cierra el capítulo y el trabajo.

En la elaboración de este trabajo, he seguido sobre todo el libro [8] para plantear los modelos (mirando de manera esporádica el libro [5], sobre todo para la parte radial del átomo de hidrógeno), y algunos procedimientos para la resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias las hemos sacado de [12]. Las propiedades de los polinomios ortogonales que aparecen a lo largo del trabajo las hemos consultado en [14], aunque también en [12].

Los libros [7], [15], [3] y [9] sólo los hemos utilizado como referencias de algunos resultados concretos de análisis funcional que hemos necesitado pero que se escapaban del ámbito del trabajo. También hemos utilizado los libros [4] y [11] de forma puntual en los apéndices 3 y 4 respectivamente.

Puesto que hemos utilizado algunas herramientas y resultados de Análisis Complejo y de Análisis de Fourier, hemos tenido que consultar en algunos momentos los libros [10] y [13], aunque prácticamente todas las cosas que utilizamos ya se vieron en los cursos de Variable Compleja y de Series de Fourier del grado. En el libro [2] hemos consultado todos los resultados relativos a la resolución de E.D.O.s lineales, y el libro [6] ha servido para consultar y dar referencias de los resultados más “básicos” (o sea, vistos en el grado) de Análisis Real y Análisis Funcional.

Por último, algunos argumentos presentados en este trabajo, así como el enfoque en algunas demostraciones, no aparecían de esta forma en ningún libro de la Bibliografía y han sido proporcionados por mi tutor del T.F.G., G. Garrigós.

Abstract

According to the book of Levine [8, pag 8], quantum mechanics begins in 1900 with the studies of the german physicist Max Planck.

In one of these studies, he made a theory in which he explained the experimental values obtained with the meditions of a *black-body radiation* (an object that absorbs all the light which fall upon him). In this study, he supposed that the atoms of the black body could only emit discret quantities of radiation $h\nu$, where ν is the frequency of the radiation and h is a proportionality constant. The success of Planck's theory in explaining black body radiation supposes (according to [8]) the birth of quantum mechanics.

In another of his studies, he observed the diffraction and interference effects that occurred when a beam of light passed through two small adjacent holes, resulting in samples of the wave behavior of light (which Maxwell anticipated in the 19th century).

Shortly afterwards (in 1905), Einstein showed that in some experimental observations on light (in particular, when studying the *photoelectric effect*, see [8, pag 3]), it manifested a corpuscular behavior (it appeared to be formed by discrete particles , which Einstein called *photons*).

These studies on the nature of light and subsequent experiments with electrons (you can read the slit experiment, explained in Feynman's book [5, Chapter 1]) showed one of the strangest properties of microscopic objects: their duality in behavior as *waves* and as *particles*.

This wave-particle duality, together with the discrete experimental measurements on the energetic values, suppose the fundamental principles of quantum mechanics: the study of the subatomic particles with wave models and only admitting discrete theoretical values for energy. Here the *Time Dependent Schrödinger's Equation* comes into play (1.1.1):

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(t, x)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V \Psi, \quad x \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^d, \quad t \in \mathbb{R}.$$

This is a partial derivative equation that somehow explains the behavior of the fundamental particles. The way in which this equation models the behavior of microscopic particles is explained in Chapter 1 of this paper.

In this chapter, the notation and concepts to be used throughout the paper are introduced. We begin by solving this equation by separation of variables, proposing a solution in the form $\Psi(t, x) = \tau(t)\psi(x)$, where τ and ψ are smooth functions (in the sense of Definition 1.1), obtaining a trivial solution for τ (Proposition 1.2) and arriving at the *Schrödinger's Equation* (1.1.2) for ψ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V \psi = E \psi, \quad \text{en } \Omega \subset \mathbb{R}^d,$$

which is the central object of all work. In physics books (the ones we have followed are [5] and [8]) this equation is normally studied for models in which $v = V(x)$ (this is going to be the case of the **Harmonic Oscillator** and **Hydrogen Atom models**, which are the ones that we are going to study), but it is usually done in a not too rigorous way, and leaving mathematical subtleties unexplained.

Following mainly Levine's book [8] to introduce the models and equations, our objective with this work is to study the Schrödinger equation for the aforementioned models, obtaining the classic solutions of the equations, which obtain the physicists, with the greatest possible mathematical correction.

To achieve this, we will always propose analytic solutions of (1.1.2) or that are products of analytic functions if they have more than one variable (see Definition 5.6 of Appendix 1). In order to find all possible solutions, it will often be convenient to change the focus of the problem transforming the study of the E.D.P. (1.1.2) in the study of spectral theory of its associated differential operator: the Hamiltonian operator, which we define in section 2 of chapter 1.

DEFINICIÓN 0.5. *If $V \in \mathcal{C}(\Omega)$ we define the following (formal) differential operator:*

$$\hat{H} := -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V.$$

*We will refer to it as the **quantum mechanical Hamiltonian operator** (or simply **Hamiltonian operator**).*

In analogy with the physical evidence for discrete energy values in experiments, we will only look for eigenfunctions with discrete E values (see definitions 1.5 and 1.6).

We are interested in a particular type of eigenfunctions of this operator:

DEFINICIÓN 0.6. *Let \hat{H} the Hamiltonian operator of a certain system, defined over a subspace X of $L^2(\Omega)$. A certain function $\psi \in X$ is a **wave function** asociated to the energy state $E \in \sigma_d(\hat{H})$ if ψ is an eigenfunction of \hat{H} with eigenvalue E and*

$$\|\psi\|_2^2 = \int_{\Omega} |\psi(x)|^2 dx = 1,$$

where we take the integrals above with the Lebesgue's measure dx .

*We will call the values $E \in \sigma_d(\hat{H})$ **admissible energy values** of the system.*

Thus, throughout the work we will ask our solutions ψ of (1.1.2) at least (together with the aforementioned analytic condition) that they are in $L^2(\Omega)$ (see Definition 1.4), where $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ will be an open subset that will depend on the model we are studying.

Already in Chapter 2, we began with the study of one of the most famous models of quantum mechanics: that of the Harmonic Oscillator. It begins with an introduction to the physical problem following the book [8], concluding that the wave function $u(x)$ must satisfy the equation (2.1.1)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u''(x) + 2\pi^2\nu^2mx^2u(x) = Eu(x), \quad x \in \mathbb{R},$$

for certain energy values $E \in \mathbb{R}$ which we will deter. Instead of solving this equation directly, reducing to more manageable constants, we study the E.D.O. (2.2.2)

$$-u''(x) + (ax)^2u(x) = bu(x)$$

in section 2 of this chapter. To solve it, some changes of variable are successively proposed, $v(\xi) = u\left(\frac{x}{\sqrt{a}}\right)$ y $v(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}}f(\xi)$, that transform it into the new E.D.O. (2.2.4)

$$-f''(\xi) + 2\xi f'(\xi) + (1 - \lambda)f(\xi) = 0.$$

Posing a solution in power series of this equation, we naturally arrive at the *Hermite polynomials* $H_M(x)$ (see Definition 2.3).

The equation also has other non-polynomial solutions, but using the Lemma 2.2 we show that these solutions can be ruled out. More precisely, we prove the following result

TEOREMA 0.7. *The function $v(\xi)$ is a non-null solution of*

$$-v''(\xi) + \xi^2v(\xi) = \lambda v(\xi) \quad \text{and} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |v(\xi)|^2 d\xi < +\infty,$$

if, and only if $\lambda = 2M + 1$ for some $M \in \mathbb{N}_0$ and

$$v(\xi) = Ce^{-\frac{\xi^2}{2}}H_M(\xi).$$

From this the Corollary 2.5 follows, which ends with the study of the Schrödinger Equation of the Harmonic Oscillator.

Once all the $v_M(\xi)$ solutions have been found, to obtain the wave functions of the harmonic oscillator we must normalize them to $L^2(\mathbb{R})$. This is what we do in Section 3 of Chapter 2, where we use the Hamiltonian operator associated with (2.2.2), that is

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{xx} + 2\pi^2\nu^2mx^2.$$

From here I follow some notes provided by my tutor G. Garrigós. The first thing we do is define a suitable domain for this operator (the *Schwartz class*, Definition 2.7), and we check that the domain contains the functions $e^{-\xi^2/2}H_M(\xi)$ that we have found.

To calculate the norms in $L^2(\mathbb{R})$ of the functions $e^{-\xi^2/2}H_M(\xi)$, we use a decomposition of the operator

$$\hat{H} = \frac{DD^* + D^*D}{2},$$

where $D = \partial_x + x$ and $D^* = -\partial_x + x$ are respectively called *destruction* and *creation* operators, see Definition 2.12 and Lemma 2.13. After developing several elementary properties of these operators (see lemmas 2.14, 2.15 and 2.16) it is possible to prove the central result of the section: Theorem 2.6, which provides the explicit norms for our autofunctions $e^{-\xi^2/2}H_M(\xi)$, with $M \in \mathbb{N}_0$.

We finish the section by giving in the Corollary 2.17 the final form of the wave functions of the harmonic oscillator, which we denote by u_M .

In the last section of this chapter we completely distance ourselves from Levine's book. Our goal then is to study the E.D.P. time dependent (2.5.19)

$$\left. \begin{aligned} -\frac{\hbar}{i}\Psi_t &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \|x\|^2\Psi \\ \Psi(0, x) &\equiv f(x) \\ \Psi(t, \cdot) &\in L^2(\mathbb{R}^d), \quad t \in \mathbb{R} \end{aligned} \right\}$$

We start by defining a class \mathcal{A}_d of solutions Ψ *admissible* (see Definition 2.18), and we prove a theorem of uniqueness of admissible solutions for the previous equation; see Theorem 2.19 and Corollary 2.20. The method used is an argument with an energy function similar to those seen in the E.D.P.

Next we study when there is a solution to the equation, depending on the initial condition f . For $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$, we then propose a new type of solution:

DEFINICIÓN 0.8. *Let $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$, a certain sequence $(\Psi^N)_{N \geq 0} \subset \mathcal{A}_d$ is an **approximated solution to f of the E.D.P.***

$$-\frac{\hbar}{i}\Psi_t = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + \|x\|^2\Psi,$$

if Ψ^N is a solution of the equation for all N and

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \|\Psi^N(0, \cdot) - f\|_2 = 0.$$

Returning to the case $d = 1$ (where (2.5.19) is the time-dependent harmonic oscillator equation), we begin by proving that the set

$$\left\{ u_n(x) = c_n H_n(x) e^{-x^2/2} \right\}_{n \in \mathbb{N}_0}$$

forms an orthonormal basis of $L^2(\mathbb{R})$ (for which we use a classical characterization of the bases in Hilbert spaces, see Theorem 2.25, and tools of Fourier analysis, see Definition 2.26). From here we can already deduce that for each initial condition $f \in L^2(\mathbb{R})$ an approximate solution of those defined above is given explicitly by

$$\Psi^N(t, x) = \sum_{n=0}^N \langle f, u_n \rangle e^{-i(2n+1)\pi\nu t} u_n(x), \quad N \geq 1;$$

see Theorem 2.33. With this result we close chapter 2.

In Chapter 3, we began by introducing the quantum-mechanical model of a particle subjected to a central force, which serves as an introduction to the model of the Hydrogen atom (this is discussed in Chapter 4).

Using spherical coordinates in space and some physical considerations, we arrive at the equation (3.1.4)

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{1}{a} V(r) \psi + \frac{1}{r^2} \Delta_{\mathbb{S}^2} \psi = -\lambda \psi,$$

where $\Delta_{\mathbb{S}^2}$ denotes the Laplacian operator restricted to the unit sphere, which has the form (3.1.2). A solution of the form $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$ is then proposed, and we arrive at the equations (3.1.5) and (3.1.6):

$$\begin{cases} -\Delta_{\mathbb{S}^2} Y = \mu Y \\ Y \in L^2(\mathbb{S}^2) \end{cases}$$

and

$$\begin{cases} r^2 R'' + 2rR' + R \left(-\frac{V(r)}{a} r^2 + \lambda r^2 - \mu \right) = 0 \\ R \in L^2((0, +\infty), r^2 dr) \cap \mathcal{C}([0, +\infty)). \end{cases}$$

In the remanding chapter, the first of these two equations is studied in depth; in chapter 4 the second equation will be studied in the specific case of the hydrogen atom (that is, when $V(r) = -\frac{1}{r}$).

To solve the equation (3.1.5), we separate variables in $Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$, and they are obtained the two ordinary differential equations, (3.2.7) and (3.2.8):

$$\begin{cases} \Theta'' = -\delta \Theta, & \theta \in (0, 2\pi) \\ \Theta(0) = \Theta(2\pi) \quad \text{y} \quad \Theta'(0) = \Theta'(2\pi) \end{cases}$$

and

$$\begin{cases} \Phi'' + \frac{\cos \phi}{\sin \phi} \Phi' + \mu \Phi = \frac{\delta}{\sin^2 \phi} \Phi, & \phi \in (0, \pi) \\ \exists \Phi(0^+), \exists \Phi(\pi^-). \end{cases}$$

We saw the first of the two equations in the P.D.E. degree course, and it has solutions only when $\delta = m^2$ with $m \in \mathbb{Z}$, in which case $\Theta(\theta) = e^{\pm im\theta}$ (see Proposition 3.1).

To study the second equation, we propose changes of variable until we reach the equation (3.2.10):

$$\begin{cases} (1-x^2) u''(x) - 2x(|m|+1) u'(x) + (\mu - |m|(|m|+1)) u(x) = 0, & x \in (-1, 1) \\ \exists \lim_{x \rightarrow 1} (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} u(x), & \exists \lim_{x \rightarrow -1} (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} u(x). \end{cases}$$

We solve this equation in section 3 of the chapter, and the method to do so differs from that used in the harmonic oscillator equation. We first study the case $m = 0$ and $\mu = l(l+1)$ with $l \in \mathbb{N}_0$, in which the equation takes on a familiar form (becomes the *Legendre equation*, as we see in [12, page 432]) for which some explicit solutions are already known: the *Legendre polynomials*. We denote them by $P_l^0(x)$ (see Definition 3.2 and Proposition 3.3).

Later, from these polynomials, the emph Legendre functions

$$P_l^{|m|}(x) := (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \partial_x^{|m|} [P_l^0(x)], \quad \text{for } l \geq |m|,$$

which are solutions of the ODE (3.2.10) when $\mu = l(l+1)$ (see Definition 3.4 and Corollary 3.6).

From now on we shift the focus back to functional analysis: in section 3.4 we showed that, for every $m \in \mathbb{Z}$, the set $\{P_l^{|m|}\}_{l \geq |m|}$ forms an orthogonal base of $L^2((-1, 1))$ and we calculate the norms of its elements in this space. In this way, normalizing the functions of the previous set, and those of $\{e^{im\theta}\}_{m \in \mathbb{Z}}$ in $L^2((0, 2\pi))$, we obtain orthonormal bases of two spaces.

Starting from the base property, and using a result of functional analysis (see Proposition 3.13), we show that the differential operators

$$\mathcal{L}_m := - (1 - x^2) \partial_x^2 + 2x\partial_x + \frac{m^2}{1 - x^2}, \quad y \quad \partial_\theta^2,$$

(with suitable domains) only support the eigenfunctions $\{P_l^{|m|}\}_{l \geq |m|}$ and $\{e^{im\theta}\}_{m \in \mathbb{Z}}$ that we have already calculated (see Corollary 3.14).

Finally, using a result on tensor bases in Hilbert spaces (see Proposition 3.15), we can prove that the functions of the form

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = e^{im\theta} P_l^{|m|}(\cos \phi), \quad l \geq |m|, \quad m \in \mathbb{Z},$$

(called *spherical harmonics*, Definition 4.1 in the next chapter) actually form an orthogonal base of $L^2(\mathbb{S}^2)$. Therefore, a new application of the Proposition 3.13 allow us to conclude that these are all the possible eigenfunctions of the operator $-\Delta_{\mathbb{S}^2}$, and that their eigenvalues are $\mu = l(l + 1)$, with $l \in \mathbb{N}_0$ (see Theorem 3.17). With this theorem we conclude Chapter 3.

Finally, in the last chapter of this work the model of the hydrogen atom is studied, which, following the book [8] we see that it is reduced to the study of the O.D.E. (4.1.5)

$$r^2 R'' + 2rR' + (2kr + \lambda r^2) R = l(l + 1)R, \quad r \in (0, \infty),$$

(where k has a certain constant value), subject to the conditions

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr < \infty \quad y \quad \exists R(0^+).$$

Before solving it, we note that we can limit ourselves to looking for solutions with $\lambda = -\mu^2 < 0$. Justifying this last fact requires a result of functional analysis that is outside the scope of the work (but we give a reference [15, Corollary 10.4, page 223]).

By changing the variable, we transform the previous equation with variable $R(r)$, first obtaining the equation (4.2.6)

$$u''(r) + \frac{2l + 2}{r} u'(r) + \left(\frac{2k}{r} - \mu^2 \right) u(r) = 0,$$

and later the equation

$$sg''(s) + (2l + 2 - s)g'(s) + \left(\frac{k}{\mu} - (l + 1) \right) g(s) = 0,$$

which we can recognize as a Laguerre-type equation.

For the study of this O.D.E. we must use an auxiliary result: since the coefficients of the equation present a singularity at $s = 0$, we cannot assure that when proposing a solution in power series developed at the origin, $g(s) = \sum_{n \geq 0} a_n s^n$, we are not leaving solutions along the way (because $g(s)$ in principle is only analytic in $s \in (0, +\infty)$).

Using the Theorem 4.2 on singular-regular points of an O.D.E. (which we got from Coddington's book) and the limit condition at the origin, $\exists g(0^+)$, we see that we can proceed so as to how we did to solve the Hermite equation without the fear of lose solutions.

That is, once the candidate solution has been proposed in the form of a power series, $g(s) = \sum_{n \geq 0} a_n s^n$, we arrive at that this has to be a generalized *Laguerre polynomial* $L_N^{(\alpha)}(s)$ (see Definition 4.3), of order $\alpha = 2l + 1$ and of degree $N = \frac{k}{\mu} - (l + 1) \in \mathbb{N}_0$. On the other hand, we discard the solutions that correspond to $N \notin \mathbb{N}_0$, again using the Lemma 2.2, which shows that those solutions do not satisfy the required integrability condition in L^2 .

Thus we get to find all the solutions $R(r)$ of (4.1.5) in $L^2((0, +\infty), r^2 dr)$, which are of the form

$$R_N(r) = r^l e^{-\frac{kr}{N+l+1}} L_N^{2l+1} \left(\frac{2kr}{N+l+1} \right);$$

see Theorem 4.5.

We finish the chapter by giving the classical solutions of the Schrödinger equation of the hydrogen atom: the functions

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_n(r)Y_{l,m}(\theta, \phi), \quad \text{con } l \in \mathbb{N}_0, n \geq l, m \in \{-l, \dots, l\},$$

that with its normalization constant (which we calculated in Proposition 4.10) give us the wave functions of the Hydrogen atom that are calculated in physics books (see [8, page 142] and [5, (19.52)]), called *hydrogen orbitals*. The explicit form of these wave functions is given in Theorem 4.11, which closes the chapter and the paper.

In the preparation of this work, I have followed the book cite levine above all to propose the models (looking at the [5] book especially for the radial part of the hydrogen atom), and we have taken some procedures for solving ordinary differential equations from [12]. We have seen the properties of the orthogonal polynomials that appear throughout the work in [14], but also in [12].

We have used the books [7], [15], [3] and [9] only as references for some specific results of functional analysis that we have needed but that escaped from the scope of work. We have also used the books [4] and [11] in appendix 3 and 4 respectively.

Since we have used some tools and results from Complex Analysis and Fourier Analysis, we have had to consult the books [10] and [13] at times, although almost all the things that we use were already seen in the courses of Complex Variable and Fourier Series of the degree. We have consulted all the results related to the resolution of linear O.D.E.s in the book [2], and the book [6] was used to consult and give references of the most "basic" results (that is, seen in the degree) of Real Analysis and Functional Analysis.

Finally, some arguments presented in this paper, as well as the approach in some proofs, did not appear in this way in any book in the Bibliography and have been provided by my paper's director, G. Garrigós.

Preliminares

1. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

La mecánica cuántica es una teoría física que explica el comportamiento de las partículas microscópicas. Según su principal postulado, para describir el estado de un sistema de una o varias partículas a lo largo del tiempo se utilizan las llamadas *funciones de onda*. Estas son funciones

$$\Psi(t, x) : \mathbb{R} \times \Omega \longrightarrow \mathbb{C}, \quad \Omega \subset \mathbb{R}^d \text{ abierto,}$$

que satisfacen la E.D.P.:

$$(1.1.1) \quad -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V \Psi,$$

que se conoce como la **ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo**.

A las coordenadas x de la función las llamaremos *coordenadas espaciales* y a la coordenada t nos referiremos como la *coordenada temporal*.

En la ecuación anterior, m es la masa de la partícula y $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, con $h \approx 6,626 \cdot 10^{-34}$ una constante física llamada *constante de Planck* (con unidades $\text{m}^2\text{Kg}/\text{seg}$). La función $V = V(x, t)$ toma valores reales, y representa la *energía potencial del sistema*. Su forma explícita va a depender del modelo mecano-cuántico concreto que estemos estudiando.

El símbolo Δ representa el **operador Laplaciano en coordenadas canónicas**, y se define explícitamente como

$$\Delta = \partial_{x_1}^2 + \cdots + \partial_{x_d}^2.$$

Obsérvese que el Laplaciano sólo afecta a las coordenadas espaciales.

El científico austriaco Erwin Schrödinger derivó esta ecuación en 1926 a través de una analogía entre la óptica y la mecánica, dos teorías físicas formales que ya estaban asentadas. Dada la forma no heurística de su deducción, la interpretación de las funciones de onda Ψ fue ambigua hasta mucho tiempo después de que se empezase a desarrollar la mecánica cuántica.

La interpretación física de las funciones de onda Ψ que terminó por aceptarse, postulada por primera vez por el físico Max Born poco después de que Schrödinger presentase al mundo su ecuación, es que para cada instante temporal $t \in \mathbb{R}$ y región del espacio $E \subset \Omega$, el valor

$$\int_E |\Psi(t, x)|^2 dx$$

nos aporta la probabilidad de encontrar a la partícula (o partículas) en la región (o conjunto de regiones) E .

Por lo tanto, $\Psi(t, x)$ por sí sola no nos dice nada concreto acerca de la posición del sistema de partículas, sino que es $|\Psi(t, x)|^2$ (el cuadrado de su módulo) la que nos aporta información, y para cada t fijo nos aporta una densidad de probabilidad sobre la posición del sistema en una región del espacio Ω . De aquí se deduce inmediatamente una condición que hay que imponer sobre la función Ψ , y es que valga

$$\int_{\Omega} |\Psi(t, x)|^2 dx = 1, \quad \forall t \in \mathbb{R}.$$

En razón del carácter probabilístico de la teoría cuántica, la mecánica introducida por Schrödinger fue acogida con una cierta desconfianza entre los físicos de principios del siglo XX. Es bien

conocida la frase “Dios no juega a los dados”, atribuida a Albert Einstein al expresar su opinión acerca de la teoría cuántica, pero se cree que hasta Schrödinger (su propio creador) llegó a renegar de ella.

Sin embargo, la utilidad de las funciones de onda para estudiar el comportamiento de los sistemas microscópicos ha sido probada en multitud de experimentos, y hoy en día la mecánica cuántica está consolidada como uno de los grandes logros de la física moderna.

En todo el trabajo buscaremos soluciones de EDPs que tengan una cierta regularidad: es decir, vamos a imponer que nuestras funciones sean tan derivables como se necesite para que cumplan la ecuación que estemos estudiando.

DEFINICIÓN 1.1. Dado $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ abierto y $n \in \mathbb{N}$, se define $\mathcal{C}^n(\Omega)$ como el conjunto de funciones continuas $f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ tales que para cualquier $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d) \in \mathbb{N}^d$ con

$$|\alpha| = \alpha_1 + \dots + \alpha_d \leq n$$

existen y son continuas las derivadas parciales

$$\partial^\alpha [f](x) = \frac{\partial^{|\alpha|} f}{\partial x^\alpha}(x) = \frac{\partial^{|\alpha|} f}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_d^{\alpha_d}}(x).$$

Extendiendo la definición anterior, $\mathcal{C}^\infty(\Omega)$ denota el conjunto de funciones continuas definidas en Ω que admiten derivadas parciales de cualquier orden. También, identificamos $\mathcal{C}^0(\Omega)$ con $\mathcal{C}(\Omega)$, el conjunto de funciones continuas definidas en Ω .

Por último, si $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ es acotado, decimos que $f \in C^m(\bar{\Omega})$ si $f : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{C}$ es de clase $C^m(\Omega)$ y todas sus derivadas $\partial^\alpha f(x)$, con $|\alpha| \leq n$, se extienden de forma continua a $x \in \bar{\Omega}$.

Notación: En todo este trabajo consideramos $\mathbb{N} = \{1, 2, \dots\}$, mientras que para referirnos a los naturales con el cero usamos la notación $\mathbb{N}_0 = \mathbb{N} \cup \{0\}$.

En los modelos físicos que vamos a estudiar nosotros, la energía potencial del sistema no varía con el tiempo: esto es, $V = V(x)$ es función sólo de las coordenadas espaciales. En este caso, se puede probar a encontrar soluciones de (1.1.1) por el *método de separación de variables*.

Planteamos entonces una solución de (1.1.1) de la forma

$$\Psi(t, x) = \tau(t)\psi(x), \quad \text{con } \tau \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}) \quad \text{y} \quad \psi \in \mathcal{C}^2(\Omega).$$

Sustituyendo en la ecuación (1.1.1)

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i}\tau'(t)\psi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\tau(t)\Delta\psi(x) + V(x)\tau(t)\psi(x) \\ -\frac{\hbar}{i}\frac{\tau'(t)}{\tau(t)} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\psi(x)}{\psi(x)} + V(x), \end{aligned}$$

donde en la segunda ecuación hemos dividido formalmente entre $\tau\psi$ (esto es, sin preocuparnos por si alguna de las dos funciones se anula en algún punto). Fijémonos en esta última ecuación.

En ella, la parte izquierda de la igualdad depende de t y la derecha de x . Sin embargo, la parte derecha de esta ecuación no depende de t , de forma que ambos miembros deben ser independientes de t . Del mismo modo, el lado izquierdo de la ecuación es independiente de x , luego ambos miembros deben ser independientes de x . Así, se tiene que

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\tau'(t)}{\tau(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\psi(x)}{\psi(x)} + V(x) = E,$$

para una cierta constante $E \in \mathbb{C}$, de manera que el estudio de la ecuación (1.1.1) se reduce al estudio de las dos ecuaciones

$$\tau' = -\frac{i}{\hbar}E\tau \quad \text{y} \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi = E\psi.$$

La primera de las dos ecuaciones anteriores tiene solución trivial. Utilizamos el siguiente resultado:

PROPOSICIÓN 1.2. *Consideremos la E.D.O. lineal*

$$y' + ay = 0$$

donde a es una cierta constante compleja. Entonces $\phi = \phi(t)$ es solución de la ecuación si, y sólo si

$$\phi(t) = ce^{-at}, \quad c \in \mathbb{C}.$$

DEMOSTRACIÓN. Por un lado, si ϕ es solución de la ecuación entonces:

$$\begin{aligned} \phi'(t) + a\phi(t) = 0 \quad \forall t &\iff e^{at}(\phi'(t) + a\phi(t)) = 0 \quad \forall t \\ &\iff (e^{at}\phi(t))' = 0 \quad \forall t. \end{aligned}$$

Por lo tanto, existe una cierta constante $c \in \mathbb{C}$ tal que

$$e^{at}\phi(t) = c \implies \phi(t) := ce^{-at}.$$

Recíprocamente, dada $\phi(t) := ce^{-at}$ para un cierto $c \in \mathbb{C}$ cualquiera, es inmediato que esta es solución de la ecuación del enunciado, pues

$$\phi'(t) + a\phi(t) = -ace^{-at} + ace^{-at} = 0.$$

□

Tomando pues $\tau(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$, planteamos soluciones de (1.1.1) de la forma

$$\Psi(x, t) := e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(x),$$

donde ψ es solución de

$$(1.1.2) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V\psi = E\psi, \quad \text{en } \Omega \subset \mathbb{R}^d.$$

A esta última se le conoce como la **ecuación de Schrödinger independiente del tiempo**, aunque a veces se le llama simplemente *ecuación de Schrödinger*. Físicamente, se postula que si ψ es solución de (1.1.2) para una cierta constante E , entonces E es la energía total del sistema en el estado dado por ψ (ver Definición 1.6 más abajo).

Nuestro objetivo en este trabajo es resolver la ecuación (1.1.2) para distintos valores concretos del potencial $V(x)$.

Remarcamos en este punto que nuestro acercamiento a la E.D.P. (1.1.2) va a ser puramente analítico. Es decir, vamos a buscar *soluciones explícitas* por métodos usuales de análisis que se han visto en el grado. Además pediremos a las soluciones que sean cuadrado-integrables (la condición mínima para tener funciones de onda), y que sean suficientemente suaves (de hecho serán *funciones analíticas*), y en su caso, si Ω es no acotado, pediremos también suficiente decaimiento cuando $|x| \rightarrow \infty$. Estas hipótesis permitirán justificar matemáticamente que los candidatos a solución que encontremos sean realmente soluciones clásicas.

En general, lo que haremos para resolver (1.1.2) cuando estemos en \mathbb{R}^d con $d > 1$ será utilizar el método de separación de variables para expresar la solución como producto de funciones de una variable y supondremos que estas son analíticas en el origen. El buscar soluciones de este tipo nos va a aportar ciertas facilidades, pues podremos siempre suponer que nuestras soluciones son infinitamente derivables en su dominio.

Conviene observar que con este acercamiento quizá nos dejemos soluciones de (1.1.2). En efecto, fija una cierta función potencial $V(x)$, una solución ψ de la ecuación en principio no tendría siquiera por qué admitir derivadas de cualquier orden. Sin embargo, las soluciones que vamos a encontrar coinciden con las soluciones clásicas que se manipulan en los libros de física, y en la mayoría de las ecuaciones que vamos a ver podremos demostrar que el buscar soluciones analíticas no es en absoluto restrictivo.

2. El operador Hamiltoniano

En algunos libros (veáse [8]), los modelos físicos de la mecánica cuántica con potencial no variable con el tiempo (llamados *modelos estacionarios*) se plantean directamente con la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (1.1.2).

Esto tiene un cierto sentido por el hecho de que, al separar variables en (1.1.1), la variable t deja de aportar información, pues

$$|\Psi(t, x)|^2 = |e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(x)|^2 = |\psi(x)|^2.$$

Al centrarse directamente en (1.1.2), los físicos admiten implícitamente que todas las soluciones de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo tienen las variables separadas. Esto sin embargo no tiene por qué ser cierto en general, aunque nosotros veremos que bajo ciertas condiciones podremos descartar la existencia de soluciones sin las variables separadas (es decir, que no sean de la forma $\Psi(t, x) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(x)$ con $\psi(x)$ solución de (1.1.2)).

Centrándonos entonces en (1.1.2), los modelos de la mecánica cuántica se pueden derivar a partir de los de la mecánica clásica si utilizamos el operador Hamiltoniano.

En el siglo XIX, el científico irlandés Sir William Rowan Hamilton desarrolló una forma alternativa de las ecuaciones del movimiento de Newton basada en la formulación de una función H llamada con el tiempo función Hamiltoniana.

Para un sistema cuya energía potencial no depende del tiempo (es decir, es función únicamente de las coordenadas de las partículas), la energía total permanece constante con el tiempo. Si $T(x)$ y $V(x)$ denotan las funciones de energía cinética y potencial del sistema respectivamente, la función Hamiltoniana del sistema no es más que la energía total del sistema expresada en coordenadas y en términos de los *momentos lineales*

$$H(x) = T(x) + V(x) = \frac{\|\vec{p}\|^2}{2m} + V(x),$$

donde, si $x \in \mathbb{R}^d$ denota el vector posición de la partícula (o sistema de partículas) entonces se define el momento lineal como $\vec{p} = m \frac{dx}{dt}$.

Según la formulación moderna de la teoría cuántica, a cada propiedad física observable (por ejemplo, la energía o el momento) le corresponde un **operador diferencial**. Los operadores diferenciales son aplicaciones lineales que se definen en términos de derivadas parciales y actúan sobre funciones. En particular, uno de los principales postulados de la teoría cuántica establece que al módulo de la función momento lineal anterior (que depende de la variable temporal t) le corresponde el operador mecanocuántico

$$\hat{p} := -i\hbar\nabla,$$

donde el símbolo ∇ denota el **operador gradiente** (respecto a las variables espaciales x), que encontramos definido en la Definición 5.5 del Apéndice 2.

Por lo tanto, obtenemos que la energía cinética de un sistema mecanocuántico tiene asociado el operador

$$\hat{T} = \frac{1}{2m} \hat{p} \cdot \hat{p}^T = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot \nabla = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta.$$

Entonces, en analogía con la función Hamiltoniana, podemos definir el siguiente operador para la energía total de un sistema mecanocuántico:

DEFINICIÓN 1.3. Dada $V \in \mathcal{C}(\Omega)$ se define el siguiente operador diferencial (formal)

$$\hat{H} := -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V.$$

Nos referiremos a él como el **operador Hamiltoniano mecanocuántico** (o simplemente **operador Hamiltoniano**).

Se postula entonces que los autovalores del operador \hat{H} (visto como operador lineal en un espacio de Hilbert, con un dominio adecuado) nos aportan los valores de energía posibles del sistema. Así, dada la naturaleza *discreta* de los valores propios de un operador lineal, es de esperar que el conjunto de energías admisibles en un sistema mecanocuántico varíe también de forma discreta (de ahí el nombre de cuántica de la teoría).

Esta es la principal diferencia de la mecánica cuántica respecto a la mecánica clásica, en la que la energía total del sistema estaba dada por la función Hamiltoniana, que tomaba valores continuos.

Obsérvese que, para cada E autovalor de \hat{H} , sus funciones propias asociadas se calculan resolviendo la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, es decir

$$\hat{H}\psi = E\psi,$$

que coincide con (1.1.2). Hemos transformado así el estudio de la E.D.P. (1.1.2) en el estudio del espectro de un operador diferencial. Nos metemos así en el ámbito del análisis funcional, y conviene fijar algo de notación antes de continuar.

DEFINICIÓN 1.4. Dado $I \subseteq \mathbb{R}^d$ abierto y una función peso $w(x) > 0$, denotamos por $L^2(I, w(x) dx)$ al espacio de Hilbert formado por las funciones medibles $f : I \rightarrow \mathbb{C}$ cuyo módulo al cuadrado es integrable en el sentido Lebesgue sobre I , junto con el producto escalar dado por

$$\langle f, g \rangle = \int_I f(x) \overline{g(x)} w(x) dx \quad \forall f, g \in L^2(I, w(x) dx).$$

Cuando escribamos $L^2(I)$, quedará implícito que la función peso $w(x)$ en el producto escalar es la función idénticamente la unidad.

Observemos que, como poco, podemos asumir que todas las funciones de onda (es decir, las autofunciones de \hat{H} que nos interesan) van a estar contenidas en $L^2(\Omega)$. Una función que esté en este conjunto diremos a veces que es **cuadráticamente integrable sobre Ω** .

Respecto al operador Hamiltoniano, en general lo definiremos sobre algún subconjunto denso de $L^2(\Omega)$. Las condiciones de contorno o de regularidad que imponamos en la E.D.P. (1.1.2) se traducirán como restricciones en el dominio de \hat{H} , y habrá que especificarlo en cada caso.

Es importante notar que $L^2(\Omega)$ es un espacio de dimensión infinita, y que el operador \hat{H} en general no va a ser acotado. En espacios de dimensión finita todos los operadores lineales son acotados y el estudio de su espectro es trivial. En dimensión infinita el análisis espectral es bastante más complejo. Aunque un estudio detallado se sale del ámbito del trabajo, sí podemos dar algunas definiciones básicas; ver [15, p. 145].

DEFINICIÓN 1.5. Sea

$$A : X \rightarrow \mathbb{H}$$

un operador lineal definido sobre un subespacio denso X en un espacio de Hilbert \mathbb{H} . Llamamos **resolvente de A** al conjunto definido por

$$\rho(A) = \{z \in \mathbb{C} : (A - zI) \text{ biyectiva y } (A - zI)^{-1} \text{ continua}\}.$$

Al complementario de este conjunto lo llamamos **espectro de A** , y lo denotamos por

$$\sigma(A) = \mathbb{C} \setminus \rho(A).$$

DEFINICIÓN 1.6. Sea $\lambda \in \sigma(A)$. Si $(A - \lambda I)$ no es inyectiva se dice que λ es un **autovalor** de A . Al conjunto de los autovalores de A se le llama **espectro puntual de A** , y lo denotamos con el símbolo $\sigma_p(A)$.

Llamamos **espectro discreto** al subconjunto $\sigma_d(A)$ de $\sigma_p(A)$ formado por los autovalores λ que son aislados y de multiplicidad finita.

Se llama **espectro esencial de A** al conjunto $\sigma_e(A) = \sigma(A) \setminus \sigma_d(A)$.

En el estudio de la ecuación de Schrödinger (1.1.2), lo que nos interesa son los valores discretos de E para los que existe alguna solución en $L^2(\Omega)$. Si definimos \hat{H} en un subconjunto adecuado de $L^2(\Omega)$, esto se traduce en que E tiene que estar en el espectro discreto de \hat{H} . En todo el trabajo vamos a utilizar la siguiente notación:

DEFINICIÓN 1.7. Sea \hat{H} el operador Hamiltoniano mecanocuántico de un cierto sistema, definido sobre un subespacio X de $L^2(\Omega)$. Se dice que una cierta función $\psi \in X$ es una **función de onda** asociada al estado de energía $E \in \sigma_d(\hat{H})$ si ψ es una autofunción de \hat{H} de valor propio E y además

$$\|\psi\|_2^2 = \int_{\Omega} |\psi(x)|^2 dx = 1,$$

donde las integrales las tomamos siempre respecto de la medida de Lebesgue dx .

A los valores $E \in \sigma_d(\hat{H})$ los llamaremos **valores de energía admisibles** del sistema.

A partir de ahora utilizamos $\|\cdot\|_2$ para referirnos a la norma del espacio $L^2(\Omega, w(x) dx)$ en el que estemos trabajando. Cuando la norma no lleve sufijo, nos estaremos refiriendo a la norma usual de \mathbb{R}^d (aunque por el contexto se sabrá cuál estaremos utilizando en cada caso, claro).

En algunos libros también se le atribuye un sentido físico a los valores de $\sigma_e(\hat{H})$, aunque suelen mencionarse de soslayo o como casos de algunos sistemas límite (véase la partícula libre en [8, pág 28]). Nosotros vamos a centrarnos sólo en el espectro discreto del operador Hamiltoniano, que será el que nos aporte las funciones de onda.

Nuestro procedimiento en los próximos capítulos va a ser el siguiente: deduciremos la forma del operador Hamiltoniano del modelo que estemos estudiando, y nuestro objetivo entonces será calcular sus valores de energía admisibles y sus funciones de onda asociadas. Sin embargo, para calcularlos no utilizaremos técnicas puramente de análisis funcional (aunque no renegaremos del análisis funcional, ni mucho menos), sino que estudiaremos las ecuaciones de Schrödinger asociadas.

En la mayoría de los libros modernos sobre la teoría cuántica (sobre todo los orientados a matemáticos) se estudia la teoría espectral del operador \hat{H} en general y con gran profundidad y se calculan sus autofunciones utilizando la transformada de Fourier (véase [15] y [7]). Los operadores se definen entonces en el dominio más grande en el que tienen sentido (los espacios de Sobolev) y el espectro se calcula considerando las autofunciones en ese dominio. Nosotros lo que haremos será definir \hat{H} en conjuntos más pequeños (como la clase de Schwartz), y trataremos de demostrar (cuando sea posible) que no encontraremos autofunciones de \hat{H} fuera de esos conjuntos.

El primer modelo mecanocuántico que vamos a ver es el del **oscilador armónico**.

El oscilador armónico

1. Introducción

El oscilador armónico es uno de los modelos clásicos de la física, y ha sido estudiado y utilizado para resolver diversos problemas. En su vertiente más básica (unidimensional) el problema es el siguiente: tenemos una partícula puntual de masa m unida a un muelle que no se estira demasiado desde su posición de equilibrio. El muelle atrae a la partícula con una fuerza proporcional al desplazamiento de la misma, y esto se expresa en mecánica clásica con la ecuación

$$F = -kx,$$

donde la constante de proporcionalidad k depende del muelle y se denomina constante de fuerza.

La fuerza elástica es conservativa, por lo que se expresa como la derivada de la función energía potencial V . En este caso tenemos la fuerza elástica expresada como la derivada del potencial elástico, de manera que

$$F = -\frac{dV}{dx} = -kx.$$

Integrando la ecuación anterior obtenemos que la energía potencial elástica vale $V = \frac{1}{2}kx^2 + C$ con C una constante que podemos tomar como cero por convenio.

En general en los textos físicos en vez de la constante de fuerza se prefiere expresar la energía potencial en términos de la frecuencia de vibración, que es la constante:

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{k}{m} \right)^{1/2},$$

donde m es la masa de la partícula. De esta manera la energía potencial elástica queda

$$V = 2\pi^2\nu^2mx^2.$$

La energía cinética se expresa de la forma usual como

$$T = \frac{1}{2}m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2.$$

Por lo tanto el Hamiltoniano del sistema del oscilador armónico vale

$$H = T + V = \frac{1}{2}m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + 2\pi^2\nu^2mx^2,$$

y si tomamos ahora los operadores mecanocuánticos asociados a los anteriores, concluimos que el Hamiltoniano del oscilador armónico mecanocuántico es

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + 2\pi^2\nu^2mx^2.$$

En vistas del problema clásico, el tratamiento mecanocuántico del oscilador armónico podría parecer en un principio carente de sentido (nadie se imagina un átomo enganchado a un muelle). Sin embargo, este modelo se ha utilizado para calcular de manera aproximada los estados de vibración de los enlaces químicos de algunas moléculas y tiene un interés matemático particular por ser de los pocos modelos cuánticos para los que se puede calcular una solución explícita.

Nuestro objetivo es determinar los posibles niveles de energía de la partícula mecanocuántica del oscilador armónico y las respectivas densidades de probabilidad asociadas. Para ello, planteamos la ecuación de Schrödinger

$$(2.1.1) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} u''(x) + 2\pi^2\nu^2mx^2 u(x) = Eu(x)$$

y, puesto que en principio la partícula puede estar situada en cualquier punto, busquemos soluciones que vivan en $L^2(\mathbb{R})$.

2. Resolviendo la ecuación

Reduciendo a constantes más manejables, la ecuación anterior queda

$$(2.2.2) \quad -u''(x) + (ax)^2 u(x) = bu(x),$$

donde $a = \frac{2\pi\nu m}{\hbar}$ y $b = \frac{2mE}{\hbar^2}$.

Esta es una ecuación lineal con coeficientes analíticos, por lo que todas sus soluciones serán analíticas (ver [2, pág 152]).

Para resolver esta ecuación vamos a utilizar el método de las series de potencias. Puesto que sabemos que las soluciones tienen que ser analíticas, la idea es plantear una solución general en forma de serie de potencias, sustituirla en la ecuación y tratar de hallar una relación de recurrencia para los coeficientes de la serie que define a la solución.

El problema es que si intentásemos aplicar este método a la ecuación (2.2.2) obtendríamos una relación de recurrencia de tres términos un tanto complicada de manejar. Por lo tanto, antes de resolverla conviene reducirla a una ecuación más sencilla.

Lo primero es intentar quitarnos la constante multiplicativa del término cuadrático. Para ello, planteamos el cambio de escala $v(\xi) = u\left(\frac{\xi}{\alpha}\right) = u(x)$ para un cierto α que vamos a elegir de manera que la ecuación resultante parezca más sencilla. Aplicando el cambio, la ecuación anterior se nos queda

$$-v''(\xi) + \frac{a^2}{\alpha^4} \xi^2 v(\xi) = \frac{b}{\alpha^2} v(\xi).$$

Luego, tomando $\alpha = \sqrt{a}$ y escribiendo $\lambda = \frac{b}{a}$ la ecuación inicial queda

$$(2.2.3) \quad -v''(\xi) + \xi^2 v(\xi) = \lambda v(\xi).$$

Sin embargo, esta ecuación aún va a proporcionar una relación de recurrencia de tres términos al plantear una solución analítica, luego debemos encontrar una forma de reducirla más.

En física un acercamiento común a la forma de las soluciones de una ecuación diferencial consiste en el estudio asintótico de las mismas. Si en la ecuación (2.2.3) despejamos el término de la derivada segunda y hacemos ξ tender a infinito, el término de coeficiente λ es despreciable frente al término cuadrático y podemos aproximar la derivada segunda de una solución de (2.2.3) con la ecuación

$$v''(\xi) = \xi^2 v(\xi),$$

que tiene una solución inmediata: $v(\xi) = Ce^{\frac{-\xi^2}{2}}$ con C una constante.

Esto significa que las soluciones de (2.2.3) se comportan asintóticamente como una gaussiana, luego tiene sentido pensar que podemos descomponerlas con el cambio de variable $v(\xi) = e^{\frac{-\xi^2}{2}} f(\xi)$. Si pasamos todos los elementos de (2.2.3) al lado izquierdo y aplicamos el cambio anterior, la ecuación original se transforma en

$$e^{\frac{-\xi^2}{2}} \left[-f''(\xi) + 2\xi f'(\xi) + (1 - \lambda)f(\xi) \right] = 0,$$

que, puesto que la exponencial no se anula nunca, es equivalente a

$$(2.2.4) \quad -f''(\xi) + 2\xi f'(\xi) + (1 - \lambda)f(\xi) = 0.$$

Ahora sí, probamos a sustituir una solución en serie de potencias. Si planteamos la función analítica

$$f(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n$$

entonces sustituyendo y agrupando en la ecuación anterior:

$$\sum_{n=0}^{\infty} [-(n+2)(n+1)a_{n+2} + (2n+1-\lambda)a_n] \xi^n = 0,$$

y para que esta serie sea idénticamente nula todos sus términos tienen que ser nulos, luego tenemos la siguiente relación de recurrencia para los términos de $f(\xi)$:

$$(2.2.5) \quad a_{n+2} = \frac{2n+1-\lambda}{(n+2)(n+1)} a_n.$$

Para hallar la fórmula explícita de los a_n debemos iterar la relación anterior. Puesto que los pasos se dan de dos en dos, conviene distinguir cuando n sea par o impar.

Si n es par, restándole dos cada vez, llegamos a cero en $\frac{n}{2}$ pasos, luego iterando la relación anterior $\frac{n}{2}$ veces obtenemos la fórmula:

$$(2.2.6) \quad a_{n+2} = \frac{(2n+1-\lambda)(2n-3-\lambda)\dots(1-\lambda)}{(n+2)!} a_0.$$

En cambio, si n es impar iterando la fórmula $\frac{n-1}{2}$ veces llegamos a

$$(2.2.7) \quad a_{n+2} = \frac{(2n+1-\lambda)(2n-3-\lambda)\dots(3-\lambda)}{(n+2)!} a_1.$$

De esta manera, la solución general de (2.2.4) queda de la forma

$$f(\xi) = a_0 \sum_{l=0}^{\infty} b_l \xi^{2l} + a_1 \sum_{l=0}^{\infty} c_l \xi^{2l+1}$$

donde

$$(2.2.8) \quad b_l = \frac{(4l-3-\lambda)(4l-7-\lambda)\dots(1-\lambda)}{(2l)!} \quad (= a_{2l}/a_0) \quad \text{y} \quad b_0 = 1,$$

y

$$(2.2.9) \quad c_l = \frac{(4l-1-\lambda)(4l-5-\lambda)\dots(3-\lambda)}{(2l+1)!} \quad (= a_{2l+1}/a_1) \quad \text{y} \quad c_1 = 1,$$

y donde a_0 y a_1 son constantes a determinar con las condiciones de contorno.

La única condición de contorno que consideramos para (2.2.2) es que las soluciones u tienen que vivir en $L^2(\mathbb{R})$, luego las soluciones f de (2.2.4) tienen que pertenecer al conjunto $L^2(\mathbb{R}, e^{-\xi^2} d\xi)$. En cierto sentido, que haremos explícito más tarde, estas condiciones se pueden traducir en que $e^{-\xi^2/2} f(\xi) \rightarrow 0$ cuando $\xi \rightarrow \pm\infty$.

3. Descartando soluciones

Vamos a estudiar las dos series obtenidas antes, así que para facilitar su manejo denotamos

$$(2.3.10) \quad F(\xi) = \sum_{l=0}^{\infty} b_l \xi^{2l} \quad \text{y} \quad G(\xi) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l \xi^{2l+1},$$

de manera que la solución encontrada se escribe de la forma siguiente

$$(2.3.11) \quad f(\xi) = a_0 F(\xi) + a_1 G(\xi).$$

Ahora vamos a determinar para qué valores de a_0 , a_1 y λ la función anterior es cuadráticamente integrable con el peso $e^{-\xi^2}$.

El objetivo final de esta sección es demostrar la siguiente proposición:

PROPOSICIÓN 2.1. *Sea $f(\xi)$ una función analítica de la forma (2.3.11). Entonces $e^{-\xi^2/2} f(\xi)$ está en $L^2(\mathbb{R})$ sólo si es de una de las siguientes dos formas:*

- $f(\xi) = a_0 F(\xi)$ con $\lambda = 2M + 1$ con M natural par.
- $f(\xi) = a_1 G(\xi)$ con $\lambda = 2M + 1$ con M natural impar.

Antes de demostrar este resultado, observemos primero que para λ como en el primer punto la función $F(\xi)$ es un polinomio, y lo mismo ocurre con $G(\xi)$ si λ es como en el segundo punto.

En efecto, si $\lambda = 2M + 1$ y suponemos $M = 2L$ con $L \in \mathbb{N}_0$ entonces se tiene por la relación de recurrencia (2.2.5) que

$$a_{n+2} = 0 \quad \forall n \geq M \Rightarrow b_{L+l} = \frac{a_{M+2l}}{a_0} = 0 \quad \forall l \geq 1.$$

Luego $F(\xi) = \sum_{l=0}^L b_l \xi^{2l}$ es en este caso un polinomio de grado $2L$.

Del mismo modo se ve que si $M = 2L + 1$ entonces $G(\xi) = \sum_{l=0}^L c_l \xi^{2l+1}$ es un polinomio de grado $2L + 1$.

Es claro que si λ no es un entero impar entonces ambas $F(\xi)$ y $G(\xi)$ son series de potencias con todos los coeficientes b_l y c_l no nulos.

De hecho a partir de un cierto $n_0 \in \mathbb{N}$ todos los coeficientes tienen signo constante, es decir

$$\text{sign}(b_n) = \text{sign}(b_{n_0}) \quad \forall n > n_0,$$

y análogamente para los c_n .

En efecto, observando (2.2.6) es evidente que $F(\xi)$ tiene todos sus términos no negativos si $\lambda \leq 1$, pero si $\lambda > 1$ se tiene que

$$b_{l+1} = \frac{a_{2l+2}}{a_0} = \frac{(4l+1-\lambda)(4(l-1)+1-\lambda)\dots(1-\lambda)}{(2l+2)!}.$$

Luego, si $\lambda = 4L + 1$ para algún $L \in \mathbb{N}$ los coeficientes son nulos a partir de un punto (como ya hemos visto) y en otro caso existe un cierto $l_0 \in \mathbb{N}$ tal que

$$4l+1-\lambda > 0 \quad \forall l \geq l_0 \quad \text{y} \quad 4l+1-\lambda < 0 \quad \forall l < l_0,$$

luego

$$\text{sign}(b_{l+1}) = (-1)^{l_0} \quad \forall l \geq l_0.$$

Un estudio similar nos proporciona un resultado parecido para los coeficientes de $G(\xi)$, utilizando

$$c_{l+1} = \frac{a_{(2l+1)+2}}{a_0} = \frac{(4l+3-\lambda)(4(l-1)+3-\lambda)\dots(3-\lambda)}{(2l+3)!}$$

En este caso los coeficientes son no negativos para $\lambda \leq 3$, mientras que para $\lambda > 3$ o bien son nulos o bien tienen signo $(-1)^{l_0}$ a partir de un cierto $l_0 \in \mathbb{N}$.

En los libros de física, para descartar las soluciones de (2.2.4) se suele razonar que cuando λ no es un natural impar los coeficientes de la solución en serie de potencias encontrada "se parecen" a los del desarrollo de Taylor de la función e^{ξ^2} cuando ξ tiende a infinito. Esto es por ejemplo lo que se hace en [8, pág 67], y aunque la idea es razonable la demostración que se da está lejos de ser rigurosa.

Nosotros también vamos a comparar las funciones $F(\xi)$ y $G(\xi)$ con la función e^{ξ^2} , pero para ello vamos a utilizar el siguiente lema de comparación de series, al que nos referiremos como *criterio de Lawden* (ver [1]).

LEMA 2.2. Sean $\sum_{n=0}^{\infty} u_n x^n$ y $\sum_{n=0}^{\infty} v_n x^n$ series de potencias con radio de convergencia $\rho > 0$.

Supongamos que existe un cierto $n_0 \in \mathbb{N}$ a partir del cual los coeficientes de ambas series son positivos y cumplen

$$\frac{u_{n+1}}{u_n} \geq \frac{v_{n+1}}{v_n} \quad \forall n > n_0.$$

Entonces se verifica que:

$$(2.3.12) \quad \sum_{n=0}^{\infty} u_n x^n \geq k \sum_{n=0}^{\infty} v_n x^n + P(x) \quad \forall 0 < x < \rho,$$

donde $k > 0$ es una constante y $P(x)$ es un polinomio de grado menor o igual a n_0 .

DEMOSTRACIÓN. Sea $x < \rho$ positivo fijo. Observemos que se tiene que

$$\frac{u_n}{u_{n-1}} \geq \frac{v_n}{v_{n-1}} \Leftrightarrow \frac{u_n}{v_n} \geq \frac{u_{n-1}}{v_{n-1}} \geq \dots \geq \frac{u_{n_0}}{v_{n_0}}, \quad n > n_0,$$

y de aquí la desigualdad se tiene inmediatamente:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} u_n x^n &\geq \sum_{n=0}^{n_0} u_n x^n + \sum_{n=n_0+1}^{\infty} v_n \frac{u_{n_0}}{v_{n_0}} x^n = \sum_{n=0}^{n_0} (u_n - \frac{u_{n_0}}{v_{n_0}} v_n) x^n + \frac{u_{n_0}}{v_{n_0}} \sum_{n=0}^{\infty} v_n x^n \\ &= P(x) + k \sum_{n=0}^{\infty} v_n x^n. \end{aligned}$$

□

Visto esto, vamos a demostrar la Proposición 2.1:

DEMOSTRACIÓN PROPOSICIÓN 2.1. Supongamos primero que

$$\lambda \notin \{2M + 1 | M \in \mathbb{N}_0\}.$$

En este caso $F(\xi)$ y $G(\xi)$ son series infinitas. Vamos a ver que podemos aplicar el lema anterior para comparar ambas series con el desarrollo en serie de $e^{(1-\epsilon)\xi^2}$ (con $\epsilon < 1$, claro).

Vamos a utilizar una notación más consistente para aplicar el lema de Lawden. Escribimos $y = \xi^2$ y:

$$F(\xi) = \sum_{l \geq 0} b_l y^l = g(y)$$

donde $g(y)$ es una serie con todos los coeficientes no nulos (no sólo los pares) y la variable y es positiva.

Lo mismo se aplica a la otra serie:

$$G(\xi) = \xi \sum_{l \geq 0} c_l y^l = \xi h(y)$$

Supongamos que los coeficientes de ambas series son positivos a partir de un cierto l_0 (si fuesen negativos aplicaríamos este razonamiento a los coeficientes de $-F(\xi)$ o de $-G(\xi)$).

Centrémonos en $F(\xi)$ por un momento. Observemos que, por (2.2.5) se tiene que

$$\frac{b_{l+1}}{b_l} = \frac{a_{2l+2}}{a_{2l}} = \frac{4l + 1 - \lambda}{(2l + 2)(2l + 1)}$$

Queremos comparar la serie $g(y)$ con la serie de Taylor de $e^{(1-\epsilon)y}$, cuyo cociente de coeficientes vale

$$\frac{\frac{(1-\epsilon)^{l+1}}{(l+1)!}}{\frac{(1-\epsilon)^l}{l!}} = \frac{1-\epsilon}{l+1}.$$

Hemos visto que existe un cierto l_0 positivo a partir del cual los coeficientes de $F(\xi)$ son todos positivos y además cumple que $4l_0 + 1 > \lambda$, luego se tiene que

$$\frac{4l + 1 - \lambda}{(2l + 2)(2l + 1)} = \frac{4(l - l_0) + 4l_0 + 1 - \lambda}{(2l + 2)(2l + 1)} > \frac{2(l - l_0)}{(l + 1)(2l + 1)} \quad \forall l > l_0.$$

Por otro lado, tenemos que fijo $\epsilon > 0$ existirá $l_1 \geq l_0$ tal que

$$\frac{2(l - l_0)}{2l + 1} > 1 - \epsilon \quad \forall l > l_1,$$

luego juntando esto con lo anterior concluimos que

$$\frac{b_{l+1}}{b_l} > \frac{\frac{(1-\epsilon)^{l+1}}{(l+1)!}}{\frac{(1-\epsilon)^l}{l!}} \quad \forall l > l_1.$$

Así, podemos aplicar el lema de Lawden a $g(y)$ y al desarrollo en serie $e^{(1-\epsilon)y}$ para obtener para cierto $K > 0$ la desigualdad

$$g(y) \geq P_{l_1, \epsilon}(y) + Ke^{(1-\epsilon)y}, \quad y > 0.$$

Observemos ahora que $|P_{l_1, \epsilon}(y)| \ll \frac{K}{2}e^{(1-\epsilon)y}$, es decir existe $y_0 > 0$ tal que:

$$\frac{K}{2}e^{(1-\epsilon)y} > |P_{l_1, \epsilon}(y)|, \quad \forall y > y_0.$$

Por lo tanto aplicando esto y la desigualdad de Lawden anterior obtenemos que existe un cierto $\xi_0 > 0$ tal que se tiene la desigualdad

$$(2.3.13) \quad F(\xi) > \frac{K}{2}e^{(1-\epsilon)\xi^2}, \quad \forall \xi > \xi_0$$

Por otro lado razonando igual que con $g(y)$ podemos llegar a que para cierto $C > 0$ se tiene la desigualdad

$$h(y) \geq Q_{l_1, \epsilon}(y) + Ce^{(1-\epsilon)y}$$

Multiplicando por $\xi > 0$ y utilizando otra vez el crecimiento dominante de la exponencial frente al del polinomio, obtenemos como antes un cierto $\xi_1 > 0$ que nos proporciona la siguiente desigualdad

$$(2.3.14) \quad G(\xi) > \frac{C}{2}\xi e^{(1-\epsilon)\xi^2}, \quad \forall \xi > \xi_1.$$

A partir de estas dos desigualdades se sigue directamente que, si tomamos $\epsilon \leq \frac{1}{2}$, cuando los coeficientes a_0 y a_1 tienen el mismo signo o alguno de los dos es nulo se tiene que

$$\begin{aligned} \|e^{-\frac{\xi^2}{2}} f(\xi)\|_2^2 &> \int_0^{+\infty} e^{-\xi^2} |a_0 F(\xi) + a_1 G(\xi)|^2 d\xi \\ &> \int_m^{+\infty} e^{(1-2\epsilon)\xi^2} |a_0 \frac{K}{2} + a_1 \frac{C}{2} \xi|^2 d\xi = +\infty, \end{aligned}$$

donde $m = \max\{\xi_0, \xi_1\}$.

Supongamos ahora que a_0 y a_1 son no nulos con signos distintos. Podemos suponer que $a_0 > 0$ y $a_1 < 0$ (es indiferente). Es inmediato que como las funciones involucradas en la desigualdad (2.3.13) son ambas pares, la desigualdad se conserva para $\xi < -\xi_0$.

Por otro lado, en la desigualdad (2.3.14) las funciones involucradas son ambas impares, luego tomando $\xi < -\xi_1$ la desigualdad se invierte. Multiplicándola entonces por a_1 negativo la dejamos en el sentido original y podemos concluir lo siguiente:

$$\begin{aligned} \|e^{-\frac{\xi^2}{2}} f(\xi)\|_2^2 &> \int_{-\infty}^0 e^{-\xi^2} |a_0 F(\xi) + a_1 G(\xi)|^2 d\xi \\ &> \int_{-\infty}^{-m} e^{(1-2\epsilon)\xi^2} |a_0 \frac{K}{2} + a_1 \frac{C}{2} \xi|^2 d\xi = +\infty. \end{aligned}$$

Ahora, si $\lambda \in \{2M+1 | M \in \mathbb{N}_0\}$ entonces, como ya hemos visto, se tiene que una de las funciones $F(\xi)$ ó $G(\xi)$ es un polinomio.

Sin embargo, atendiendo a las fórmulas de los coeficientes (2.2.8) y (2.2.9) es inmediato que cuando una de estas funciones es un polinomio la otra es una serie infinita y viceversa, luego podemos aplicar alguna de las desigualdades de Lawden anteriores para concluir la divergencia de las integrales, cualesquiera que sean los valores de a_0 y a_1 . Esto termina con todos los casos y prueba la proposición. \square

Hemos demostrado así que para que (2.2.3) tenga solución $v(\xi)$ en $L^2(\mathbb{R})$ tiene que ser $\lambda = 2M + 1$ con $M \in \mathbb{N}_0$ y sólo puede ser de la forma $a_0 e^{-\frac{\xi^2}{2}} F(\xi)$ con M par o $a_1 e^{-\frac{\xi^2}{2}} G(\xi)$ con M impar.

En este caso, el polinomio $F(\xi)$ ó $G(\xi)$ obtenido es bien conocido.

DEFINICIÓN 2.3. *Se define al **polinomio M -ésimo de Hermite** como*

- $H_M(\xi) = F(\xi)$ si M es par
- $H_M(\xi) = G(\xi)$ si M es impar,

donde $F(\xi)$ y $G(\xi)$ son las funciones que hemos definido al inicio de la sección en (2.3.10), usando los coeficientes b_l y c_l en (2.2.8) y (2.2.9). Estas son soluciones polinómicas de la ecuación

$$(2.3.15) \quad u''(\xi) - 2\xi u'(\xi) + 2Mu(\xi) = 0, \quad M \in \mathbb{N}_0.$$

En algunos libros se define a la familia de polinomios de Hermite como una familia de polinomios ortogonales en $L^2(\mathbb{R}, e^{-x^2} dx)$ con una cierta normalización (por ejemplo, véase [14, pág 105]). Nosotros utilizamos la definición de los polinomios como soluciones de la *ecuación de Hermite* (2.3.15), del mismo modo que se hace, por ejemplo, en el libro de Simmons, [12, pág 250], si bien utilizando otra constante de normalización (aquí tomamos los coeficientes independientes $b_0 = c_1 = 1$ en (2.2.8) y (2.2.9) para definir dichos polinomios).

Con lo que llevamos hecho hasta ahora, podemos dar por demostrado el siguiente teorema:

TEOREMA 2.4. *La función $v(\xi)$ es solución no nula de*

$$-v''(\xi) + \xi^2 v(\xi) = \lambda v(\xi) \quad y \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |v(\xi)|^2 d\xi < +\infty,$$

si, y sólo si $\lambda = 2M + 1$ para algún $M \in \mathbb{N}_0$ y

$$v(\xi) = C e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_M(\xi).$$

Volvamos un momento a la ecuación de Schrödinger original. Esta era

$$-u''(x) + (ax)^2 u(x) = bu(x),$$

y nosotros hicimos el cambio $\xi = \sqrt{a}x$ para resolverla, obteniendo la ecuación (2.2.3).

Recordemos que escribimos $\lambda = \frac{b}{a}$, luego se sigue que $E = \pi\nu\hbar\lambda$ utilizando los valores reales de las constantes $a = \frac{2\pi\nu m}{\hbar}$ y $b = \frac{2mE}{\hbar^2}$. Se sigue por lo tanto el siguiente corolario:

COROLARIO 2.5. *La ecuación de Schrödinger*

$$(2.3.16) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} u''(x) + 2\pi^2 \nu^2 m x^2 u(x) = E u(x)$$

tiene solución sólo para los estados de energía de la forma $E = \pi\nu\hbar(2M + 1)$ con $M \in \mathbb{N}_0$, y en ese caso las soluciones son de la forma:

$$u_M(x) = C_M e^{-\frac{\pi\nu m x^2}{\hbar}} H_M \left(\sqrt{\frac{2\pi\nu m}{\hbar}} x \right).$$

para alguna constante $C_M \in \mathbb{R}$.

Para que las soluciones de (2.3.16) tengan contenido físico (es decir, sean funciones de onda), necesitamos tomar la constante C_M en cada caso de manera que se tenga

$$\int_{\mathbb{R}} |u_M(x)|^2 dx = C_M^2 \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{ax^2}{2}} H_M(\sqrt{a}x) dx = 1,$$

es decir queremos elegir C_M de manera que normalice a las funciones $u_M(x)$ en $L^2(\mathbb{R})$.

El objetivo de la siguiente sección va a ser encontrar estas constantes de normalización.

4. Normalización de las soluciones

A partir de aquí conviene cambiar el enfoque. Hasta ahora lo que hemos hecho ha sido resolver una cierta ecuación diferencial y descartar soluciones hasta quedarnos sólo con las que nos interesan.

Notemos que como nuestras soluciones viven en $L^2(\mathbb{R})$, podemos verlas como vectores de un espacio de Hilbert. Con este enfoque las soluciones de (2.2.3) con las que nos hemos quedado las podemos ver como autofunciones del operador diferencial $-\partial_x^2 + x^2$ con valores propios los naturales impares.

Partiendo de este hecho y utilizando técnicas básicas de análisis funcional podremos calcular las normas de las funciones $e^{-\frac{x^2}{2}} H_M(x)$ explícitamente (a partir de aquí abusamos de notación escribiendo $\xi = x$ cuando tratamos con soluciones de (2.2.3)).

Introducimos nueva notación para esta sección. Escribimos

$$\phi_n(x) := e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x), \quad (\text{ponemos } n = M \text{ por comodidad en la escritura})$$

y también escribimos los polinomios de Hermite de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \blacksquare H_n &:= 1 + \sum_{l=1}^{\frac{n}{2}} a_{2l}^{(n)} x^{2l} \text{ con } a_{2l}^{(n)} = (-2)^l \frac{n!!}{(n-2l)!!(2l)!}, \quad l = 1, \dots, \frac{n}{2} \text{ si } n \text{ es par,} \\ \blacksquare H_n &:= x + \sum_{l=1}^{\frac{n-1}{2}} a_{2l+1}^{(n)} x^{2l+1} \text{ con } a_{2l+1}^{(n)} = (-2)^l \frac{(n-1)!!}{(n-2l-1)!!(2l+1)!}, \quad l = 1, \dots, \frac{n-1}{2} \text{ si } n \text{ es impar.} \end{aligned}$$

donde recordamos la notación del doble factorial:

$$n!! = n(n-2)(n-4) \dots 4 \cdot 2, \quad \text{para } n \in \mathbb{N} \text{ par}$$

y

$$n!! = n(n-2)(n-4) \dots 3 \cdot 1, \quad \text{para } n \in \mathbb{N} \text{ impar.}$$

Es fácil comprobar que la expresión de los coeficientes $a^{(n)}$ es equivalente a la de los coeficientes de los polinomios de Hermite hallados en la sección anterior.

En efecto, si n es par, fijándonos en (2.2.8):

$$\begin{aligned} b_l &= \frac{(4l-3-\lambda)(4l-7-\lambda)\dots(1-\lambda)}{(2l)!} = \frac{(4l-4-2n)(4l-8-2n)\dots(-2n)}{(2l)!} \\ &= (-2)^l \frac{n(n-2)\dots(n-2(l-1))}{(2l)!} = (-2)^l \frac{n!!}{(n-2l)!!(2l)!}, \quad l \leq \frac{n}{2}, \end{aligned}$$

y se pueden hacer unas cuentas similares con (2.2.9) para obtener la correspondiente expresión de los coeficientes de los polinomios con n impar.

Como ya adelantábamos, busquemos las constantes C_n tales que sea

$$\|C_n \phi_n(x)\|_2^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} |C_n \phi_n(x)|^2 dx = 1.$$

Para ello es necesario calcular las normas en $L^2(\mathbb{R})$ de nuestras funciones $\phi_n(x)$. Nuestro objetivo es demostrar el siguiente teorema:

TEOREMA 2.6. *Sea $\phi_n(x)$ una autofunción de $-\partial_x^2 + x^2$ de valor propio $2n+1$. Entonces se tiene que*

$$\|\phi_n(x)\|_2^2 = \begin{cases} \frac{(n-1)!!}{n!!} \frac{\sqrt{\pi}}{2} & \text{si } n \text{ es impar} \\ \frac{n!!}{(n-1)!!} \sqrt{\pi} & \text{si } n \text{ es par} \end{cases}$$

Hemos mencionado que las funciones $\phi_n(x)$ viven en $L^2(\mathbb{R})$ (lo cual es cierto y puede comprobarse fácilmente), pero para demostrar el teorema anterior vamos a tener que hilar más fino, pues debemos determinar un dominio adecuado para el operador $-\partial_x^2 + x^2$.

A partir de ahora nuestro entorno de trabajo va a ser el siguiente conjunto:

DEFINICIÓN 2.7. *Se define la clase de Schwartz de funciones en una variable como el conjunto*

$$(2.4.17) \quad \mathcal{S} = \left\{ f \in C^\infty(\mathbb{R}) : \sup_{y \in \mathbb{R}} \left((1 + |y|)^M \left| f^{(N)}(y) \right| \right) < +\infty, \quad \forall N, M \geq 1 \right\}.$$

El motivo de introducir este conjunto es doble: por un lado nuestras funciones ϕ_n viven todas en \mathcal{S} de forma natural, y por otro se tiene que $-\partial_x^2 + x^2$ está definido en todo \mathcal{S} y toma valores en $L^2(\mathbb{R})$. De hecho, va a cumplirse que

$$f \in \mathcal{S} \implies (-\partial_x^2 + x^2)[f] \in \mathcal{S}.$$

Vamos a comprobar estas afirmaciones.

PROPOSICIÓN 2.8. *Si $f(x) \in \mathcal{S}$, entonces $P(x)f(x) \in \mathcal{S}$ para cualquier polinomio $P(x)$.*

DEMOSTRACIÓN. Veamos primero que $x^n f(x) \in \mathcal{S}$ para todos los $n \in \mathbb{N}$.

Llamemos:

$$K_{N,M} = \sup_{x \in \mathbb{R}} \left((1 + |x|)^M \left| f^{(N)}(x) \right| \right).$$

Observemos que, aplicando la regla de Leibniz para la derivada:

$$(x^n f(x))^{(N)} = \sum_{k=0}^N \binom{N}{k} (x^n)^{(k)} f^{(N-k)}(x) = \sum_{k=0}^m a_k x^{n-k} f^{(N-k)}(x),$$

donde $a_k = \binom{N}{k} \frac{n!}{k!}$ y $m = \min\{n, N\}$. Entonces se tiene que

$$(1 + |x|)^M \left| (x^n f(x))^{(N)} \right| \leq \sum_{k=0}^m a_k (1 + |x|)^M |x|^{n-k} \left| f^{(N-k)}(x) \right| \leq \sum_{k=0}^N a_k K_{N-k, M+n-k}$$

luego se sigue que

$$\sup_{x \in \mathbb{R}} \left\{ (1 + |x|)^M \left| (x^n f(x))^{(N)} \right| \right\} = A_{n,N,M} < +\infty.$$

Ahora, dado $P(x) = \sum_{i=0}^n c_i x^i$ se sigue inmediatamente que $P(x)f(x) \in \mathcal{S}$, pues para cualquier $x \in \mathbb{R}$ se tiene que

$$\begin{aligned} (1 + |x|)^M \left| (P(x)f(x))^{(N)} \right| &\leq \sum_{i=0}^n c_i (1 + |x|)^M \left| (x^i f(x))^{(N)} \right| \\ &\leq \sum_{i=0}^n c_i A_{i,N,M} < +\infty \end{aligned}$$

lo que prueba el resultado. \square

PROPOSICIÓN 2.9. $e^{-\frac{x^2}{2}} \in \mathcal{S}$

DEMOSTRACIÓN. Es inmediato que $\left(e^{-\frac{x^2}{2}} \right)^{(N)} = P(x)e^{-\frac{x^2}{2}}$ donde $P(x)$ es un polinomio de grado N . Entonces, dado el decaimiento y la simetría de $e^{-\frac{x^2}{2}}$, se sigue que para cada $M \geq 1$ existe un cierto $\rho = \rho(M) > 0$ tal que

$$(1 + |x|)^M \left| P(x)e^{-\frac{x^2}{2}} \right| \leq 1, \quad \forall |x| > \rho.$$

Entonces, se concluye que

$$\sup_{x \in \mathbb{R}} \left\{ (1 + |x|)^M \left| \left(e^{-\frac{x^2}{2}} \right)^{(N)} \right| \right\} = \max \left\{ \max_{x \in [-\rho, \rho]} \left\{ (1 + |x|)^M |P(x)| e^{-\frac{x^2}{2}} \right\}, 1 \right\} < +\infty$$

□

PROPOSICIÓN 2.10. Si $f \in \mathcal{S}$ entonces $f \in L^2(\mathbb{R})$.

DEMOSTRACIÓN. Si $f \in \mathcal{S}$, en particular $\exists K > 0$ tal que

$$|f(x)| \leq \frac{K}{(1 + |x|)^2} \quad \forall x \in \mathbb{R}.$$

Entonces:

$$\int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 dx \leq \int_{\mathbb{R}} \frac{K^2}{(1 + |x|)^4} dx < +\infty$$

□

A partir de estos resultados se sigue directamente que $\{\phi_n(x) : n \in \mathbb{N}_0\} \subset \mathcal{S}$ y que el operador diferencial siguiente está bien definido:

DEFINICIÓN 2.11. Definimos el **operador Hamiltoniano del oscilador armónico** como

$$\hat{H} : \mathcal{S} \rightarrow L^2(\mathbb{R})$$

de manera que

$$\hat{H}[f] = -f''(x) + x^2 f(x), \quad \forall f \in \mathcal{S}.$$

Una propiedad importante de las funciones de \mathcal{S} que vamos a utilizar en alguna ocasión y que se desprende directamente de la definición del conjunto es que los límites en el infinito de sus funciones y sus derivadas valen 0, es decir

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} f^{(N)}(x) = 0, \quad \forall f \in \mathcal{S}, \forall N \in \mathbb{N}_0.$$

Para demostrar el Teorema 2.6 vamos a utilizar una relación de recurrencia que nos aporta una especie de factorización del operador \hat{H} . Introducimos los siguientes operadores:

DEFINICIÓN 2.12. Definimos los operadores diferenciales en \mathcal{S}

$$D = \partial_x + x \quad \text{y} \quad D^* = -\partial_x + x.$$

Nos referiremos a ellos como **Operador destrucción** y **Operador creación** respectivamente.

Estos operadores son interesantes porque se relacionan con el operador \hat{H} de la siguiente forma:

LEMA 2.13. Para cada $u \in \mathcal{S}$ se cumple que

$$DD^*[u] = (\hat{H} + I)[u] \quad \text{y} \quad D^*D[u] = (\hat{H} - I)[u].$$

donde I denota al operador identidad.

DEMOSTRACIÓN. Basta evaluar la función u y utilizar la definición de \hat{H} :

$$DD^*[u] = (\partial_x + x)(-\partial_x + x)[u] = -u''(x) + x^2 u(x) + u(x) = (\hat{H} + I)[u]$$

$$D^*D[u] = (-\partial_x + x)(\partial_x + x)[u] = -u''(x) + x^2 u(x) - u(x) = (\hat{H} - I)[u]$$

□

Observemos que, por el lema anterior, se cumple que

$$\frac{DD^* + D^*D}{2} = \hat{H},$$

por lo que podemos ver de alguna forma a D y D^* como factores de \hat{H} (de hecho lo serían si conmutaran, es decir si fuese $DD^* = D^*D$).

Vamos a ver algunas propiedades fundamentales de D y D^* . Comenzamos con dos lemas que vienen a explicar los nombres de "destrucción" y "creación" para estos operadores.

LEMA 2.14. $D\phi_n = \alpha_n\phi_{n-1}$, donde α_n vale 1 si n es impar y $-2n$ si n es par.

DEMOSTRACIÓN.

$$(\partial_x + x)\phi_n(x) = (\partial_x + x)H_n(x)e^{-\frac{x^2}{2}} = H'_n(x)e^{-\frac{x^2}{2}}$$

Distinguimos dos casos

CASO 1: n impar.

$$H'_n(x) = 1 + \sum_{l=1}^{\frac{n-1}{2}} a_{2l+1}^{(n)}(2l+1)x^{2l} = H_{n-1}(x)$$

pues se tiene que

$$(2l+1)a_{2l+1}^{(n)} = (-2)^l \frac{(n-1)!!}{(n-1-2l)!!(2l)!} = a_{2l}^{(n-1)}$$

y por lo tanto el resultado se sigue inmediatamente.

CASO 2: n par.

$$H'_n(x) = 2a_2^{(n)}x + \sum_{l=2}^{\frac{n}{2}} a_{2l}^{(n)}2lx^{2l-1} = 2a_2^{(n)}x + \sum_{l=1}^{\frac{n}{2}-1} a_{2l+2}^{(n)}2(l+1)x^{2l+1} = -2nH_{n-1}(x)$$

pues observemos que en este caso $2a_2^{(n)} = -2n$ y además

$$2(l+1)a_{2l+2}^{(n)} = -2n(-2)^l \frac{(n-2)!!}{(n-1-2l-1)!!(2l+1)!} = -2na_{2l}^{(n-1)}.$$

Esto termina por demostrar el lema. □

Tenemos un lema análogo para el operador de creación D^* , cuya demostración se sigue como corolario del lema anterior:

LEMA 2.15. $D^*\phi_n = \beta_n\phi_{n+1}$, donde β_n vale -1 si n es impar y $2(n+1)$ si n es par.

DEMOSTRACIÓN. Basta observar que ϕ_n también es autofunción de D^*D , pues lo es de \hat{H} y se tiene que

$$D^*D\phi_n = (\hat{H} - I)\phi_n = 2n\phi_n$$

Entonces, por el lema anterior se tiene que

$$D^*\phi_n = D^*\left(\frac{D\phi_{n+1}}{\alpha_{n+1}}\right) = \frac{1}{\alpha_{n+1}}D^*D\phi_{n+1} = \frac{2(n+1)}{\alpha_{n+1}}\phi_{n+1}$$

y así concluimos que $D^*\phi_n = \beta_n\phi_{n+1}$ con $\beta_n = -\frac{2(n+1)}{2(n+1)} = -1$ cuando n es impar y $\beta_n = 2(n+1)$ cuando n es par. □

Antes de meternos con la demostración del Teorema 2.6, nos queda ver una última propiedad de los operadores D y D^* que puede intuirse por la notación de los mismos: uno es el adjunto del otro.

LEMA 2.16. $\langle Du, v \rangle = \langle u, D^*v \rangle$, $\forall u, v \in \mathcal{S}$.

DEMOSTRACIÓN. Se sigue de integrar por partes y aprovechar el decaimiento de las funciones en \mathcal{S} :

$$\begin{aligned}
\langle Du, v \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} Du(x)\overline{v(x)}dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (u'(x) + xu(x))\overline{v(x)}dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} u'(x)\overline{v(x)}dx + \int_{-\infty}^{+\infty} xu(x)\overline{v(x)}dx \\
&= \left[u(x)\overline{v(x)} \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} u(x)v'(x)dx + \int_{-\infty}^{+\infty} xu(x)\overline{v(x)}dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} u(x)\overline{(-v'(x) + xv(x))}dx = \langle u, D^*v \rangle
\end{aligned}$$

En la penúltima igualdad hemos utilizado que los límites en el infinito de las funciones de \mathcal{S} valen cero. \square

Ahora sí, estamos en condiciones de demostrar el teorema.

DEMOSTRACIÓN TEOREMA 2.6.

$$\begin{aligned}
\|\phi_n\|^2 &= \langle \phi_n, \phi_n \rangle = \frac{1}{\beta_{n-1}} \langle \phi_n, D^*\phi_{n-1} \rangle = \frac{1}{\beta_{n-1}} \langle D\phi_n, \phi_{n-1} \rangle \\
&= \frac{\alpha_n}{\beta_{n-1}} \langle \phi_{n-1}, \phi_{n-1} \rangle = \frac{\alpha_n}{\beta_{n-1}} \|\phi_{n-1}\|^2
\end{aligned}$$

donde

$$\frac{\alpha_n}{\beta_{n-1}} = \begin{cases} \frac{1}{2n}, & \text{si } n \text{ impar} \\ 2n, & \text{si } n \text{ par.} \end{cases}$$

Si iteramos la expresión anterior tenemos que distinguir dos casos:

CASO 1: n impar.

$$\begin{aligned}
\|\phi_n\|^2 &= \frac{1}{2n} \|\phi_{n-1}\|^2 = \frac{n-1}{n} \|\phi_{n-2}\|^2 = \dots = \frac{(n-1)!!}{n!!} \|\phi_1\|^2 \\
&= \frac{(n-1)!!}{n!!} \frac{1}{2 \cdot 1} \|\phi_0\|^2 = \frac{(n-1)!!}{n!!} \frac{\sqrt{\pi}}{2}
\end{aligned}$$

CASO 2: n par.

$$\begin{aligned}
\|\phi_n\|^2 &= 2n \|\phi_{n-1}\|^2 = \frac{n}{n-1} \|\phi_{n-2}\|^2 = \dots = \frac{n!!}{(n-1)!!} \|\phi_0\|^2 \\
&= \frac{n!!}{(n-1)!!} \sqrt{\pi}
\end{aligned}$$

En ambos casos hemos utilizado que

$$\|\phi_0\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi_0(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi},$$

donde la última es la conocida integral gaussiana, cuyo cálculo incluimos en el Apéndice 1. \square

Esto termina de proporcionarnos la norma de las autofunciones del operador \hat{H} . Con ellas, podemos dar explícitamente las funciones de onda del oscilador armónico para los distintos estados de energía.

Recordemos que estas las hemos escrito de la forma $u_n(x) = C_n e^{-\frac{ax^2}{2}} H_n(\sqrt{ax})$ con $a = \frac{2\pi\nu m}{\hbar}$. El siguiente corolario es inmediato, y termina por proporcionarnos todas las funciones de onda del sistema del oscilador armónico.

COROLARIO 2.17. *La función de onda de una partícula con estado de energía*

$$E = \pi\nu\hbar(2n + 1), \quad n \in \mathbb{N}_0,$$

en el modelo del oscilador armónico mecanocuántico tiene la expresión:

$$(2.4.18) \quad u_n(x) = \begin{cases} \frac{\sqrt{n!}}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{\pi\nu m x^2}{\hbar}} \sum_{l=0}^{\frac{n}{2}} \frac{(-2)^l}{(n-2l)!!(2l)!} \left(\sqrt{\frac{2\pi\nu m}{\hbar}} x \right)^{2l}, & \text{si } n \text{ par,} \\ \frac{\sqrt{2(n!)}}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{\pi\nu m x^2}{\hbar}} \sum_{l=0}^{\frac{n-1}{2}} \frac{(-2)^l}{(n-2l-1)!!(2l+1)!} \left(\sqrt{\frac{2\pi\nu m}{\hbar}} x \right)^{2l+1}, & \text{si } n \text{ impar,} \end{cases}$$

y los anteriores son todos los estados de energía admisibles del sistema.

5. Ecuación General

Hemos resuelto la ecuación del oscilador armónico independiente del tiempo, pero con los elementos introducidos en la anterior sección podemos dar fácilmente la solución completa de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo con alguna condición inicial.

Al margen del interés físico de este problema, dada $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$ nuestro objetivo en esta sección es resolver la siguiente E.D.P. con condiciones límite:

$$(2.5.19) \quad \left. \begin{aligned} -\frac{\hbar}{i}\Psi_t &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \|x\|^2\Psi \\ \Psi(0, x) &\equiv f(x) \\ \Psi(t, \cdot) &\in L^2(\mathbb{R}^d), \quad t \in \mathbb{R} \end{aligned} \right\}$$

En el primer capítulo, planteamos una solución de esta ecuación por separación de variables para el caso general:

$$\Psi(t, x) = \tau(t)\psi(x), \quad \text{con } \tau \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}) \quad \text{y} \quad \psi \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^d).$$

En el caso $d = 1$ la ecuación (2.5.19) se reduce a la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para el oscilador armónico, y por todo lo visto anteriormente sabemos que para cada $n \in \mathbb{N}_0$ la función

$$\Psi_n(t, x) = e^{-i(2n+1)\pi\nu t} u_n(x)$$

con u_n como en (2.4.18) del Corolario 2.17. es solución de la ecuación sin tener en cuenta la condición inicial. Sin embargo, ya mencionábamos entonces que no podemos asegurar que todas las soluciones de la ecuación vayan a ser de esta forma (es decir, vayan a tener las variables separadas).

Vamos a ver que, si añadimos la condición inicial en (2.5.19), y si nos restringimos a buscar soluciones en un conjunto suficientemente pequeño, entonces la solución (para $d = 1$) se va a escribir en términos de las funciones Ψ_n que hemos definido antes.

En particular, vamos a pedir que Ψ pertenezca a un cierto conjunto de *funciones admisibles*. Fijándonos en la definición de la clase de Schwartz, consideramos el siguiente conjunto:

DEFINICIÓN 2.18. *Definimos la **clase de soluciones admisibles** \mathcal{A}_d de (2.5.19) del siguiente modo: $\Psi \in \mathcal{A}_d$ si $\Psi(t, x) \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^d)$ y además se tiene que para cada*

$$M \in \mathbb{N}, \quad [a, b] \subset \mathbb{R}, \quad \alpha \in \mathbb{N}_0^d \quad \text{y} \quad \gamma \in \mathbb{N}_0,$$

se cumple que

$$\sup_{y \in \mathbb{R}^d, t \in [a, b]} \left((1 + \|y\|)^M \left| \frac{\partial^{\gamma+|\alpha|} \Psi}{\partial t^\gamma \partial x^\alpha}(t, x) \right| \right) < +\infty.$$

Observemos que, si $d = 1$ y fijamos t , se tiene claramente que

$$(2.5.20) \quad \Psi \in \mathcal{A}_1 \implies \partial_t^\gamma \Psi(t, \cdot) \in \mathcal{S}, \quad \forall \gamma \in \mathbb{N}_0,$$

por lo que las funciones del tipo $e^{ita}P(x)e^{-\frac{x^2}{2}}$ con a parámetro real y P polinomio arbitrario están en la clase \mathcal{A}_1 . Por otro lado, utilizando la propiedad (2.5.20) también se sigue que

$$\Psi(t, \cdot) \in L^2(\mathbb{R}), \quad \forall t \in \mathbb{R},$$

por lo que en principio \mathcal{A}_1 parece un conjunto adecuado en el que movernos.

El motivo de restringirnos a él para buscar soluciones de (2.5.19) es que podemos demostrar el siguiente resultado:

TEOREMA 2.19. *Sea $\Psi(t, x) \in \mathcal{A}_d$ una solución de la E.D.P. con condición inicial:*

$$i\Psi_t(t, x) = -a\Delta\Psi(t, x) + V(x)\Psi(t, x) \quad y \quad \Psi(0, x) \equiv 0,$$

donde a es un parámetro complejo y V toma valores reales.

Entonces $\Psi \equiv 0$.

DEMOSTRACIÓN. Definimos la función

$$E(t) = \int_{\mathbb{R}^d} |\Psi(t, x)|^2 dx, \quad t \geq 0.$$

Si $\Psi(t, x) = \Psi_1(t, x) + i\Psi_2(t, x)$ (donde las funciones Ψ_1 y Ψ_2 toman valores reales), definamos su función conjugada como

$$\bar{\Psi}(t, x) := \Psi_1(t, x) - i\Psi_2(t, x).$$

Observemos que como $\Psi \in \mathcal{A}_d$ entonces $\bar{\Psi} \in \mathcal{A}_d$ por tener ambas funciones y sus derivadas el mismo módulo. Las hipótesis de la clase \mathcal{A}_d garantizan que podemos derivar bajo el signo integral en las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} E'(t) &= \partial_t \left[\int_{\mathbb{R}^d} \Psi \bar{\Psi} \right] = \int_{\mathbb{R}^d} (\Psi_t \bar{\Psi} + \Psi \bar{\Psi}_t) = 2\operatorname{Re} \left[\int_{\mathbb{R}^d} \bar{\Psi} \Psi_t \right] \\ &= 2\operatorname{Re} \left[\int_{\mathbb{R}^d} \bar{\Psi} \frac{1}{i} (-a\Delta\Psi + V\Psi) \right] \end{aligned}$$

donde $\operatorname{Re}[\]$ denota la parte real y en la última igualdad hemos utilizado que Ψ cumple la ecuación del enunciado.

Observemos ahora que, aplicando la fórmula de Green a Ψ como función de sus coordenadas espaciales (fijo t) como se ve en el Apéndice 2 (los pasos técnicos están detallados en esa sección)

$$\int_{\mathbb{R}^d} \bar{\Psi} \Delta\Psi = - \int_{\mathbb{R}^d} \nabla\Psi \cdot \nabla\bar{\Psi}.$$

Ahora, es claro que $\nabla\bar{\Psi} = \overline{\nabla\Psi}$, luego se tiene que $\nabla\Psi \nabla\bar{\Psi} = \|\nabla\Psi\|^2$.

Por lo tanto:

$$\begin{aligned} E'(t) &= 2\operatorname{Re} \left[-i \left(-a \int_{\mathbb{R}^d} \bar{\Psi} \Delta\Psi + \int_{\mathbb{R}^d} V|\Psi|^2 \right) \right] \\ &= 2\operatorname{Re} \left[-i \left(\int_{\mathbb{R}^d} a \|\nabla\Psi\|^2 + V|\Psi|^2 \right) \right] = 0 \end{aligned}$$

donde lo anterior vale cero porque los sumandos de dentro de la integral sólo toman valores reales (no tienen parte imaginaria).

Concluimos que $E(t) \equiv A$ con $A \in \mathbb{C}$ constante, pero como

$$E(0) = \int_{\mathbb{R}^d} |\Psi(0, x)|^2 dx = 0,$$

tiene que ser $E(t) \equiv 0$. Esto implica que $\Psi(t, x) = 0$ en casi todo punto, y el resultado queda así probado. \square

A partir de aquí, el siguiente resultado es inmediato:

COROLARIO 2.20. Dada $g(x) \in L^2(\mathbb{R}^d)$, si la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (1.1.1) con potencial $V(x)$ real admite alguna solución

$$\Psi(t, x) \in \mathcal{A}_d \quad \text{tal que} \quad \Psi(0, x) \equiv g(x),$$

entonces es la única solución con estas propiedades.

DEMOSTRACIÓN. Si fuesen $\Psi_1(t, x)$ y $\Psi_2(t, x)$ soluciones de la ecuación (1.1.1) con las condiciones límite del enunciado, entonces la función

$$\Psi(t, x) = \Psi_1(t, x) - \Psi_2(t, x) \in \mathcal{A}_d$$

también sería solución y además cumpliría que $\Psi(0, x) \equiv 0$. Entonces, por el teorema 2.19. se sigue que:

$$\Psi \equiv 0 \implies \Psi_1 \equiv \Psi_2.$$

□

De esta forma, podemos asegurar la unicidad de la solución de la E.D.P. con condiciones límite (2.5.19) si sólo buscamos soluciones que vivan en \mathcal{A}_d . El problema ahora es determinar si existe la solución, y encontrarla.

De momento, tomamos un candidato a solución

$$\Psi(t, x) := \sum_0^{+\infty} a_n \Psi_n(t, x).$$

Si queremos ajustar el dato inicial $\Psi(0, x) = f(x)$, debemos determinar los coeficientes a_n . La clave para para ello va a ser aprovechar la estructura de $L^2(\mathbb{R})$ como espacio de Hilbert. Si el conjunto de funciones en (2.4.18)

$$\mathcal{H} = \{u_n(x) : n \in \mathbb{N}_0\}$$

fuese una base ortonormal de $L^2(\mathbb{R})$, se tendría que

$$(2.5.21) \quad \sum_{n=0}^{+\infty} \langle f, u_n \rangle u_n(x) = f(x) \quad \forall f \in L^2(\mathbb{R}).$$

Si pudiésemos asegurar la convergencia uniforme y de las derivadas de la serie anterior, de modo que la función definida por la serie

$$(2.5.22) \quad \Psi(t, x) := \sum_{n=0}^{+\infty} \langle f, u_n \rangle e^{-i(2n+1)\pi vt} u_n(x)$$

esté en \mathcal{A}_1 , ésta sería la (única) solución de (2.5.19) y tendríamos resuelto el problema. Esto ocurriría de manera trivial si por ejemplo tomásemos $f \in \text{span}\{u_n\}_{n \geq 0}$ (que como veremos es denso en $L^2(\mathbb{R})$). También puede probarse que exigiendo condiciones adecuadas de suavidad sobre la función f , por ejemplo $f \in \mathcal{S}$, se cumplirá que $\Psi \in \mathcal{A}_1$, si bien omitimos esta prueba técnica.

Otra opción es ser menos ambiciosos con la convergencia de las series anteriores, de modo que al menos podamos asegurar una convergencia en el sentido de $L^2(\mathbb{R})$. Si probamos que \mathcal{H} es una base ortonormal entonces tendríamos convergencia en la norma $\|\cdot\|_2$ en (2.5.21), y por tanto también en (2.5.22) (para t fijo). La función Ψ anterior, por tanto, sería una suerte de *solución aproximada* de (2.5.19), para cualquier $f \in L^2(\mathbb{R})$.

En general, tendríamos que para cada $\epsilon > 0$ existiría un cierto $N \in \mathbb{N}$ tal que la función

$$(2.5.23) \quad \Psi^N(t, x) = \sum_{n=0}^N \langle f, u_n \rangle \Psi_n(t, x) \in \mathcal{A}_1$$

es una solución de la ecuación tal que

$$\|\Psi^N(0, \cdot) - f\|_2 < \epsilon.$$

Proponemos pues la siguiente definición alternativa de solución:

DEFINICIÓN 2.21. Dada $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$, diremos que una sucesión $(\Psi^N)_{N \geq 0} \subset \mathcal{A}_d$ es una **solución aproximada a f** de la E.D.P.

$$-\frac{\hbar}{i}\Psi_t = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + \|x\|^2\Psi,$$

si Ψ^N es solución de la ecuación anterior para cada N y además se tiene que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \|\Psi^N(0, \cdot) - f\|_2 = 0.$$

Sin centrarnos en estudiar la convergencia de las series (2.5.22), nos vamos a conformar con este tipo de soluciones aproximadas.

Nuestros próximos esfuerzos van orientados por tanto a demostrar que el conjunto \mathcal{H} forma una base ortonormal de $L^2(\mathbb{R})$. Para ello vamos a ver que las funciones u_n calculadas en las secciones anteriores forman un conjunto ortonormal y completo en el espacio de Hilbert anterior.

Empezamos viendo la ortogonalidad. Utilizamos una propiedad fundamental del operador \hat{H} definido en la sección anterior:

LEMA 2.22. El operador $\hat{H} = -\partial_x^2 + x^2$ es hermitico sobre funciones de \mathcal{S} , es decir cumple que

$$\langle \hat{H}u, v \rangle = \langle u, \hat{H}v \rangle \quad \forall u, v \in \mathcal{S}$$

DEMOSTRACIÓN. La prueba de este hecho se sigue directamente de que

$$\hat{H} = \frac{D^*D + DD^*}{2},$$

donde D y D^* son los operadores destrucción y creación definidos en la sección anterior. En efecto, dadas $u, v \in \mathcal{S}$ obtenemos el resultado utilizando la linealidad del producto escalar y el lema 2.5 de la sección anterior:

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}u, v \rangle &= \frac{1}{2} (\langle D^*Du, v \rangle + \langle DD^*u, v \rangle) \\ &= \frac{1}{2} (\langle u, DD^*v \rangle + \langle u, D^*Dv \rangle) = \langle u, \hat{H}v \rangle \end{aligned}$$

□

La ortogonalidad de las funciones u_n se sigue entonces de este lema con un argumento muy sencillo.

PROPOSICIÓN 2.23. El conjunto $\mathcal{H} = \{u_n : n \in \mathbb{N}_0\} \subset L^2(\mathbb{R})$ es ortonormal en este espacio.

DEMOSTRACIÓN. Ya vimos la normalización de este conjunto en la sección 2.4. Para ver la ortogonalidad utilizamos el lema anterior.

Dados $n, m \in \mathbb{N}$ con $n \neq m$ se tiene que

$$\begin{aligned} (2n+1)\langle u_n, u_m \rangle &= \langle \hat{H}u_n, u_m \rangle = \langle u_n, \hat{H}u_m \rangle = (2m+1)\langle u_n, u_m \rangle \\ &\Rightarrow (n-m)\langle u_n, u_m \rangle = 0, \end{aligned}$$

pero como $n-m \neq 0$ tiene que ser $\langle u_n, u_m \rangle = 0$ y el resultado queda probado. □

Para ver la completitud del sistema $\text{span}(\mathcal{H})$ utilizamos una caracterización de los conjuntos ortonormales en los espacios de Hilbert que forman una base, cuya prueba se puede consultar por ejemplo en [6, Theorem 5.27 pág 175].

LEMA 2.24. Sea $\{v_n\}_{n \geq 0}$ un sistema ortonormal en un espacio de Hilbert \mathbb{H} con la propiedad de que para cada $f \in \mathbb{H}$ tal que

$$\langle f, v_n \rangle = 0, \quad \forall n \in \mathbb{N}_0,$$

implica que $f \equiv 0$.

Entonces $\{v_n\}_{n \geq 0}$ es una base ortonormal de \mathbb{H} .

Ahora, como se tiene que

$$u_n = C e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x)$$

donde H_n es un polinomio de grado n , dado que el producto escalar es lineal, es inmediato comprobar que:

$$\left\langle e^{-\frac{x^2}{2}} u_n, f \right\rangle = 0 \quad \forall n \geq 0 \iff \left\langle e^{-\frac{x^2}{2}} x^n, f \right\rangle = 0 \quad \forall n \geq 0,$$

por lo tanto para demostrar la completitud del subespacio generado por \mathcal{H} , basta con demostrar el siguiente teorema:

TEOREMA 2.25. *Sea $f \in L^2(\mathbb{R})$. Entonces*

$$f \perp \left\{ x^n e^{-\frac{x^2}{2}} : n \in \mathbb{N}_0 \right\} \iff f \equiv 0.$$

Para demostrar este teorema utilizaremos una herramienta muy útil en el análisis de Fourier: las aproximaciones de la identidad.

DEFINICIÓN 2.26. $\{I_\epsilon\}_{\epsilon>0} \subset L^1(\mathbb{R})$ es una **aproximación de la identidad (A.I.)** si:

1. $\int_{\mathbb{R}} I_\epsilon(y) dy = 1, \forall \epsilon > 0$
2. $A := \sup \left\{ \int_{\mathbb{R}} |I_\epsilon(y)| dy : \epsilon > 0 \right\} < +\infty$
3. $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R} - (-\delta, \delta)} |I_\epsilon(y)| dy = 0, \forall \delta > 0.$

Por otro lado, introducimos otra herramienta muy utilizada en el análisis de Fourier: las *convoluciones*. No vamos a extendernos en el uso de esta herramienta, simplemente establecemos la notación

$$f * g(x) := \int_{\mathbb{R}} f(x-y)g(y) dy,$$

para cada par de funciones f y g en $L^1(\mathbb{R})$.

Si consideramos $L^1(\mathbb{R})$ como espacio normado, entonces las A.I. son de gran utilidad por el siguiente teorema, cuya demostración puede consultarse por ejemplo en [6, pág 243]:

TEOREMA 2.27. *Sea $\{I_\epsilon\}_{\epsilon>0} \subset L^1(\mathbb{R})$ una A.I. Entonces si $f \in L^1(\mathbb{R})$ se tiene que*

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} I_\epsilon * f(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}} I_\epsilon(y-x)f(y) dy = f(x)$$

donde el límite anterior es convergente en la norma $\|\cdot\|_1$ de $L^1(\mathbb{R})$.

La demostración del teorema 2.25. va a llevar trabajo, pero utilizando el resultado anterior lograremos nuestro objetivo.

Comenzamos definiendo la función

$$g(\xi) := \int_{\mathbb{R}} e^{-2\pi i x \xi} f(x) e^{-\frac{x^2}{2}} dx, \quad \xi \in \mathbb{R}.$$

Observemos que esta función está bien definida, pues puede verse como el producto escalar de dos funciones en $L^2(\mathbb{R})$. Vamos a ver además que es idénticamente nula, es decir $g \equiv 0$ en \mathbb{R} .

Para ello, observemos que, usando la serie de potencias de la exponencial $e^{-2\pi i x \xi}$:

$$\begin{aligned} g(\xi) &= \int_{\mathbb{R}} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N \frac{(-2\pi i x \xi)^n}{n!} f(x) e^{-\frac{x^2}{2}} dx \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N \frac{(-2\pi i \xi)^n}{n!} \int_{\mathbb{R}} f(x) x^n e^{-\frac{x^2}{2}} dx = 0, \end{aligned}$$

pues $f \perp x^n e^{-\frac{x^2}{2}} \forall n \in \mathbb{N}$ por hipótesis.

En la penúltima igualdad hemos utilizado el teorema de la convergencia dominada (ver [6, pág 54]), que podemos aplicar porque

$$\begin{aligned} \left| \sum_{n=0}^N \frac{(-2\pi i x \xi)^n}{n!} f(x) e^{-\frac{x^2}{2}} \right| &\leq \sum_{n=0}^N \frac{|2\pi i x \xi|^n}{n!} |f(x)| e^{-\frac{x^2}{2}} \\ &\leq e^{2\pi |x| |\xi|} |f(x)| e^{-\frac{x^2}{2}} \end{aligned}$$

donde como las funciones $e^{2\pi |x| |\xi| - \frac{x^2}{2}}$ y $|f(x)|$ están en $L^2(\mathbb{R})$, su producto es integrable por la desigualdad de Cauchy-Schwarz en $L^2(\mathbb{R})$.

Ahora, dado $y \in \mathbb{R}$ y $\epsilon > 0$, utilizando el teorema de Fubini podemos escribir:

$$0 = \int_{\mathbb{R}} e^{2\pi i y \xi} e^{-\epsilon^2 \xi^2} g(\xi) d\xi = \int_{\mathbb{R}} f(x) e^{-\frac{x^2}{2}} \left(\int_{\mathbb{R}} e^{2\pi i (y-x)\xi} e^{-\epsilon^2 \xi^2} d\xi \right) dx.$$

Entonces, si ahora denotamos

$$f(x) e^{-\frac{x^2}{2}} = h(x) \quad \text{y} \quad \int_{\mathbb{R}} e^{2\pi i (y-x)\xi} e^{-\epsilon^2 \xi^2} d\xi = I_\epsilon(y-x),$$

tenemos que

$$0 = \int_{\mathbb{R}} h(x) I_\epsilon(y-x) dx = h * I_\epsilon(y) = I_\epsilon * h(y).$$

Luego, si logramos ver que $\{I_\epsilon(y) \mid \epsilon > 0\}$ es una aproximación de la identidad, haciendo que ϵ tienda a cero, por el teorema de convergencia de aproximaciones de la identidad se tendría que

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \|h(y) - I_\epsilon * h(y)\|_1 = 0 \Rightarrow \|h(y)\|_1 = 0 \Rightarrow h \equiv 0 \Rightarrow f \equiv 0,$$

lo que probaría el Teorema 2.25. (donde $\|\cdot\|_1$ denota la norma en $L^1(\mathbb{R})$).

Por tanto, si conseguimos ver que $I_\epsilon(y)$ satisface las condiciones necesarias para ser una aproximación de la identidad podremos dar por demostrado el teorema 2.25. Vamos a probar este hecho.

Primero vamos a transformar $I_\epsilon(y)$ en algo más manejable. Realizamos el cambio de variable $\epsilon \xi = \eta$, de manera que:

$$I_\epsilon(y-x) = \frac{1}{\epsilon} \int_{\mathbb{R}} e^{\frac{2\pi i (y-x)\eta}{\epsilon}} e^{-\eta^2} d\eta = \frac{1}{\epsilon} I_1\left(\frac{y-x}{\epsilon}\right)$$

donde $I_1(s) = \int_{\mathbb{R}} e^{2\pi i s \xi} e^{-\xi^2} d\xi$.

Vamos a ver que $I_1(s) \in L^1(\mathbb{R})$, de manera que se tendrá que

$$I_\epsilon(y) \in L^1(\mathbb{R}) \quad \forall \epsilon > 0.$$

Para ello, necesitamos el siguiente resultado auxiliar para integrales de funciones analíticas:

LEMA 2.28.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s^2} ds = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(s+ti)^2} ds \quad \forall t \in \mathbb{R}$$

DEMOSTRACIÓN. Observemos que e^z es una función entera, luego $e^{-z^2} = F(z)$ también lo es.

Consideremos γ_N , un camino cerrado en \mathbb{C} que se divide en cuatro subcaminos como sigue:

$$\gamma_N(s) := \begin{cases} \gamma_N^1(s) = s & \text{con } s \in [-N, N] \\ \gamma_N^2(s) = N + si & \text{con } s \in [0, t] \\ \gamma_N^3(s) = -s + ti & \text{con } s \in [-N, N] \\ \gamma_N^4(s) = -N + (t-s)i & \text{con } s \in [0, t] \end{cases}$$

donde $t \in \mathbb{R}$ es un parámetro fijo.

Observemos que como γ_N es un ciclo y $F(z)$ una función holomorfa en \mathbb{C} por el teorema de Cauchy (ver Apéndice 1) se tiene que:

$$\int_{\gamma_N} F(z)dz = \int_{\gamma_N^1} F(z)dz + \int_{\gamma_N^2} F(z)dz + \int_{\gamma_N^3} F(z)dz + \int_{\gamma_N^4} F(z)dz = 0.$$

Vamos a ver que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\gamma_N^2} F(z)dz = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\gamma_N^4} F(z)dz = 0,$$

de donde se va a obtener directamente el resultado del enunciado.

Centrándonos primero en la integral sobre γ_N^2 se tiene que

$$\begin{aligned} \left| \int_{\gamma_N^2} F(z) dz \right| &= \left| \int_0^t e^{-(N+si)^2} i ds \right| = \left| \int_0^t e^{-(N^2-s^2+2Nsi)} i ds \right| \\ &\leq \int_0^t \left| e^{-(N^2-s^2)} \right| ds = e^{-N^2} \int_0^t e^{s^2} ds \leq e^{-N^2} t e^{t^2}, \end{aligned}$$

donde en la primera desigualdad hemos utilizado la desigualdad triangular para la integral curvilínea compleja.

Mirando esta expresión, es claro que $\lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\gamma_N^2} F(z)dz = 0$.

Para calcular la integral sobre γ_N^4 , observemos que

$$-\gamma_N^4(s) = -N + si, \quad \forall s \in [0, t],$$

es la curva opuesta de γ_N^4 , de manera que:

$$\left| \int_{\gamma_N^4} F(z) dz \right| = \left| - \int_{-\gamma_N^4} F(z) dz \right| = \left| \int_0^t e^{-(-N+si)^2} i ds \right|$$

y razonando como antes llegamos a que $\lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\gamma_N^4} F(z)dz = 0$.

Llegamos por el teorema de Cauchy a que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\gamma_N^1} F(z)dz = \lim_{N \rightarrow \infty} - \int_{\gamma_N^3} F(z)dz$$

donde $\lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\gamma_N^1} F(z)dz = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s^2} ds$ y si una vez más consideramos un camino opuesto

$$-\gamma_N^3 = s + ti, \quad \forall s \in [-N, N],$$

entonces:

$$- \int_{\gamma_N^3} F(z) dz = \int_{-\gamma_N^3} F(z) dz = \int_{-N}^N e^{-(s+ti)^2} ds$$

Tomando límites en la expresión anterior se obtiene el resultado. \square

A partir del lema anterior un resultado inmediato es el siguiente:

COROLARIO 2.29.

$$I_1(s) = \sqrt{\pi} e^{-\pi^2 s^2} \in L^1(\mathbb{R}).$$

DEMOSTRACIÓN.

$$\begin{aligned} I_1(s) &= \int_{\mathbb{R}} e^{-(\xi^2 - 2\pi i s \xi)} d\xi = e^{-\pi^2 s^2} \int_{\mathbb{R}} e^{-(\xi - \pi i s)^2} d\xi \\ &= e^{-\pi^2 s^2} \int_{\mathbb{R}} e^{-t^2} dt = e^{-\pi^2 s^2} \sqrt{\pi} \end{aligned}$$

donde en la penúltima igualdad hemos aplicado el lema 2.28. Es inmediato que $e^{-\pi^2 s^2} \sqrt{\pi} \in L^1(\mathbb{R})$. \square

Viendo la demostración anterior se deduce el siguiente resultado:

$$I_\epsilon(y) = \frac{1}{\epsilon} I_1\left(\frac{y}{\epsilon}\right) = \frac{1}{\epsilon} \sqrt{\pi} e^{-\pi^2 \frac{y^2}{\epsilon^2}}$$

lo cual nos lleva a probar el punto 1 de la definición de las aproximaciones de la identidad de manera muy sencilla:

COROLARIO 2.30.

$$\int_{\mathbb{R}} I_\epsilon(y) dy = 1, \quad \forall \epsilon > 0.$$

DEMOSTRACIÓN.

$$\int_{\mathbb{R}} I_\epsilon(y) dy = \frac{\sqrt{\pi}}{\epsilon} \int_{\mathbb{R}} e^{-\left(\frac{\pi y}{\epsilon}\right)^2} dy = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-z^2} dz = 1$$

En la segunda igualdad hemos aplicado el cambio de variable $z = \frac{\pi y}{\epsilon}$. \square

Observemos que $\frac{\sqrt{\pi}}{\epsilon} e^{-\frac{\pi^2 y^2}{\epsilon^2}}$ es una función positiva, luego la acotación de las $\|I_\epsilon(y)\|_1$ es inmediata y también se cumple el punto 2 de la definición 2.26.

Nos falta ver que $\{I_\epsilon(y)\}_{\epsilon > 0}$ se comporta como una δ de Dirac, es decir:

LEMA 2.31.

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R} - (-\delta, \delta)} I_\epsilon(y) dy = 0, \quad \forall \delta > 0.$$

DEMOSTRACIÓN. Observemos que, como $I_\epsilon(y)$ es una función par,

$$\int_{\mathbb{R} - (-\delta, \delta)} I_\epsilon(y) dy = 2 \int_{\delta}^{+\infty} I_\epsilon(y) dy.$$

Nos fijamos en esta última integral:

$$\begin{aligned} \int_{\delta}^{+\infty} I_\epsilon(y) dy &= \frac{\sqrt{\pi}}{\epsilon} \int_{\delta}^{+\infty} e^{-\frac{\pi^2 y^2}{\epsilon^2}} dy = \frac{\sqrt{\pi}}{\epsilon} \int_0^{+\infty} e^{-\frac{\pi^2 (z+\delta)^2}{\epsilon^2}} dz \\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{\epsilon} e^{-\frac{\pi^2 \delta^2}{\epsilon^2}} \int_0^{+\infty} e^{-\frac{\pi^2 z^2}{\epsilon^2}} e^{-\frac{2\pi^2 z \delta}{\epsilon^2}} dz \\ &\leq \frac{\sqrt{\pi}}{\epsilon} e^{-\frac{\pi^2 \delta^2}{\epsilon^2}} \int_0^{+\infty} e^{-\frac{\pi^2 z^2}{\epsilon^2}} dz = e^{-\frac{\pi^2 \delta^2}{\epsilon^2}} \frac{1}{\sqrt{\pi}}, \end{aligned}$$

donde en la segunda igualdad hemos aplicado el cambio $z = y - \delta$ y en la última igualdad hemos utilizados el cambio $s = \frac{\pi z}{\epsilon}$ para calcular la integral Gaussiana. La desigualdad de la tercera línea se sigue de que la función e^{-z} es monótona decreciente para z positivo.

Concluimos por tanto que,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\delta}^{+\infty} I_\epsilon(y) dy \leq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} e^{-\frac{\pi^2 \delta^2}{\epsilon^2}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} = 0,$$

de donde se sigue el resultado. \square

Con esto hemos terminado de ver que $\{I_\epsilon\}_{\epsilon > 0}$ es una A.I. y en consecuencia queda probada la completitud del sistema $\{x^n e^{-x^2/2}\}_{n \geq 1}$ en $L^2(\mathbb{R})$. Por lo tanto, concluimos como consecuencia de la Proposición 2.23 y el Teorema 2.25 el siguiente resultado:

COROLARIO 2.32. *El conjunto $\mathcal{H} = \{u_n\}_{n \geq 0}$ (con los u_n dados en (2.4.18)) es una base ortonormal de $L^2(\mathbb{R})$.*

Recordando la definición de *solución aproximada* vista en la Definición 2.21, hemos demostrado el siguiente teorema, que cierra la sección y el capítulo.

TEOREMA 2.33. Dada $f \in L^2(\mathbb{R})$, la sucesión de funciones en $L^2(\mathbb{R}^2)$

$$\Psi^N(t, x) = \sum_{n=0}^N \langle f, u_n \rangle e^{-i(2n+1)\pi\nu t} u_n(x), \quad N \geq 0,$$

es una solución aproximada a f de la ecuación del oscilador armónico dependiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar}{i}\Psi_t = -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_{xx} + x^2\Psi.$$

El laplaciano en la esfera

1. Introducción

El problema de plantear el modelo de un sistema hidrogenoide (que consta de un electrón girando alrededor de un núcleo de una cierta carga Z) es uno de los problemas que más se han estudiado en mecánica cuántica.

Éste se puede plantear equivalentemente como un problema de una partícula sometida a una **fuerza central**. Este problema es más general, y el átomo de hidrógeno se puede ver como un caso particular del mismo.

Una fuerza se dice central si proviene de un potencial con simetría esférica, es decir si cumple:

$$\vec{F}(x, y, z) = (-\nabla V)(x, y, z) = -V'(r) \frac{(x, y, z)}{r}$$

donde $r = \|(x, y, z)\|$ es la magnitud de la distancia de la partícula al origen de la fuerza (suponemos el origen de la fuerza en el origen del espacio euclídeo).

La energía potencial puede, por tanto, expresarse únicamente en función de r y si utilizamos coordenadas esféricas en \mathbb{R}^3 la expresión del potencial se simplifica mucho.

Utilizamos a partir de ahora las siguientes coordenadas en \mathbb{R}^3 :

$$\begin{cases} x = r \sin \phi \cos \theta \\ y = r \sin \phi \sin \theta \\ z = r \cos \phi \\ r > 0, \quad 0 \leq \phi \leq \pi, \quad 0 \leq \theta \leq 2\pi \end{cases}$$

Con estas coordenadas, podemos expresar el operador Hamiltoniano de una partícula sometida a una fuerza central como sigue:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_E + V(r)$$

donde Δ_E denota el operador Laplaciano en coordenadas esféricas. El Laplaciano en esféricas tiene la forma:

$$(3.1.1) \quad \Delta_E = \partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\mathbb{S}^2},$$

donde

$$(3.1.2) \quad \Delta_{\mathbb{S}^2} = \partial_\phi^2 + \frac{\cos \phi}{\sin \phi} \partial_\phi + \frac{1}{\sin^2 \phi} \partial_\theta^2$$

es la parte angular del Laplaciano en esféricas, que puede verse como el operador Laplaciano restringido a la esfera unidad. El cálculo del operador Laplaciano en coordenadas esféricas se incluye en el Apéndice 4.

Ahora, si escribimos $a = \frac{\hbar^2}{2m}$ (en aras de la simplicidad, como en el anterior capítulo) concluimos que la energía total del sistema de una partícula mecanocuántica sometida a una fuerza central viene dada en coordenadas esféricas por el Hamiltoniano:

$$(3.1.3) \quad \hat{H} = \left[-a \left(\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r \right) - \frac{a}{r^2} \Delta_{\mathbb{S}^2} \right] + V(r)$$

Nuestro objetivo, como en el anterior capítulo, es obtener todos los estados de energía admisibles de una partícula en estas condiciones. Es decir, queremos calcular los autovalores y autofunciones de este operador diferencial.

Para ello planteamos la ecuación de Schrödinger asociada a esta situación: si $\psi(r, \theta, \phi)$ es la función de onda de un estado de la partícula del sistema anterior (en coordenadas esféricas), entonces satisface la ecuación

$$-a \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + V(r)\psi - \frac{a}{r^2} \Delta_{\mathbb{S}^2} \psi = E\psi,$$

donde $E \in \mathbb{R}$ es un estado de energía admisible. Escribiendo $\lambda = \frac{E}{a}$, multiplicando por menos uno y dividiendo entre a llegamos a la ecuación que vamos a resolver:

$$(3.1.4) \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{1}{a} V(r)\psi + \frac{1}{r^2} \Delta_{\mathbb{S}^2} \psi = -\lambda\psi.$$

Nótese que la ecuación anterior tiene una parte radial y otra angular bien diferenciada, luego el método de separación de variables parece óptimo para resolverla.

Antes de plantear alguna solución, fijémonos en las condiciones de admisibilidad. El cuadrado de la función ψ tiene que ser una densidad de probabilidad, así que como poco tiene que ser cuadráticamente integrable. Puesto que estamos utilizando coordenadas esféricas, esto se traduce en que

$$\int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\psi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin \phi \, dr \, d\theta \, d\phi = 1.$$

En la aplicación posterior al átomo de hidrógeno tomaremos $V(r) = -1/r$, que es analítica en $\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$. Por tanto, podemos buscar soluciones ψ de (3.1.4) que sean analíticas en $\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$. Además, es posible probar que en ese caso las soluciones ψ son automáticamente continuas en el origen (de hecho incluso α -Hölder continuas para todo $\alpha \in (0, 1)$; ver [9, Theorem 11.7 y Example 11.10]).

Por tanto, no será restrictivo suponer a partir de ahora que

$$\psi \in C^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}) \cap C(\mathbb{R}^3).$$

Por separación de variables, busquemos soluciones de la forma $\psi = R(r)Y(\theta, \phi)$, donde R e Y son funciones analíticas. Ello nos transforma la ecuación (3.1.4) en

$$R''Y + \frac{2}{r}R'Y + \frac{1}{r^2}R\Delta_{\mathbb{S}^2}Y - \frac{1}{a}V(r)RY = -\lambda RY.$$

Multiplicando esta ecuación por $\frac{r^2}{RY}$ y agrupando, llegamos a que:

$$\frac{r^2 R''}{R} + \frac{2r R'}{R} - \frac{V(r)}{a} r^2 + \lambda r^2 = -\frac{\Delta_{\mathbb{S}^2} Y}{Y} \equiv cte = \mu.$$

Esto último, unido a las condiciones de contorno, nos transforma la ecuación (3.1.4) en dos ecuaciones:

$$(3.1.5) \quad \begin{cases} -\Delta_{\mathbb{S}^2} Y = \mu Y \\ Y \in L^2(\mathbb{S}^2) \end{cases}$$

$$(3.1.6) \quad \begin{cases} r^2 R'' + 2r R' + R \left(-\frac{V(r)}{a} r^2 + \lambda r^2 - \mu \right) = 0 \\ R \in L^2((0, +\infty), r^2 dr) \cap C([0, +\infty)) \end{cases}$$

Ahora tenemos dos problemas que vamos a resolver por separado. Para (3.1.6) estudiaremos el caso particular del átomo de hidrógeno en el capítulo siguiente, que como ya mencionábamos

corresponde al potencial $V(r) = -1/r$.

En las próximas secciones de este capítulo nos vamos a centrar en resolver la E.D.P. (3.1.5). Esta ecuación tiene un interés particular, pues con ella estudiamos los autovalores del operador Laplaciano en la esfera. Puede además razonarse (véase [8, pág 101]) que $-\Delta_{\mathbb{S}^2}$ es el operador asociado al *momento angular orbital de una partícula* (equivalente en mecánica cuántica al momento angular clásico de una partícula).

A partir de ahora, las veces que nos refiramos por palabra al operador laplaciano, implícitamente lo estaremos tomando con signo negativo y retringiéndolo a la esfera unidad.

2. Transformando la ecuación

Buscamos soluciones de (3.1.5) por separación de variables. Recordamos, dada una función f , la notación $f(x_0^\pm) = \lim_{x \rightarrow x_0^\pm} f(x)$ (si existe el límite). En coordenadas esféricas escribimos

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi),$$

y buscamos soluciones $\Theta \in C^\infty((0, 2\pi))$ y $\Phi \in C^\infty((0, \pi))$ (incluso analíticas) que cumplan

$$\Theta(0) = \Theta(2\pi), \Theta'(0) = \Theta'(2\pi) \quad \text{y} \quad \exists \Phi(0^+), \Phi(\pi^-).$$

Hacemos notar que las condiciones de contorno anteriores, aunque suficientes para nuestros propósitos, pueden tomarse incluso más restrictivas, dado que buscamos soluciones que cumplan $Y \in C^\infty(\mathbb{S}^2)$. Por ejemplo, si $\Theta(\theta)$ es no constante, para garantizar la continuidad de Y en los puntos $(0, 0, \pm 1) \in \mathbb{S}^2$ debemos exigir $\Phi(0^+) = \Phi(\pi^-) = 0$, aunque esta condición la cumplirán trivialmente las soluciones que encontremos.

Sustituyendo en la fórmula del operador laplaciano en la esfera (3.1.2), obtenemos:

$$\Theta\Phi'' + \frac{\cos\phi}{\sin\phi}\Theta\Phi' + \frac{1}{\sin^2\phi}\Theta''\Phi = -\mu\Theta\Phi,$$

luego agrupando obtenemos

$$\frac{\Phi'' + \frac{\cos\phi}{\sin\phi}\Phi' + \mu\Phi}{\frac{1}{\sin^2\phi}\Phi} = -\frac{\Theta''}{\Theta} \equiv cte = \delta.$$

Así, obtenemos las dos E.D.O.s siguientes:

$$(3.2.7) \quad \begin{cases} \Theta'' = -\delta\Theta \\ \Theta(0) = \Theta(2\pi) \quad \text{y} \quad \Theta'(0) = \Theta'(2\pi) \end{cases}$$

$$(3.2.8) \quad \begin{cases} \Phi'' + \frac{\cos\phi}{\sin\phi}\Phi' + \mu\Phi = \frac{\delta}{\sin^2\phi}\Phi \\ \exists \Phi(0^+), \exists \Phi(\pi^-) \end{cases}$$

Vamos a tratar de resolver estos dos problemas por separado. Empezamos con (3.2.7), que es elemental. Es inmediata la siguiente proposición, que se ha visto en el curso de grado de E.D.P.s y series de Fourier:

PROPOSICIÓN 3.1. *La E.D.O. (3.2.7) tiene solución analítica si, y sólo si $\delta = m^2$ con $m \in \mathbb{Z}$, en cuyo caso*

$$\Theta(\theta) = Ae^{im\theta} + Be^{-im\theta}, \quad A, B \in \mathbb{C}.$$

Observemos que $\{\Theta_m(\theta) = e^{im\theta} : m \in \mathbb{Z}\}$ es un conjunto ortogonal en $L^2((0, 2\pi))$, que de hecho forma una base ortogonal de este espacio (la base de Fourier).

Debido a la unicidad de soluciones de las ecuaciones lineales con condiciones iniciales (véase [2, pág 74]), podemos concluir que el conjunto anterior es un sistema completo de soluciones de (3.2.7).

A partir de ahora fijamos $\delta = m^2 \in \mathbb{N}_0$, y vamos a resolver (3.2.8) para estos valores de δ .

Como veremos, el estudio de esta E.D.O. va a ser más trabajoso, y necesitaremos simplificar la ecuación con cambios de variable antes de plantearnos resolverla.

Tenemos una ecuación diferencial con coeficientes trigonométricos que no podemos resolver directamente. Dado que sólo aparecen senos y cosenos, el cambio de variable $x = \cos \phi \in (-1, 1)$ (pues $\phi \in (0, \pi)$) puede resultar útil.

Si Φ es solución de (3.2.8), definimos

$$\tilde{\Phi}(x) = \tilde{\Phi}(\cos \phi) := \Phi(\phi), \quad x = \cos \phi \in (-1, 1),$$

de manera que, aplicando la regla de la cadena:

$$\begin{aligned} \frac{d\Phi}{d\phi} &= \frac{d\tilde{\Phi}}{dx} \frac{dx}{d\phi} = \tilde{\Phi}'(x) (-\sin \phi) \\ \frac{d^2\Phi}{d\phi^2} &= \tilde{\Phi}''(x) \sin^2 \phi + \tilde{\Phi}'(x) (-\cos \phi). \end{aligned}$$

Así, sustituyendo en (3.2.8), obtenemos la E.D.O.

$$(3.2.9) \quad \begin{cases} (1-x^2) \tilde{\Phi}''(x) - 2x \tilde{\Phi}'(x) + \left(\mu - \frac{m^2}{1-x^2}\right) \tilde{\Phi}(x) = 0, & x \in (-1, 1) \\ \exists \tilde{\Phi}(1^-), \tilde{\Phi}(-1^+) \end{cases}$$

Obsérvese que

$$\Phi \in L^2((0, \pi), \sin \phi d\phi) \iff \tilde{\Phi} \in L^2((-1, 1), dx).$$

Esta E.D.O. es presumiblemente más sencilla (pues no involucra términos trigonométricos), pero tiene un término con coeficiente fraccional $-\frac{m^2}{1-x^2}$ que sigue entorpeciendo la búsqueda de soluciones analíticas.

Como antes, buscamos un cambio de variable que erradique este coeficiente molesto. Planteamos:

$$\tilde{\Phi}(x) = (1-x^2)^a u(x), \quad a \in \mathbb{R}.$$

Buscamos a de manera que al aplicar el cambio se nos transforme (3.2.9) en una ecuación (a ser posible) sin coeficientes singulares.

Sustituyendo y operando llegamos a que:

$$(1-x^2)^a \left[(1-x^2) u'' - 2x(2a+1)u' - 2au - 4a^2u + \left(\frac{4a^2}{1-x^2} - \frac{m^2}{1-x^2}\right)u + \mu u \right] = 0$$

Así, vemos que escogiendo $a = \pm \frac{m}{2}$ podemos quitarnos el término singular en (3.2.9) y obtener la ecuación

$$(1-x^2)^{\pm \frac{m}{2}} \left[(1-x^2) u'' - 2x(\pm m+1)u' + (\mu \mp m(\pm m+1))u \right] = 0$$

Como tienen que existir los límites $\tilde{\Phi}(1^-)$ y $\tilde{\Phi}(-1^+)$, escogemos $a = \frac{|m|}{2} \geq 0$, de manera que como además $x \in (-1, 1)$ entonces $(1-x^2) > 0$ y resolver (3.2.9) es equivalente a resolver:

$$(3.2.10) \quad \begin{cases} (1-x^2) u''(x) - 2x(|m|+1)u'(x) + (\mu - |m|(|m|+1))u(x) = 0 \\ \exists \lim_{x \rightarrow 1} (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} u(x), \quad \exists \lim_{x \rightarrow -1} (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} u(x) \end{cases}$$

Hemos llegado así a una E.D.O. lineal con coeficientes analíticos.

Llegados a este punto, podríamos hacer como en el capítulo anterior y buscar soluciones que se escriban como serie de potencias. Sin embargo en esta ocasión vamos a seguir otra vía, más elegante y menos arriesgada, basada en las propiedades de una familia de polinomios ortogonales bien conocida. Lo vemos en la siguiente sección.

3. Los polinomios de Legendre

Por simplicidad, escribimos $|m| = n \in \mathbb{N}_0$ en (3.2.10). A partir de ahora vamos a suponer que $\mu = l(l+1)$ con $l \in \mathbb{N}$. El lector se estará preguntando qué nos lleva a fijar precisamente estos valores para μ . La respuesta es que, para estos valores de μ , las ecuaciones diferenciales ordinarias que aparecen en (3.2.10) son bien conocidas en la literatura, y podemos aprovechar la forma explícita de sus soluciones.

En particular, cuando $n = 0$ la ecuación (3.2.10) presenta este aspecto

$$(3.3.11) \quad (1-x^2)u'' - 2xu' + l(l+1)u = 0, \quad -1 < x < 1,$$

y esta es una ecuación resuelta y estudiada sobradamente en la literatura, conocida como la **ecuación de Legendre** (véase [12, pág 432]).

A las soluciones polinómicas de (3.3.11) que valen 1 en $x = 1$ se les llama **polinomios de Legendre**. Su fórmula explícita puede obtenerse por recurrencia, planteando una solución en serie de potencias de la ecuación anterior (como hicimos en el anterior capítulo), o bien, como vamos a hacer nosotros, mediante la denominada **fórmula de Rodrigues**:

DEFINICIÓN 3.2. Si $l \in \mathbb{N}_0$, definimos:

$$(3.3.12) \quad P_l^0(x) := \frac{1}{2^l l!} \partial^l \left[(x^2 - 1)^l \right], \quad l \in \mathbb{N}_0,$$

que se denomina el **polinomio de Legendre de grado l** .

Podemos obtener de aquí la forma explícita de estos polinomios usando la fórmula del binomio de Newton:

$$\begin{aligned} P_l^0(x) &= \frac{1}{2^l l!} \partial^l \left[\sum_{k=0}^l \binom{l}{k} x^{2(l-k)} (-1)^k \right] \\ &= \frac{1}{2^l l!} \sum_{k=0}^{\lfloor l/2 \rfloor} \frac{l!}{(l-k)! k!} \frac{(2l-2k)!}{(l-2k)!} x^{l-2k} (-1)^k \\ (3.3.13) \quad &= \frac{1}{2^l} \sum_{k=0}^{\lfloor l/2 \rfloor} (-1)^k \frac{(2l-2k)!}{(l-2k)! (l-k)! k!} x^{l-2k} \end{aligned}$$

Observemos que efectivamente este tipo de polinomios cumplen la ecuación (3.3.11).

PROPOSICIÓN 3.3. $P_l^0(x)$ es solución de la ecuación de Legendre (3.3.11):

$$(1-x^2)u'' - 2xu' + l(l+1)u = 0$$

DEMOSTRACIÓN. Sea $Q_l(x) = (x^2 - 1)^l$. Entonces derivando:

$$Q_l'(x) = l(x^2 - 1)^{l-1} 2x \implies (x^2 - 1) Q_l'(x) = 2lx Q_l(x)$$

de manera que $Q_l(x)$ cumple la ecuación diferencial

$$(x^2 - 1) Q_l'(x) - 2lx Q_l(x) = 0$$

Si derivamos esta ecuación $l+1$ veces con respecto a x , entonces aplicando la regla de Leibniz para la derivada de un producto resulta que:

$$\sum_{k=0}^{l+1} \binom{l+1}{k} (x^2 - 1)^{(l+1-k)} (Q_l'(x))^{(k)} - 2l \sum_{k=0}^{l+1} \binom{l+1}{k} x^{(l+1-k)} (Q_l(x))^{(k)} = 0$$

Entonces, como $(x^2 - 1)^{(j)} = 0 \quad \forall j \geq 3$ y $x^{(j)} = 0 \quad \forall j \geq 2$, resulta que

$$\begin{aligned} (x^2 - 1) Q_l^{(l+2)} + (l+1)2xQ_l^{(l+1)} + \frac{(l+1)l}{2}2Q_l^{(l)} - 2l(xQ_l^{(l+1)} + (l+1)Q_l^{(l)}) &= 0 \\ \iff (1-x^2)Q_l^{(l+2)} - 2xQ_l^{(l+1)} + l(l+1)Q_l^{(l)} &= 0 \end{aligned}$$

luego $Q_l^{(l)}(x) = \partial_x^l [(x^2 - 1)^l]$ es solución de la ecuación del enunciado, que al ser una E.D.O. lineal también tiene a $P_l^0(x) = \frac{1}{2^l l!} Q_l^{(l)}(x)$ como solución. \square

De esta manera, hemos encontrado soluciones de (3.2.10) cuando $|m| = n = 0$.

Consideramos ahora el caso más general en que $n \in \mathbb{N}_0$. Se podría pensar que con las cuentas anteriores en realidad no hemos hecho mucho, sin embargo resulta que a partir de los polinomios anteriores podemos definir fácilmente soluciones para la ecuación general (3.2.10). Definimos las siguientes funciones:

DEFINICIÓN 3.4. *Las funciones asociadas de Legendre se definen como:*

$$(3.3.14) \quad P_l^n(x) := (1-x^2)^{\frac{n}{2}} \partial_x^n [P_l^0(x)], \quad x \in (-1, 1), \quad l \in \mathbb{N} \quad y \quad l \geq n.$$

Veamos que estas funciones cumplen efectivamente la ecuación (3.2.10):

LEMA 3.5. *Si $(1-x^2)u'' - 2xu' + \mu u = 0$, entonces $v(x) := \partial^n[u]$ cumple la ecuación*

$$(3.3.15) \quad (1-x^2)v'' - 2(n+1)xv' + (\mu - n(n+1))v = 0$$

DEMOSTRACIÓN. Para ver esto no hay más que derivar n veces y usar Leibniz:

$$\begin{aligned} 0 &= \partial^n [(1-x^2)u'' - 2xu' + \mu u] \\ &= (1-x^2)u^{(n+2)} + n(-2x)u^{(n+1)} + \frac{n(n-1)}{2}(-2)u^{(n)} - 2xu^{(n+1)} - n2u^{(n)} + \mu u^{(n)} \\ &= (1-x^2)u^{(n+2)} - 2(n+1)xu^{(n+1)} + (\mu - n(n+1))u^{(n)} \end{aligned}$$

y así se obtiene el resultado. \square

Por lo tanto, el polinomio $\partial^n [P_l^0(x)]$ es solución de (3.3.15) cuando $\mu = l(l+1)$. Concluimos el siguiente resultado:

COROLARIO 3.6. *Las funciones de Legendre $P_l^n(x) := (1-x^2)^{\frac{n}{2}} \partial^n [P_l^0(x)]$ con $l \geq n$ son soluciones de la ecuación:*

$$(3.3.16) \quad (1-x^2)u'' - 2xu' + \left(l(l+1) - \frac{n^2}{1-x^2} \right) u = 0$$

DEMOSTRACIÓN. Basta utilizar que $\partial^n [P_l^0(x)]$ es solución de (3.3.15) y seguir el razonamiento que se usa para pasar de (3.2.9) a (3.2.10). \square

Echando la vista atrás, nuestro objetivo era encontrar todas las soluciones analíticas de (3.2.9) en $L^2((-1, 1))$, y lo que hemos hecho ha sido dar unas soluciones particulares de la ecuación cuando el parámetro μ toma el valor fijo de $l(l+1)$ con $l \geq |m| = \sqrt{\delta}$.

Si vemos (3.2.9) como un problema de autovalores de un operador diferencial, lo que hemos visto es que para cada $m \in \mathbb{N}_0$ y para cada autovalor de la forma $\mu = l(l+1)$ con $l \in \mathbb{N}_0$, el operador $(1-x^2)\partial_x^2 - 2x\partial_x - \frac{m^2}{1-x^2}$ tiene una autofunción $P_l^{|m|}(x)$.

Observemos que con esto, en principio, no tenemos toda la información que buscamos: no sabemos si los autovalores de la forma anterior son todos los admisibles por el operador de la ecuación diferencial, y ni siquiera podemos asegurar que cualquier autofunción de un autovalor de los anteriores tenga que ser combinación lineal de alguna función de Legendre. Más tarde demostraremos que, en $L^2((-1, 1))$, las funciones de Legendre forman una base ortogonal, y entonces podremos dar por hecho las anteriores condiciones.

La sección siguiente está dedicada a demostrar esto.

4. Las funciones de Legendre forman una base ortogonal

Para facilitar la notación a la hora de referirnos a las funciones asociadas de Legendre, vamos a empezar a utilizar el conjunto

$$\mathbb{N}_n = \{n, n+1, n+2, \dots\}, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Vemos también la forma explícita de estas funciones.

LEMA 3.7. *Dados $n \in \mathbb{N}$ y $l \in \mathbb{N}_n$, se tiene que*

$$(3.4.17) \quad P_l^n(x) = (1-x^2)^{\frac{n}{2}} \frac{1}{2^l} \sum_{j=0}^{\lfloor \frac{l-n}{2} \rfloor} \frac{(2l-2j)!(-1)^j}{(l-2j)!(l-j)!j!} \frac{(l-2j)!}{(l-2j-n)!} x^{l-2j-n}.$$

DEMOSTRACIÓN. Basta derivar n veces la función P_l^n utilizando la regla de Leibniz para la derivada de un producto. \square

Por lo tanto, las funciones asociadas de Legendre son polinomios de grado $l-n$ multiplicados por un factor $(1-x^2)^{\frac{n}{2}}$. Visto esto, comencemos con el estudio del sistema formado por las funciones anteriores.

Para estudiar la ortogonalidad, vamos a seguir unos razonamientos parecidos a los utilizados para demostrar la ortogonalidad de las funciones de Hermite en el capítulo anterior. Queremos transformar el problema de encontrar todas las soluciones de (3.2.9) en $L^2((-1,1))$ en el de encontrar todos los autovalores del operador diferencial

$$\mathcal{L}_n := -(1-x^2)\partial_x^2 + 2x\partial_x + \frac{n^2}{1-x^2} = -\partial_x[(1-x^2)\partial_x] + \frac{n^2}{1-x^2}.$$

que tengan sus autofunciones en $L^2((-1,1))$. Aunque la definición de este operador está clara, tenemos que tener cuidado con la elección de su dominio, pues es claro que no puede ser todo $L^2((-1,1))$.

Como en el caso del oscilador armónico, conviene fijar un entorno de trabajo, un dominio adecuado en el que definir nuestro operador diferencial. Como sólo nos interesan las funciones de Legendre (que veremos que son densas en $L^2((-1,1))$), no hace falta cuidarse de escoger el dominio más grande posible, y podemos fijarnos simplemente en las condiciones de contorno.

Para $n=0$, podría definirse

$$\mathcal{K}_0 = \left\{ f \in \mathcal{C}((-1,1)) : \exists f(\pm 1^\mp), \exists f'(\pm 1^\mp), \exists f''(\pm 1^\mp) \right\}.$$

Claramente, $\{P_l^0\}_{l \geq 0} \subseteq \mathcal{K}$ (pues los P_l^0 son polinomios, por lo que existen todas sus derivadas en cualquier punto), luego el operador

$$\mathcal{L}_0 : \mathcal{K}_0 \longrightarrow L^2((-1,1))$$

está bien definido. Además, cumple que

$$\langle \mathcal{L}_0[f], g \rangle = \langle f, \mathcal{L}_0[g] \rangle, \quad \forall f, g \in \mathcal{K}_0,$$

propiedad que se comprueba fácilmente integrando por partes (ver la demostración que precede a la Proposición 3.9 más adelante).

Si $n \geq 1$, sin embargo, la definición exacta del dominio de \mathcal{L}_n es más sutil, y una descripción completa se saldría del ámbito de este trabajo. Se puede ver su estudio detallado en [3, pág 61]; nosotros usaremos el siguiente conjunto:

DEFINICIÓN 3.8. *Si $n \geq 1$, llamaremos **dominio de \mathcal{L}_n** al conjunto*

$$(3.4.18) \quad \mathcal{K} = \left\{ f \in \mathcal{C}^\infty((-1,1)) : \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} \in \mathcal{C}([-1,1]), \quad \sqrt{1-x^2}f'(x) \in \mathcal{C}([-1,1]) \right\},$$

Viendo la expresión (3.4.17) en el Lema 3.2, es sencillo comprobar que $\{P_l^n\}_{l \in \mathbb{N}_n} \subseteq \mathcal{K}$. Sin embargo, obsérvese que con esta definición aún no podemos garantizar que

$$\mathcal{L}_n : \mathcal{K} \longrightarrow L^2((-1, 1)).$$

Por ejemplo, la función $h(x) = \sqrt{1-x^2} \in \mathcal{K}$, pero si aplicamos el último término del operador \mathcal{L}_n , tendríamos $\frac{n^2 h(x)}{1-x^2} = \frac{n^2}{\sqrt{1-x^2}} \notin L^2((-1, 1))$.

Esta sutileza a la hora de definir el dominio de \mathcal{L}_n se puede arreglar con técnicas de análisis funcional que se salen del ámbito de este trabajo. Sin embargo sí podemos mencionar que el conjunto \mathcal{K} nos sirve como dominio de la forma cuadrática:

$$(3.4.19) \quad \mathcal{Q}_n(f, g) := \int_{-1}^1 \left[(1-x^2)f'(x)\overline{g'(x)} + \frac{n^2}{1-x^2} f(x)\overline{g(x)} \right] dx, \quad \forall f, g \in \mathcal{K},$$

pues es inmediato que la integral anterior toma un valor finito para cualesquiera funciones f y g en \mathcal{K} . A partir de aquí, integrando formalmente por partes, podemos dar una definición de \mathcal{L}_n mediante

$$(3.4.20) \quad \langle \mathcal{L}_n f, g \rangle := \mathcal{Q}_n(f, g), \quad f, g \in \mathcal{K}.$$

En efecto, dado $\epsilon > 0$, la función $[(1-x^2)f'(x)]'$ es continua en el intervalo $[-1+\epsilon, 1-\epsilon]$, luego podemos integrar por partes sin ambigüedad en la expresión

$$\int_{-1+\epsilon}^{1-\epsilon} (1-x^2)f'(x)\overline{g'(x)} dx = \left[(1-x^2)f'(x)\overline{g(x)} \right]_{-1+\epsilon}^{1-\epsilon} - \int_{-1+\epsilon}^{1-\epsilon} [(1-x^2)f'(x)]' \overline{g(x)} dx.$$

Haciendo $\epsilon \rightarrow 0$ y usando que $\left[(1-x^2)f'(x)\overline{g(x)} \right]_{-1+\epsilon}^{1-\epsilon} \rightarrow 0$ cuando $f, g \in \mathcal{K}$ (ya que $\sqrt{1-x^2}f'(x)$ y $g(x)$ son funciones continuas en los extremos), obtenemos que

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_n(f, g) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-1+\epsilon}^{1-\epsilon} \left(-[(1-x^2)f'(x)]' + \frac{n^2}{1-x^2} f(x) \right) \overline{g(x)} dx \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-1+\epsilon}^{1-\epsilon} \mathcal{L}_n f(x) \overline{g(x)} dx, \end{aligned}$$

y ésta es la cantidad que denominaremos $\langle \mathcal{L}_n f, g \rangle$. El razonamiento anterior y la simetría de la forma cuadrática $\mathcal{Q}_n(f, g)$ implican trivialmente que, con esta definición, \mathcal{L}_n es simétrico. Es decir se cumple lo siguiente:

PROPOSICIÓN 3.9. *Dado $n \in \mathbb{N}_0$, se cumple que*

$$\langle \mathcal{L}_n[f], g \rangle = \langle f, \mathcal{L}_n[g] \rangle, \quad \forall f, g \in \mathcal{K}.$$

Una vez sorteado este escollo técnico, pasamos a demostrar la ortogonalidad de las funciones $P_l^n(x)$, $l \in \mathbb{N}_n$. Ya vimos en la sección anterior que $\mathcal{L}_n[P_l^n] = l(l+1)P_n^l$. Esto nos da inmediatamente la ortogonalidad de las funciones asociadas a Legendre.

COROLARIO 3.10. *El conjunto $\{P_l^n(x) : l \in \mathbb{N}_n\}$ es ortogonal en $L^2((-1, 1))$.*

DEMOSTRACIÓN. Razonar exactamente igual que en la prueba de la Proposición 2.23 del capítulo anterior. \square

Para demostrar la completitud del conjunto de las funciones asociadas a Legendre veremos, como hicimos en el capítulo anterior para los polinomios de Hermite, que no existe ninguna función no nula en $L^2((-1, 1))$ ortogonal al conjunto $\{P_l^n(x) : l \in \mathbb{N}_n\}$.

PROPOSICIÓN 3.11. *Si $n \in \mathbb{N}_0$ es fijo, entonces $\{P_l^n(x) : l \in \mathbb{N}_n\}$ es una base ortogonal de $L^2((-1, 1))$.*

DEMOSTRACIÓN. Hemos visto que el anterior es un sistema ortogonal, luego sólo falta ver que es completo.

Por el teorema de Weierstrass, el sistema $\text{span}\{x^k\}_{k \geq 0}$ es denso en $L^2(-1, 1)$, luego una función ortogonal a todos los monomios x^k en $L^2((-1, 1))$ sólo puede ser la función nula (ver Apéndice 3).

Sea

$$f \in L^2((-1, 1)) : f \perp P_l^n, \quad \forall l \geq n.$$

Como $\partial^n [P_l^0(x)]$ es un polinomio de grado $l - n = N \in \{0, 1, 2, \dots\}$ (porque $l \geq n$) entonces si $f \in L^2((-1, 1))$ es una función cualquiera, por la linealidad de la integral se cumple que:

$$\begin{aligned} \langle f, P_l^n \rangle &= \int_{-1}^1 f(x) (1-x^2)^{\frac{n}{2}} \partial^n [P_l^0(x)] dx = 0 \quad \forall l \geq n \\ &\iff \int_{-1}^1 \left(f(x) (1-x^2)^{\frac{n}{2}} \right) x^N dx = 0 \quad \forall N \geq 0 \end{aligned}$$

pero como $f(x) \in L^2((-1, 1))$, está claro que $f(x) (1-x^2)^{\frac{n}{2}} \in L^2((-1, 1))$ (porque $(1-x^2)^n < 1 \quad \forall x \in (-1, 1)$) y por lo tanto por la completitud del sistema $\text{span}\{x^k\}_{k \geq 0}$ tiene que ser

$$f(x) (1-x^2)^{\frac{n}{2}} \equiv 0 \iff f \equiv 0,$$

y así hemos concluido que las funciones de Legendre forman un sistema completo. \square

Para terminar con la sección, vamos a calcular la norma de las funciones $P_l^n(x)$ en $L^2(-1, 1)$.

PROPOSICIÓN 3.12. Dado $n \in \mathbb{N}_0$, se tiene que

$$\|P_l^n(x)\|_2^2 = \int_{-1}^1 |P_l^n(x)|^2 dx = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+n)!}{(l-n)!}, \quad \forall l \geq n.$$

DEMOSTRACIÓN. Escribamos

$$\int_{-1}^1 |P_l^n(x)|^2 dx = I_l^n.$$

Observemos que:

$$\begin{aligned} P_l^{n+1}(x) &= (1-x^2)^{\frac{n+1}{2}} \partial^{n+1} [P_l^0(x)] = (1-x^2)^{\frac{n}{2}} (1-x^2)^{\frac{1}{2}} \partial_x \left[\frac{P_l^n(x)}{(1-x^2)^{\frac{n}{2}}} \right] \\ &= (1-x^2)^{\frac{1}{2}} (P_l^n(x))' + \frac{nx}{(1-x^2)^{\frac{1}{2}}} P_l^n(x) \end{aligned}$$

Por lo tanto, aplicando la relación anterior:

$$\begin{aligned} I_l^{n+1} &= \int_{-1}^1 |P_l^{n+1}(x)|^2 dx = \int_{-1}^1 (1-x^2) ([P_l^n(x)]')^2 dx \\ &\quad + \int_{-1}^1 \frac{n^2 x^2}{(1-x^2)} (P_l^n(x))^2 dx + \int_{-1}^1 2nx (P_l^n(x))' P_l^n(x) dx. \end{aligned}$$

Aplicando partes sobre la primera integral de la última expresión, obtenemos:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 (1-x^2) ([P_l^n(x)]')^2 dx &= \int_{-1}^1 (1-x^2) [P_l^n(x)]' [P_l^n(x)]' dx \\ &= [(1-x^2) [P_l^n(x)]' P_l^n(x)]_{-1}^1 \\ &\quad - \int_{-1}^1 P_l^n(x) \partial_x ((1-x^2) [P_l^n(x)]') dx \end{aligned}$$

donde $[(1-x^2) [P_l^n(x)]' P_l^n(x)]_{-1}^1 = 0$ claramente.

Por otro lado, aplicando partes a la última integral:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 2nx (P_l^n(x))' P_l^n(x) dx &= \int_{-1}^1 nx \partial_x \left[(P_l^n(x))^2 \right] dx \\ &= \left[nx (P_l^n(x))^2 \right]_{-1}^1 - n \int_{-1}^1 (P_l^n(x))^2 dx \end{aligned}$$

donde $\left[nx (P_l^n(x))^2 \right]_{-1}^1 = 0$ porque si $n \neq 0 \implies P_l^n(1) = P_l^n(-1) = 0$ claramente.

Ahora, observemos que como $P_l^n(x)$ cumple la ecuación (3.3.16), se tiene que:

$$\begin{aligned} \partial_x \left[(1-x^2) (P_l^n(x))' \right] &= (1-x^2) (P_l^n(x))'' - 2x (P_l^n(x))' \\ &= \left(\frac{n^2}{1-x^2} - l(l+1) \right) P_l^n(x) \end{aligned}$$

Sustituyendo todo esto en la integral, obtenemos la siguiente relación:

$$\begin{aligned} I_l^{n+1} &= \int_{-1}^1 (P_l^n(x))^2 \left[-\frac{n^2}{1-x^2} + l(l+1) + \frac{n^2 x^2}{1-x^2} - n \right] dx \\ &= (-n^2 + l(l+1) - n) I_l^n = (l-n)(l+n+1) I_l^n. \end{aligned}$$

Si ahora iteramos esta relación sobre n :

$$I_l^n = \frac{1}{(l-n)(l+n+1)} I_l^{n+1} = \prod_{j=1}^{l-n} \frac{1}{(l-n-j+1)(l+n+j)} I_l^l = \frac{(l+n)!}{(l-n)!(2l)!} I_l^l.$$

Por lo tanto nos limitamos a calcular la integral $\int_{-1}^1 (P_l^l(x))^2 dx = I_l^l$.

Es inmediato comprobar que $P_l^l(x) = (1-x^2)^{\frac{l}{2}} \frac{(2l)!}{2^l l!}$, luego como

$$\int_{-1}^1 (1-x^2)^l dx = \frac{2^{l+1} 2^l (l!)^2}{(2l+1)!} \quad (\text{ver Apéndice 5})$$

entonces

$$I_l^n = \frac{(l+n)!}{(l-n)!(2l)!} \left[\frac{(2l)!}{2^l l!} \right]^2 \frac{2^{2l+1} (l!)^2}{(2l+1)!} = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+n)!}{(l-n)!}$$

y el resultado queda probado. \square

5. Autovalores del operador laplaciano en la esfera

Recapitulando, nuestro objetivo era calcular los autovalores y autofunciones del operador laplaciano en la esfera, es decir, todos los valores $\mu \in \mathbb{R}$ y todas las funciones $Y \in L^2(\mathbb{S}^2)$ tales que

$$-\Delta_{\mathbb{S}^2} [Y] = \mu Y.$$

Lo que hemos hecho ha sido restringirnos a buscar funciones que además estuviesen en $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{S}^2)$, separar variables y obtener las dos E.D.O.s (3.2.7) y (3.2.8).

De (3.2.7) hemos encontrado una solución

$$\Theta(\theta) = e^{im\theta}$$

para cada $\delta = m^2$ (con $m \in \mathbb{Z}$), y para cada m hemos encontrado una solución de (3.2.8)

$$\Phi(\phi) = P_l^{|m|}(\cos \phi)$$

cuando $\mu = l(l+1)$ con $l \in \mathbb{N}_0$.

Vamos a ver cómo a partir de aquí podemos lograr nuestro objetivo original, es decir, encontrar todos los autovalores y autofunciones del operador laplaciano en la esfera.

Primero, observemos que hemos visto que $\{e^{im\theta}\}_{m \in \mathbb{Z}}$ y $\{P_l^{|m|}(x)\}_{l \geq |m|}$ son autofunciones de los operadores ∂_θ^2 y \mathcal{L}_m respectivamente (recordemos que era $x = \cos \phi$).

Ahora, ¿son estos todos los autovalores admisibles de estos operadores? La respuesta es afirmativa, y la clave para verlo es que los conjuntos de autofunciones anteriores forman bases ortogonales.

PROPOSICIÓN 3.13. *Sea \mathcal{T} un operador lineal definido sobre algún subespacio denso \mathcal{D} de un espacio de Hilbert \mathbb{H} . Sea $I \subset \mathbb{Z}$ y sea $\{f_n\}_{n \in I} \subset \mathcal{D}$ una base ortogonal de \mathbb{H} formada por autovectores de \mathcal{T} con valores propios asociados $\{\mu_n\}_{n \in I} \subset \mathbb{R}$, y supongamos que el operador \mathcal{T} cumple la siguiente propiedad:*

$$\langle \mathcal{T}[f], g \rangle = \langle f, \mathcal{T}[g] \rangle, \quad \forall f, g \in \mathcal{D}.$$

Entonces el espectro puntual de \mathcal{T} es $\sigma_p(\mathcal{T}) = \{\mu_n\}_{n \in I}$, y si $g \in \mathbb{H}$ es autovector de \mathcal{T} con valor propio $\mu \in \sigma_p(\mathcal{T})$ entonces es combinación lineal de los f_n tales que $\mu_n = \mu$.

DEMOSTRACIÓN. Supongamos, por reducción al absurdo, que existe $\lambda \in \sigma_p(\mathcal{T})$ tal que $\lambda \notin \{\mu_n : n \in I\}$. Entonces existe $g \in \mathcal{D}$ no nulo tal que $\mathcal{T}g = \lambda g$. Pero entonces

$$\lambda \langle g, f_m \rangle = \langle \mathcal{T}[g], f_m \rangle = \langle g, \mathcal{T}[f_m] \rangle = \mu_m \langle g, f_m \rangle,$$

de donde sigue que

$$(\lambda - \mu_m) \langle g, f_m \rangle = 0, \quad \forall m \in I,$$

y como $\text{span}\{f_n\}_{n \in I}$ es un conjunto denso en \mathbb{H} tiene que ser $g \equiv 0$ (ver Proposición 5.30 del Apéndice 4). Obtenemos así una contradicción, pues g era no nulo.

Sea ahora $f \in \mathcal{D}$ autovector de valor propio $\mu \in \{\mu_n : n \in I\}$. Entonces $\mu = \mu_m$ para algún $m \in I$. Como $\{f_n\}_{n \in I}$ es B.O.G. de \mathbb{H} , existe una sucesión de coeficientes $a_n \in \mathbb{C}$ tal que $f = \sum_{n \in I} a_n f_n$. Por lo tanto, si $k \in I$ es tal que $k \neq m$ y $\langle f_k, f_k \rangle = \alpha > 0$ razonando como antes se cumple que

$$\begin{aligned} \mu_m a_k &= \frac{1}{\alpha} \left\langle \mu_m \sum_{n \in I} a_n f_n, f_k \right\rangle = \frac{1}{\alpha} \langle \mathcal{T}[f], f_k \rangle = \frac{1}{\alpha} \langle f, \mathcal{T}[f_k] \rangle \\ &= \mu_k \frac{1}{\alpha} \langle f, f_k \rangle = \mu_k \frac{1}{\alpha} \left\langle \sum_{n \in I} a_n f_n, f_k \right\rangle = \mu_k a_k \end{aligned}$$

y por lo tanto $(\mu_m - \mu_k)a_k = 0$, luego si $\mu_m \neq \mu_k$ tiene que ser $a_k = 0$ y así $f = \sum_{\{n: \mu_n = \mu\}} a_n f_n$. \square

Ahora, sabemos que $\{e^{im\theta}\}_{m \in \mathbb{Z}}$ es una base ortogonal de $L^2((0, 2\pi))$ y hemos visto que, para cada $m \in \mathbb{Z}$, el sistema $\{P_l^{|m|}(x)\}_{l \geq |m|}$ es una base ortogonal de $L^2((-1, 1))$. Por lo tanto, a partir de la proposición anterior el resultado siguiente es inmediato:

COROLARIO 3.14. *La E.D.O. con condiciones iniciales*

$$\begin{cases} \Theta'' = -\delta \Theta \\ \Theta(0) = \Theta(2\pi), \quad \Theta'(0) = \Theta'(2\pi) \end{cases}$$

tiene solución analítica 2π -periódica si, y sólo si $\delta = m^2$ con $m \in \mathbb{Z}$, y en ese caso las soluciones $\Theta(\theta)$ son combinaciones lineales de $e^{\pm im\theta}$.

Además, fijo $m \in \mathbb{Z}$ la ecuación

$$\begin{cases} \Phi'' + \frac{\cos \phi}{\sin \phi} \Phi' + \mu \Phi = \frac{m^2}{\sin^2 \phi} \Phi \\ \exists \Phi(0^+), \Phi(\pi^-), \\ \Phi \in L^2((0, \pi), \sin \phi d\phi) \end{cases}$$

tiene solución analítica en $(0, \pi)$ (tal que $\tilde{\Phi} \in \mathcal{K}$), si y sólo si $\mu = l(l+1)$ con $l \in \mathbb{N}_{|m|}$, y en ese caso la única solución $\Phi(\phi)$ es un múltiplo $P_l^{|m|}(\cos \phi)$.

Hemos terminado así con el estudio espectral de los operadores diferenciales ∂_θ^2 y $\mathcal{L}'_m = \partial_\phi^2 + \frac{\cos \phi}{\sin \phi} \partial_\phi - \frac{m^2}{\sin^2 \phi}$, pero el estudio del operador laplaciano $-\Delta_{\mathbb{S}^2}$ no tiene por qué ser concluyente.

En efecto, con el corolario anterior lo que tenemos determinado son todas las autofunciones de $-\Delta_{\mathbb{S}^2}$ que se pueden escribir de la forma $Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$, es decir, que tienen variables separadas. Sin embargo, en principio no podemos asegurar que no nos estemos dejando algún $\mu \in \mathbb{R}$ y alguna $Y \in L^2(\mathbb{S}^2) \cap C^\infty(\mathbb{S}^2)$ tal que $-\Delta_{\mathbb{S}^2}Y = \mu Y$.

Con el siguiente resultado es fácil ver que en realidad sí que tenemos determinados todos los autovalores y autofunciones de $-\Delta_{\mathbb{S}^2}$.

PROPOSICIÓN 3.15. *Sean I_1 e I_2 intervalos cerrados de \mathbb{R} . Sea $B = \{e_m\}_{m \in \mathbb{Z}}$ una base ortonormal de $L^2(I_1)$ y para cada $m \in \mathbb{Z}$ sea $B_m = \{f_l^m\}_{l \in \mathbb{N}_{|m|}}$ una base ortonormal de $L^2(I_2)$.*

Entonces $\{e_m \otimes f_l^m : m \in \mathbb{Z}, l \in \mathbb{N}_{|m|}\}$ es una base ortonormal de $L^2(I_1 \times I_2)$.

Para la prueba de esta proposición, vamos a necesitar el siguiente resultado clásico sobre las bases en los espacios de Hilbert:

LEMA 3.16. *Sea $I \subset \mathbb{Z}$ y $\{v_n\}_{n \in I}$ un conjunto ortonormal en un espacio de Hilbert \mathbb{H} con la propiedad de que para cada $x \in \mathbb{H}$ se cumple que*

$$(3.5.21) \quad \|x\|^2 = \sum_{n \in I} |\langle x, v_n \rangle|^2.$$

Entonces $\{v_n\}_{n \in I}$ es una base ortonormal de \mathbb{H} .

DEMOSTRACIÓN. Ver [6, Theorem 5.27, pág 175]. □

DEMOSTRACIÓN PROPOSICIÓN 3.15. Denotamos con el sufijo 1 a la norma y el producto escalar de $L^2(I_1)$, y análogamente con el sufijo 2 a la norma y el producto de $L^2(I_2)$. Si la norma o el producto escalar lo escribimos sin sufijo, nos estamos refiriendo al de $L^2(I_1 \times I_2)$.

Dada $g(x, y) \in L^2(I_1 \times I_2)$ vamos a probar equivalentemente que se cumple la identidad de Parseval (la fórmula (3.5.21) en el lema anterior). Es decir, vamos a ver que la siguiente igualdad es cierta:

$$\begin{aligned} \|g\|^2 &= \sum_{m \in \mathbb{Z}} \sum_{l \in \mathbb{N}_{|m|}} |\langle e_m \otimes f_l^m, g \rangle|^2 \iff \\ &= \sum_{m \in \mathbb{Z}} \sum_{l \in \mathbb{N}_{|m|}} \left| \int_{I_2} \int_{I_1} \overline{g(x, y)} e_m(x) f_l^m(y) dx dy \right|^2 \end{aligned}$$

Para ello, notemos que como $g(x, y) \in L^2(I_1 \times I_2)$ por el teorema de Fubini (ver [6, pág 67]) se tiene que, para casi todo $y \in I_2$,

$$g_y(x) := g(x, y) \in L^2(I_1).$$

Por lo tanto, como $B \subset L^2(I_1)$ es base ortonormal se cumple:

$$\begin{aligned} \int_{I_1} |g(x, y)|^2 dx &= \|g_y(x)\|_1^2 = \sum_{m \in \mathbb{Z}} |\langle e_m, g_y \rangle_1|^2 = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \left| \int_{I_1} \overline{g(x, y)} e_m(x) dx \right|^2 \\ &= \sum_{m \in \mathbb{Z}} |g_m(y)|^2, \end{aligned}$$

donde hemos escrito

$$g_m(y) := \int_{I_1} \overline{g(x, y)} e_m(x) dx, \quad \forall m \in \mathbb{Z}.$$

Ahora, observemos que $F(y) = \int_{I_1} |g(x, y)|^2 dx$ es una función no negativa que además es integrable en $L^1(I_2)$ por el teorema de Fubini. Por la anterior igualdad se tiene que

$$F_N(y) := \sum_{m=-N}^N |g_m(y)|^2$$

es una sucesión creciente de funciones medibles no negativas que converge a $F(y)$. Por lo tanto, aplicando el teorema de la convergencia monótona (ver [6, pág 50]) obtenemos que

$$\int_{I_2} \int_{I_1} |g(x, y)|^2 dx dy = \int_{I_2} F(y) dy = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{I_2} F_N(y) dy = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{m=-N}^N \int_{I_2} |g_m(y)|^2 dy$$

Ahora, observemos que $g_m(y) \in L^2(I_2)$ para cada $m \in \mathbb{Z}$. Esto se sigue de la desigualdad de Cauchy-Schwarz en $L^2(I_1)$, pues:

$$\begin{aligned} \left| \int_{I_1} \overline{g(x, y)} e_m(x) dx \right|^2 &\leq \left(\int_{I_1} |g(x, y)|^2 dx \right) = F(y) \implies \\ \implies \int_{I_2} \left| \int_{I_1} \overline{g(x, y)} e_m(x) dx \right|^2 dy &\leq \int_{I_2} F(y) dy = \|g\|^2 < +\infty. \end{aligned}$$

Por lo tanto, como $B_m \subset L^2(I_2)$ es una base ortonormal para cada $m \in \mathbb{Z}$, obtenemos el resultado deseado:

$$\begin{aligned} \int_{I_2} \int_{I_1} |g(x, y)|^2 dx dy &= \sum_{m \in \mathbb{Z}} \int_{I_2} |g_m(y)|^2 dy = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \|g_m\|_2^2 = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \sum_{l \in \mathbb{N}_{|m|}} |\langle f_l^m, g_m \rangle_2|^2 \\ &= \sum_{m \in \mathbb{Z}} \sum_{l \in \mathbb{N}_{|m|}} \left| \int_{I_2} \overline{g_m(y)} f_l^m(y) dy \right|^2 \\ &= \sum_{m \in \mathbb{Z}} \sum_{l \in \mathbb{N}_{|m|}} \left| \int_{I_2} \left(\int_{I_1} \overline{g(x, y)} e_m(x) dx \right) f_l^m(y) dy \right|^2 \end{aligned}$$

□

Con este último resultado y todo el trabajo anterior, ya podemos decir que hemos encontrado todos los autovalores con autofunciones en $L^2(\mathbb{S}^2)$ del operador laplaciano en la esfera. Condensamos todos nuestros hallazgos en el siguiente teorema, que cierra el capítulo:

TEOREMA 3.17. *La E.D.P. con condición de contorno*

$$-\Delta_{\mathbb{S}^2}[Y] = \mu Y \quad y \quad Y \in C^\infty(\mathbb{S}^2)$$

tiene soluciones no nulas $Y(\theta, \phi)$ si, y sólo si $\mu = l(l+1)$ para algún $l \in \mathbb{N}_0$. En ese caso, hay $2l+1$ soluciones linealmente independientes dadas por el conjunto

$$\left\{ Y_{l,m}(\theta, \phi) = e^{im\theta} P_l^{|m|}(\cos \phi) : m \in \{-l, \dots, l\} \right\},$$

y estas son las únicas soluciones en $L^2(\mathbb{S}^2)$ para cada $l \in \mathbb{N}_0$.

DEMOSTRACIÓN. Por la Proposición 3.12 (que nos daba las normas de las funciones asociadas a Legendre) y por la Proposición 3.15 tenemos que

$$\begin{aligned} &\left\{ \left(\frac{2l+1}{2} \frac{l-|m|}{l+|m|} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{e^{im\theta}}{\sqrt{2\pi}} P_l^{|m|}(x) : m \in \mathbb{Z}, l \geq |m| \right\} = \\ &\left\{ \left(\frac{2(N+|m|)+1}{2} \frac{N}{N+2|m|} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{e^{im\theta}}{\sqrt{2\pi}} P_{N+|m|}^{|m|}(x) : m \in \mathbb{Z}, N \in \mathbb{N}_0 \right\} \end{aligned}$$

es una base ortonormal de $L^2((0, 2\pi) \times (-1, 1))$, por lo tanto aplicando el cambio de variable $x = \cos \phi$ llegamos a que $\{Y_{l,m}(\theta, \phi) : m \in \mathbb{Z}, l \geq |m|\}$ es una base ortogonal de $L^2(\mathbb{S}^2)$.

Ahora, hemos visto que $e^{im\theta}$ es autofunción de ∂_θ^2 de valor propio $-m^2$ y que $P_l^{|m|}(\cos \phi)$ es autofunción de $\mathcal{L}'_m = \partial_\phi^2 + \frac{\cos \phi}{\sin \phi} \partial_\phi - \frac{m^2}{\sin^2 \phi}$ de valor propio $-l(l+1)$, luego:

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbb{S}^2}[Y(\theta, \phi)] &= \left(\partial_\phi^2 + \frac{\cos \phi}{\sin \phi} \partial_\phi + \frac{1}{\sin^2 \phi} \partial_\theta^2 \right) e^{im\theta} P_l^{|m|}(\cos \phi) \\ &= e^{im\theta} \mathcal{L}'_m P_l^{|m|}(\cos \phi) = -l(l+1)Y(\theta, \phi). \end{aligned}$$

Así, las $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ con $m \in \{-l, \dots, l\}$ son autofunciones de $-\Delta_{\mathbb{S}^2}$ de valor propio $l(l+1)$ con $l \in \mathbb{N}_0$. Por la proposición 3.13, concluimos que los anteriores son todos los valores propios admisibles de $-\Delta_{\mathbb{S}^2}$ y las $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ todas sus autofunciones en $L^2(\mathbb{S}^2)$, con lo que el resultado queda probado. \square

El átomo de hidrógeno

1. Formulación del modelo

Ya hemos mencionado que el problema de los estados de energía del átomo de hidrógeno puede plantearse como el problema de los estados de energía de una partícula sometida a una fuerza central. Vamos a ver cómo puede formularse esto. Seguimos el libro de Levine [8].

El sistema del átomo hidrogenoide consta de dos partículas: un núcleo y un electrón, separado por una cierta distancia.

Fijo un sistema de coordenadas, llamemos $\vec{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$ y $\vec{r}_2 = (x_2, y_2, z_2)$ a los vectores posición del núcleo y el electrón del átomo respectivamente.

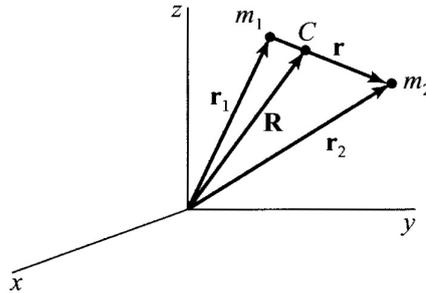
Bajo ciertas condiciones del entorno, podemos suponer que la energía potencial de interacción entre las partículas depende sólo de la distancia relativa entre las mismas, es decir, es función del vector posición relativa $\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$.

Consideremos ahora el vector que va del origen al centro de masa del sistema:

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2},$$

donde m_1 y m_2 son las masas del núcleo y el electrón respectivamente.

La interpretación de estos vectores se puede ver en el siguiente dibujo:



Intuitivamente se ve que los vectores \vec{r} y \vec{R} determinan completamente la posición del sistema en el espacio. Matemáticamente lo que hemos hecho es transformar las coordenadas de cada partícula de acuerdo a las ecuaciones vectoriales:

$$(4.1.1) \quad \vec{r}_1 = \vec{R} - \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{r} \quad \text{y} \quad \vec{r}_2 = \vec{R} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{r}.$$

Veamos cómo afecta esta transformación a la forma del Hamiltoniano del sistema. Sabemos que la energía cinética de una partícula viene dada por la fórmula

$$T = \frac{1}{2} m \|\vec{v}\|^2,$$

donde \vec{v} es la velocidad de la partícula (que recordemos se expresa como la derivada del vector posición).

Como la energía cinética de un sistema de partículas es la suma de las energías cinéticas, en nuestro caso la energía cinética total del sistema viene dado por la fórmula

$$(4.1.2) \quad T = \frac{1}{2} m_1 \|(\vec{r}'_1)\|^2 + \frac{1}{2} m_2 \|(\vec{r}'_2)\|^2$$

Ahora, como $\|(\vec{r}')_1\|^2 = \langle (\vec{r}')_1, (\vec{r}')_1 \rangle$ y $\|(\vec{r}')_2\|^2 = \langle (\vec{r}')_2, (\vec{r}')_2 \rangle$ aplicando el cambio (4.1.1) y simplificando obtenemos

$$T = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)\|\vec{R}'\|^2 + \frac{1}{2}\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\|(\vec{r}')\|^2.$$

Si llamamos $m_1 + m_2 = \mathbf{M}$ y $\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \mathbf{m}$, lo anterior se expresa como

$$(4.1.3) \quad T = \frac{1}{2}\mathbf{M}\|\vec{R}'\|^2 + \frac{1}{2}\mathbf{m}\|(\vec{r}')\|^2.$$

Si ahora $V(\vec{r})$ es la función energía potencial del sistema (recordemos que sólo depende de las posiciones relativas) la energía total del sistema viene dada por

$$H = \frac{1}{2}\mathbf{M}\|\vec{R}'\|^2 + \left(\frac{1}{2}\mathbf{m}\|(\vec{r}')\|^2 + V(\vec{r}) \right) = E_{\mathbf{M}} + E_{\mathbf{m}}.$$

Hemos interpretado la energía del sistema del átomo de hidrógeno como la suma de las energías de dos partículas no interaccionantes: una de masa \mathbf{M} sometida a un movimiento de traslación a través del espacio (el átomo completo) y otra de masa \mathbf{m} sometida a una fuerza que depende de su posición respecto a otra (el electrón respecto al núcleo).

Vamos a centrarnos en la energía del sistema relativo del átomo hidrogenoide. En la práctica se supone que el átomo se mueve libremente en el espacio, por lo que $E_{\mathbf{M}}$ puede tomar cualquier valor no negativo (ver partícula libre [8, pág 28]) y esta energía se añade como constante. Lo interesante son los valores de energía $E_{\mathbf{m}}$ del electrón respecto del núcleo del átomo, y es en este sistema en el que nos vamos a centrar.

Si Ze es la carga del núcleo del átomo hidrogenoide, se sabe que la energía potencial debida a la fuerza coulombiana entre el electrón y el núcleo del átomo tiene la forma:

$$V(r) = -\frac{2e'}{r} \quad \text{donde} \quad e' = \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon}}, \quad r = \|\vec{r}'\|.$$

La constante ϵ es una constante física que se calcula experimentalmente, y se le llama *permitividad eléctrica*, y su valor en el vacío es $8,854 \cdot 10^{-12}$. La energía total del sistema relativo del electrón respecto al núcleo del átomo tiene entonces la forma:

$$E_{\mathbf{m}} = \frac{1}{2}\mathbf{m}\|(\vec{r}')\|^2 - \frac{Z(e')^2}{r}.$$

Para calcular el Hamiltoniano mecanocuántico asociado, observemos que podemos escribir la primera expresión como $\frac{1}{2}\mathbf{m}\|(\vec{r}')\|^2 = \frac{p^2}{2\mathbf{m}}$ donde $p = \mathbf{m}\|\vec{v}'\| = \mathbf{m}\|(\vec{r}')\|$ es el momento lineal de la partícula. Sabemos que, en mecánica cuántica (por uno de sus postulados) el operador asociado al cuadrado del momento es $-\hbar^2\Delta$, luego el operador Hamiltoniano asociado al sistema relativo del átomo hidrogenoide es

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mathbf{m}}\Delta - \frac{Z(e')^2}{r}$$

y nuestro objetivo es, como siempre, calcular sus autovalores y autofunciones en algún subespacio denso adecuado.

Estudiando la ecuación de Schrödinger asociada al operador anterior, ya en el capítulo 3 planteamos una solución del tipo $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$ utilizando coordenadas esféricas, con lo que conseguimos transformar el problema anterior en el estudio de las ecuaciones (3.1.5) y (3.1.6):

$$\begin{cases} -\Delta_{\mathbb{S}^2} Y = \mu Y \\ Y \in L^2(\mathbb{S}^2) \end{cases}$$

y

$$\begin{cases} r^2 R'' + 2rR' + R \left(-\frac{V(r)}{a} r^2 + \lambda r^2 - \mu \right) = 0 \\ R \in L^2((0, +\infty), r^2 dr) \cap C([0, +\infty)). \end{cases}$$

Para la ecuación (3.1.5) determinamos que tenía solución si, y sólo si era $\mu = l(l+1)$ con $l \in \mathbb{N}_{|m|}$, y en ese caso

$$(4.1.4) \quad \left\{ \left(\frac{2l+1}{2} \frac{l-|m|}{l+|m|} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{e^{im\theta}}{\sqrt{2\pi}} P_l^{|m|}(\cos \phi) : m \in \mathbb{Z}, l \geq |m| \right\}$$

era el conjunto de soluciones (normalizadas en $L^2(\mathbb{S}^2)$) de la ecuación.

El conjunto de funciones anterior nos aporta la parte angular de las funciones de onda del átomo de hidrógeno, pero su interés trasciende el ámbito de la mecánica cuántica. Matemáticamente las funciones anteriores son importantes porque forman una base ortogonal de $L^2(\mathbb{S}^2)$ y son todas las autofunciones del operador Laplaciano en la esfera (como vimos en el capítulo anterior). En los libros se suelen presentar con la siguiente notación, que hemos utilizado antes pero que fijamos ahora:

DEFINICIÓN 4.1. *A las funciones*

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) := e^{im\theta} P_l^{|m|}(\cos \phi), \quad m \in \mathbb{Z}, l \geq |m|,$$

se les conoce generalmente como **armónicos esféricos**, y forman una base ortogonal de $L^2(\mathbb{S}^2)$.

La parte radial viene dada por la ecuación (3.1.6), en la que sustituyendo la forma explícita del potencial del átomo de hidrógeno nos queda

$$(4.1.5) \quad r^2 R'' + 2rR' + (2kr + \lambda r^2) R = l(l+1)R,$$

donde $k = \frac{\mathbf{m}Z(e')^2}{\hbar^2}$.

El estudio a partir de aquí es claro: vamos a intentar determinar para qué valores de $\lambda = \frac{2\mathbf{m}}{\hbar^2} E_{\mathbf{m}}$ la ecuación anterior tiene soluciones analíticas que vivan en $L^2((0, +\infty), r^2 dr)$, y vamos a calcular explícitamente estas soluciones.

Aparte de la condición de contorno habitual, imponemos otra condición sobre nuestras soluciones radiales: vamos a buscar soluciones $R(r)$ para las que exista el límite cuando r tiende a 0 (esto nos asegura que $R \in \mathcal{C}([0, +\infty))$ también, condición que ya mencionábamos en el capítulo anterior).

2. Resolviendo la ecuación radial

Para resolver la ecuación (3.1.6), voy seguir una línea de razonamientos proporcionados por Gustavo, mi director de T.F.G..

Tenemos aquí una E.D.O. lineal de segundo orden. Lo primero, como en los anteriores casos, es transformarla con cambios de variable hasta llegar a algo que podamos resolver más fácilmente.

Puesto que hicimos la separación de variables $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$ y hemos establecido que

$$Y \in \text{span} \{Y_{l,m} : m \in \{-l, \dots, l\}\},$$

donde $Y_{l,m}$ son los armónicos esféricos de grado l para cada $m \in \mathbb{Z}$, parece razonable escribir $R(r) = r^l u(r)$ de manera que $\psi = r^l Y u$.

A los $r^l Y_{l,m}$ se les llama **armónicos sólidos de grado l** .

Veamos cómo afecta este cambio a la E.D.O. (4.1.5). Observemos que como $r \in (0, +\infty)$, podemos multiplicar siempre la ecuación por r^{-2} .

$$\begin{aligned} (4.1.5) \quad &\iff R'' + \frac{2}{r}R' + \left(\frac{2k}{r} + \lambda\right) R = l(l+1)\frac{R}{r^2} \\ &\iff (r^l u)'' + \frac{2}{r}(r^l u)' + \left(\frac{2k}{r} + \lambda\right) r^l u = l(l+1)r^{l-2} u \\ &\iff u'' + \frac{2l+2}{r}u' + \left(\frac{2k}{r} + \lambda\right) u = 0. \end{aligned}$$

De esta manera, hemos transformado (3.1.6) en:

$$(4.2.6) \quad \begin{cases} u''(r) + \frac{2l+2}{r}u'(r) + \left(\frac{2k}{r} + \lambda\right)u(r) = 0 \\ u(r) \in L^2((0, +\infty), r^{2l+2} dr) \cap C^\infty((0, +\infty)) \\ \exists \lim_{r \rightarrow 0^+} r^l u(r) \end{cases}$$

donde $\lambda = \frac{2mE_m}{\hbar^2} \in \mathbb{R}$ es un valor que de momento está indeterminado.

Antes de continuar con el estudio de (4.2.6) es conveniente primero que acotemos el signo de λ . Recordemos que E_m es un nivel de energía admisible del sistema, es decir, es un autovalor del operador diferencial

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Z(e')^2}{r},$$

luego los valores posibles de λ dependen del espectro discreto de este operador.

Pues bien, puede demostrarse utilizando técnicas de análisis funcional que $\sigma_p(\hat{H}) \subset (-\infty, 0)$, es decir que E_m (y por tanto λ) sólo toma valores negativos.

Este resultado puede consultarse por ejemplo en [15, Corollary 10.4, pág 223]; su demostración la omitimos por salirse del alcance de este trabajo, que en esencia versa sobre la resolución de E.D.P.s y no pretende sumergirse demasiado en la rama del análisis funcional.

Suponemos a partir de ahora que $\lambda = -\mu^2 < 0$.

Ahora sí, procedemos a resolver (4.2.6). Observemos que esta vez tenemos una ecuación diferencial ligeramente diferente de las que hemos tratado hasta ahora.

Hasta este momento hemos estado resolviendo ecuaciones lineales con coeficientes analíticos en \mathbb{R} , luego siempre hemos podido limitarnos a buscar soluciones analíticas porque de hecho todas las soluciones iban a serlo.

Ahora los coeficientes de la ecuación no son analíticos en todo \mathbb{R} : presentan una singularidad en $r = 0$. Esto supone un problema para buscar soluciones porque aunque las soluciones que buscamos sólo tienen por qué ser analíticas en $(0, +\infty)$ (donde están definidas) no podemos proceder como siempre y plantear una solución en serie de potencias del tipo

$$u(r) = \sum_{n=0}^{+\infty} a_n r^n,$$

pues de esta forma estaríamos forzando que la solución fuese analítica en $r = 0$, y en principio las soluciones de (4.2.6) no tendrían por qué ni estar definidas en este punto.

Para resolver esta ecuación utilizamos el siguiente teorema, cuyo enunciado completo y demostración puede consultarse en el libro de Coddington [2, pág 190].

TEOREMA 4.2. *La ecuación diferencial lineal*

$$r^2 u(r) + ra(r)u'(r) + b(r)u(r) = 0, \quad r \in (0, +\infty),$$

con $a(r), b(r)$ funciones analíticas en \mathbb{R} , tiene dos soluciones linealmente independientes dadas explícitamente como sigue:

1. Se encuentran las raíces $\{\alpha_1, \alpha_2\} \subset \mathbb{C}$ (con $\text{Re}(\alpha_1) \geq \text{Re}(\alpha_2)$) del polinomio indicial

$$Q(r) = r(r-1) + a(0)r + b(0) = 0$$

2. Si $\alpha_1 - \alpha_2 \in \mathbb{N}$ entonces las dos soluciones de la ecuación diferencial se escriben de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} u_1(r) &= r^{\alpha_1} \sum_{n=0}^{+\infty} a_n r^n \\ u_2(r) &= r^{\alpha_2} \sum_{n=0}^{+\infty} b_n r^n + C (\log(r)) u_1(r) \end{aligned}$$

para ciertos coeficientes $(a_n)_n, (b_n)_n \in \mathbb{C}^{\mathbb{N}}$ con $a_0, b_0 \neq 0$ y cierta constante $C \in \mathbb{C}$.

En nuestro caso el polinomio indicial tiene la siguiente forma:

$$Q(r) = r(r-1) + (2l+2)r + 0 = r(r+2l+1)$$

y sus raíces son $\alpha_1 = 0$ y $\alpha_2 = -2l-1$.

Se tiene por tanto que $\alpha_1 - \alpha_2 = 2l+1 \in \mathbb{N}$, luego las soluciones de nuestra ecuación diferencial tienen la forma

$$\begin{aligned} u_1(r) &= \sum_{n=0}^{+\infty} a_n r^n \quad \text{y} \\ u_2(r) &= r^{-2l-1} \sum_{n=0}^{+\infty} b_n r^n + C (\log(r)) u_1(r). \end{aligned}$$

Como buscamos soluciones $u(r)$ tales que exista el límite $\lim_{r \rightarrow 0^+} r^l u(r)$, podemos descartar $u_2(r)$.

Por lo tanto, para encontrar todas las soluciones de (4.2.6), basta con plantear una solución en serie de potencias

$$u_1(r) := \sum_{n=0}^{+\infty} a_n r^n$$

y sustituir en la ecuación.

Antes de proceder de esta forma, intentemos primero reducir la ecuación a una que nos aporte una relación de recurrencia de dos términos como hicimos en el caso del oscilador armónico.

Estudiamos las soluciones asintóticas resolviendo la ecuación

$$u''(r) - \mu^2 u(r) = 0 \quad (\text{recordemos que forzamos } \lambda = -\mu^2 < 0),$$

de manera que obtenemos que las soluciones de (4.2.6) se comportan asintóticamente como $e^{\pm\mu r}$.

Observamos por tanto que el cambio de variable $u(r) = e^{-\mu r} g(2\mu r)$ puede ser adecuado para reducir la ecuación. Aplicándolo a (4.2.6) nos queda la E.D.O.

$$g''(2\mu r) + \left[-1 + \frac{2l+2}{2\mu r} \right] g'(2\mu r) + \left[-\frac{2l+2}{4\mu r} + \frac{2k}{4\mu^2 r} \right] g(2\mu r) = 0.$$

Si ahora realizamos el cambio de escala $s = 2\mu r$ la ecuación se simplifica aún más (de ahí el elegir $g(2\mu r)$ en vez de $g(r)$ en el cambio de variable de antes):

$$\begin{aligned} g''(s) + \left[-1 + \frac{2l+2}{s} \right] g'(s) + \frac{1}{s} \left[\frac{k}{\mu} - (l+1) \right] g(s) &= 0 \implies \\ sg''(s) + (2l+2-s)g'(s) + \left(\frac{k}{\mu} - (l+1) \right) g(s) &= 0. \end{aligned}$$

Si ahora escribimos $\alpha = 2l+1$ y $N = \frac{k}{\mu} - (l+1)$ entonces obtenemos la ecuación

$$(4.2.7) \quad sg''(s) + (\alpha + 1 - s)g'(s) + Ng(s) = 0,$$

que se conoce en la literatura como la **ecuación de Laguerre generalizada** (ver [14, pág 100]).

Se sabe que (4.2.7) tiene soluciones polinómicas cuando $N \in \mathbb{N}$, es decir, cuando $\mu = \frac{k}{N+l+1}$ con $N \in \mathbb{N}$. Vamos a estudiar este caso.

Planteamos una solución analítica

$$g(s) := \sum_{n=0}^{\infty} a_n s^n$$

y sustituimos en la ecuación:

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n(n-1)a_n s^{n-1} - na_n(\alpha+1)s^{n-1} - na_n s^n + Na_n s^n) = 0 \iff$$

$$n(n+1)a_{n+1} + (n+1)(\alpha+1)a_{n+1} - na_n + Na_n = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N} \iff$$

$$(4.2.8) \quad a_{n+1} = \frac{n-N}{(n+1)(n+\alpha+1)} a_n.$$

Ahora, como $N \in \mathbb{N}$, para $n \geq N$ va a ser $a_{n+1} = 0$ claramente.

Así, $g(s)$ va a ser un polinomio, del cuál podemos dar su forma explícita fácilmente sin más que iterando la relación de recurrencia encontrada:

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{(n-1-N)(n-2-N)\dots(-N)}{n!(n+\alpha)(n-1+\alpha)\dots(1+\alpha)} a_0 \\ &= (-1)^n \frac{N!}{(N-n)!n!} \frac{\alpha!}{(n+\alpha)!} a_0 \\ &= \frac{1}{\binom{N+\alpha}{N}} \frac{(-1)^n}{n!} \binom{N+\alpha}{N-n} a_0. \end{aligned}$$

Si fijamos $a_0 = 1$, hemos obtenido los siguientes polinomios:

DEFINICIÓN 4.3. *Dados $\alpha, N \in \mathbb{N}$, definimos los **polinomios de Laguerre generalizados** de orden α y grado N por la fórmula*

$$(4.2.9) \quad L_N^\alpha(s) := \sum_{n=0}^N \binom{N+\alpha}{N-n} \frac{(-s)^n}{n!}.$$

PROPOSICIÓN 4.4. *La E.D.O. de Laguerre*

$$sg''(s) + (\alpha+1-s)g'(s) + Ng(s) = 0 \quad \alpha, N \in \mathbb{N}$$

tiene como solución analítica a la función

$$g(s) = \frac{1}{\binom{N+\alpha}{N}} L_N^\alpha(s).$$

Hemos resuelto así (4.2.7) en el caso concreto en el que $\mu = \frac{k}{N+l+1}$ con $N \in \mathbb{N}$, pero en principio $\mu \in \mathbb{R}$ podía tomar cualquier valor.

Para $N \notin \mathbb{N}$ la relación (4.2.8) nos aporta coeficientes no nulos para cada n . Se tiene entonces que $g(s) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n s^n$ es una serie de potencias, y en este caso vamos a ver que $u(r) = e^{-\mu r} g(2\mu r)$ no está en $L^2((0, +\infty), r^{2l+2} dr)$.

Procedemos como en el caso de Hermite: se puede comprobar fácilmente que existe $n_\epsilon \in \mathbb{N}$ tal que

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} = \frac{n-N}{(n+1)(n+\alpha+1)} > \frac{1-\epsilon}{n+1} = \frac{(1-\epsilon)^{n+1}}{(n+1)!} \frac{n!}{(1-\epsilon)^n}, \quad \forall n \geq n_\epsilon,$$

luego como además se tiene claramente que $\text{sign}(a_{n+1}) = \text{sign}(a_n)$ para todo $n > N$ entonces podemos aplicar el lema 2.2 del Capítulo 2 y obtener que existe un cierto polinomio $P_{n_\epsilon}(s)$ y una cierta constante $C > 0$ tal que se cumple la desigualdad de Lawden:

$$\begin{aligned} g(s) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n s^n &\geq P_{n_\epsilon}(s) + C \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1-\epsilon)^n}{n!} s^n \\ &\geq P_{n_\epsilon}(s) + C e^{(1-\epsilon)s} \\ &> \frac{C}{2} e^{(1-\epsilon)s} \quad \text{si } s \geq s_0, \end{aligned}$$

donde $s_0 > 0$ es tal que

$$|P_{n_\epsilon}(s)| < \frac{C}{2} e^{(1-\epsilon)s} \quad \forall s > s_0.$$

De esta forma, se tiene que

$$|u(r)| = |e^{-\mu r} g(2\mu r)| > \frac{C}{2} e^{(1-2\epsilon)\mu r} \quad \forall r > r_0 = \frac{s_0}{2\mu}.$$

A partir de esta desigualdad, el resultado es inmediato, pues podemos tomar $\epsilon \leq \frac{1}{2}$ de manera que:

$$\int_0^{+\infty} |u(r)|^2 r^{2l+2} dr > \frac{C}{2} \int_{r_0}^{+\infty} e^{(1-2\epsilon)2\mu r} r^{2l+2} dr = +\infty.$$

Concluimos que si $\mu \neq \frac{k}{N+l+1}$ para algún $N \in \mathbb{N}$ entonces la E.D.O. con condiciones iniciales (4.2.6) no tiene solución, con lo que hemos terminado con el estudio de la ecuación y damos por demostrado el siguiente teorema, con el que concluimos la sección:

TEOREMA 4.5. Sean $k > 0$ y $l \in \mathbb{N}_0$ fijos. Para $\lambda = -\mu^2 < 0$, la E.D.O.

$$r^2 R'' + 2r R' + (2kr + \lambda r^2) R = l(l+1)R$$

tiene soluciones analíticas definidas en $(0, +\infty)$ tales que

$$\int_0^{+\infty} |R(r)|^2 r^2 dr < +\infty \quad \text{y} \quad \exists R(0^+)$$

si, y sólo si

$$\lambda = -\frac{k^2}{(n+l+1)^2}, \quad \text{con } n \in \mathbb{N}_0.$$

En ese caso, las únicas soluciones con las propiedades anteriores están generadas por la función

$$R_n^l(r) := r^l e^{-\frac{kr}{n+l+1}} L_n^{2l+1} \left(\frac{2kr}{n+l+1} \right)$$

donde L_n^{2l+1} es el polinomio de Laguerre generalizado de orden $2l+1$ y grado n .

3. Orbitales hidrogenoides

Nuestro objetivo inicial era calcular los estados de energía admisibles y las funciones de onda del modelo relativo del átomo hidrógeno. Separando variables, hemos obtenido un conjunto de autofunciones del operador hamiltoniano asociado:

DEFINICIÓN 4.6. Llamamos **orbitales hidrogenoides** a las funciones

$$(4.3.10) \quad \psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) := c_{n,l,m} e^{-\frac{kr}{n+l+1}} L_{n-l}^{2l+1} \left(\frac{2kr}{n+l+1} \right) r^l Y_{l,m}(\theta, \phi),$$

con $l, n \in \mathbb{N}_0$ y $n \geq l$, $m \in \{-l, \dots, l\}$ y donde $c_{n,l,m}$ es la constante de normalización de cada función en $L^2((0, +\infty) \times (0, 2\pi) \times (0, \pi), r^2 \sin \phi dr d\theta d\phi)$

Con todo el trabajo que llevamos hecho, es muy sencillo comprobar que las anteriores son soluciones de la ecuación de Schrödinger del átomo de hidrógeno (en coordenadas esféricas).

PROPOSICIÓN 4.7. Para cada $n, l \in \mathbb{N}_0$ y $m \in \{-l, \dots, l\}$, el orbital hidrogenoide $\psi_{n,l,m}$ es autofunción del operador hamiltoniano

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{Z(e')^2}{r},$$

de valor propio

$$E_m = -\frac{mZ^2(e')^4}{\hbar^2 2(n+1)^2}.$$

DEMOSTRACIÓN. Se sigue directamente de la secciones anteriores que $\psi_{n,l,m}$ es autofunción de $\frac{1}{a} \hat{H}$ de valor propio $\lambda = -\frac{k^2}{(n+1)^2}$, donde recordemos que eran $a = \frac{\hbar^2}{2m}$ y $k = \frac{mZ(e')^2}{\hbar^2}$.

De aquí se obtiene el resultado. \square

Los orbitales hidrogenoides, por lo tanto, son funciones de onda de ciertos estados del modelo del átomo de hidrógeno mecanocuántico.

Nos falta calcular el valor explícito de los coeficientes de normalización $c_{n,l,m}$ de las funciones de onda $\psi_{n,l,m}$ para obtener la fórmula completa. Al tener estas funciones las variables separadas, sólo tenemos que centrarnos en la parte radial (ya tenemos calculadas las normas de los armónicos esféricos).

Para calcular las normas de la parte radial de los orbitales, necesitamos aprovechar algunas propiedades de los polinomios generalizados de Laguerre. En particular, vamos a necesitar dos lemas, que damos sin demostración pero junto con una referencia en la que poder consultarlos.

El primero de ellos es una propiedad que se utiliza en algunos libros para definir a los polinomios de Laguerre. Esto es lo que se hace por ejemplo en el libro de Szëgo [14], en el que se definen los polinomios de Laguerre como la familia de polinomios con las siguientes condiciones de normalización y ortogonalidad:

LEMA 4.8.

$$\int_0^{+\infty} s^\alpha e^{-s} L_{n_1}^{(\alpha)}(s) L_{n_2}^{(\alpha)}(s) ds = \Gamma(\alpha + 1) \binom{n_1 + \alpha}{n_1} \delta_{n_1 n_2},$$

donde $\delta_{n_1 n_2}$ es una **delta de Kronecker** (vale 0 si n_1 y n_2 son naturales distintos y vale 1 si son iguales).

DEMOSTRACIÓN. Ver [14, pág 100]. \square

La función Γ se define en el Apéndice 5. Por otro lado, el siguiente resultado también puede consultarse en el libro de Szëgo:

LEMA 4.9.

$$sL_n^{(\alpha)}(s) = -(n+1)L_{n+1}^{(\alpha)}(s) + (\alpha + 2n + 1)L_n^{(\alpha)}(s) - (\alpha + n)L_{n-1}^{(\alpha)}(s).$$

DEMOSTRACIÓN. Ver (5.1.10) en [14, pág 101]. \square

Ahora sí, calculamos la norma de los orbitales hidrogenoides.

PROPOSICIÓN 4.10.

$$\|\psi_{n,l,m}\|_2 = \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{l+|m|}{(2l+1)(l-|m|)}} \frac{(n+1)^{l+2}}{2^l k^{l+\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{(n+l+1)!}{(n-l)!}}$$

DEMOSTRACIÓN. Como ya tenemos calculada la norma de los armónicos esféricos, el cálculo de la integral del enunciado se reduce al de la parte radial:

$$\begin{aligned}
\|\psi_{n,l,m}\|_2^2 &= \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi e^{-\frac{2kr}{n+1}} \left| L_{n-l}^{(2l+1)} \left(\frac{2kr}{n+1} \right) \right|^2 r^{2l+2} |Y_{l,m}(\theta, \phi)|^2 \sin(\phi)^2 dr d\theta d\phi \\
&= \int_0^{+\infty} e^{-\frac{2kr}{n+1}} \left| L_{n-l}^{(2l+1)} \left(\frac{2kr}{n+1} \right) \right|^2 r^{2l+2} \left(\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y_{l,m}(\theta, \phi)|^2 \sin(\phi)^2 d\theta d\phi \right) dr \\
&= \int_0^{+\infty} e^{-\frac{2kr}{n+1}} \left| L_{n-l}^{(2l+1)} \left(\frac{2kr}{n+1} \right) \right|^2 r^{2l+2} 2\pi \frac{2}{2l+1} \frac{l+|m|}{l-|m|} dr \\
&= 2\pi \frac{2}{2l+1} \frac{l+|m|}{l-|m|} \int_0^{+\infty} e^{-s} \left| L_{n-l}^{(2l+1)}(s) \right|^2 s^{2l+2} \left(\frac{n+1}{2k} \right)^{2l+3} ds,
\end{aligned}$$

donde hemos aplicado el cambio de variable $s = \frac{2kr}{n+1}$. Si ahora escribimos $2l+1 = \alpha$ y $n-l = N$, podemos centrarnos en calcular:

$$I_N^\alpha := \int_0^{+\infty} e^{-s} \left| L_N^{(\alpha)}(s) \right|^2 s^{\alpha+1} ds.$$

Utilizando los lemas anteriores de recurrencia y ortogonalidad, podemos llegar al resultado deseado muy fácilmente:

$$\begin{aligned}
I_N^\alpha &= \int_0^{+\infty} s^\alpha e^{-s} L_N^{(\alpha)}(s) \left[-(N+1)L_{N+1}^{(\alpha)}(s) + (\alpha+2N+1)L_N^{(\alpha)}(s) - (\alpha+N)L_{N-1}^{(\alpha)}(s) \right] ds \\
&= (\alpha+2N+1) \int_0^{+\infty} s^\alpha e^{-s} \left| L_N^{(\alpha)}(s) \right|^2 ds \\
&= (\alpha+2N+1)\Gamma(\alpha+1) \binom{N+\alpha}{N}.
\end{aligned}$$

Ahora, como $\Gamma(\alpha+1) = \alpha! = (2l+1)!$, concluimos el resultado:

$$\begin{aligned}
\|\psi_{n,l,m}\|_2^2 &= 2\pi \frac{2}{2l+1} \frac{l+|m|}{l-|m|} \left(\frac{n+1}{2k} \right)^{2l+3} I_{n-l}^{2l+1} \\
&= \pi \frac{l+|m|}{(2l+1)(l-|m|)} \frac{(n+1)^{2l+4} (n+l+1)!}{2^{2l} k^{2l+3} (n-l)!}.
\end{aligned}$$

□

Esto termina por proporcionarnos las funciones de onda del modelo del átomo de hidrógeno que pueden calcularse por separación de variables, pues se tiene que $c_{n,l,m} = \frac{1}{\|\psi_{n,l,m}\|_2}$. Concluimos el capítulo reuniendo nuestros hallazgos en el siguiente teorema:

TEOREMA 4.11. *En el modelo relativo del átomo de hidrógeno, las funciones*

$$\sqrt{\frac{l+|m|}{\pi(2l+1)(l-|m|)}} \frac{(n+1)^{l+2}}{2^l k^{l+\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{(n+l+1)!}{(n-l)!}} \psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)$$

son funciones de onda con estado de energía asociado

$$E_m = -\frac{mZ^2(e')^4}{\hbar^2 2(n+1)^2}$$

para cada $l \in \mathbb{N}_0$ y $m \in \{-l, \dots, l\}$, y además son las únicas funciones de onda del modelo que tienen las variables separadas.

Apéndices

1. Algunos resultados auxiliares

Introducimos en este apéndice algunos resultados vistos en los cursos de Análisis Real y Análisis Complejo en la carrera de Matemáticas de la Universidad de Murcia, así como un resultado sobre ecuaciones diferenciales ordinarias que hemos ido utilizando a lo largo del trabajo pero que no hemos podido enunciar completamente por falta de espacio.

Comenzamos con los teoremas relativos a la diferenciación e integración de funciones reales. Para estudiar la mayoría de resultados técnicos que tienen que ver con el análisis real hemos usado sobre todo el libro de Folland [6].

TEOREMA 5.1 (Teorema de la Convergencia Monótona). *Si $\{f_n\}_{n \geq 0}$ es una sucesión de funciones medibles no negativas tal que*

$$f_j \leq f_{j+1}, \quad \forall j \quad \text{y} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} f_n = f,$$

entonces

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int f_n dx = \int f dx$$

DEMOSTRACIÓN. Ver [6, Theorem 2.14 pág 50]. □

TEOREMA 5.2 (Teorema de la Convergencia Dominada). *Sea $I \subseteq \mathbb{R}^d$ y $\{f_n\}_{n \geq 0}$ una sucesión de funciones en $L^1(I)$ tal que*

1. $f_n \rightarrow f$ en casi todo punto y
2. existe una cierta función no negativa $g \in L^1(I)$ tal que $|f_n| \leq g$ en casi todo punto para cada $n \geq 0$.

Entonces $f \in L^1(I)$ y se cumple que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_I f_n dx = \int_I f dx.$$

DEMOSTRACIÓN. Ver [6, Theorem 2.24 pág 54]. □

TEOREMA 5.3 (Teorema de Fubini). *Sean $A \subseteq \mathbb{R}^n$ y $B \subseteq \mathbb{R}^m$ abiertos, y sea $f : A \times B \rightarrow \mathbb{C}$ medible. Entonces, si existe alguna de las integrales iteradas*

$$\int_A \left(\int_B |f(x, y)| dy \right) dx < +\infty \quad \text{ó} \quad \int_B \left(\int_A |f(x, y)| dx \right) dy < +\infty,$$

se tiene que $f \in L^1(A \times B)$ y se cumple que

$$\begin{aligned} \int_{A \times B} f dx dy &= \int_A \left(\int_B f(x, y) dy \right) dx \\ &= \int_B \left(\int_A f(x, y) dx \right) dy. \end{aligned}$$

DEMOSTRACIÓN. Ver [6, Theorem 2.39 pág 68]. □

TEOREMA 5.4 (Derivación Bajo el Signo Integral). *Sean $(a, b) \subseteq \mathbb{R}$ y $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ abierto, y sea $f : (a, b) \times \Omega \rightarrow \mathbb{C}$. Definimos*

$$F(t) := \int_{\Omega} f(t, x) dx, \quad \forall t \in (a, b).$$

Supongamos que

1. $f(t, \cdot) \in L^1(\Omega)$, $\forall t \in (a, b)$.
2. $f(\cdot, x)$ es derivable en (a, b) para cada $x \in \Omega$.
3. $\exists h \in L^1(\Omega) : \left| \frac{\partial f}{\partial t}(t, x) \right| \leq h(x)$, $\forall x \in \Omega, \forall t \in (a, b)$.

Entonces, F es derivable en (a, b) y

$$F'(t) = \partial_t \left[\int_{\Omega} f(t, x) dx \right] = \int_{\Omega} \frac{\partial f}{\partial t}(t, x) dx, \quad \forall t \in (a, b).$$

DEMOSTRACIÓN. Ver [6, Theorem 2.27 pág 56]. \square

TEOREMA 5.5 (Teorema del Cambio de Variable). Sea T una transformación lineal biyectiva en \mathbb{R}^d .

1. Si f es una función medible en \mathbb{R}^d , entonces $f \circ T$ también lo es y si además f es no negativa o $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$ entonces

$$\int_{\mathbb{R}^d} f dx = |\det T| \int_{\mathbb{R}^d} f \circ T dx.$$

2. Si E es un conjunto medible en \mathbb{R}^d , entonces $T(E)$ es medible en \mathbb{R}^d y además $\mu(T(E)) = |\det T| \mu(E)$ (donde μ denota la medida de Lebesgue en \mathbb{R}^d).

DEMOSTRACIÓN. Ver [6, Theorem 2.44 pág 73]. \square

En todo el trabajo, buscamos soluciones analíticas de las ecuaciones diferenciales que son objeto de nuestro estudio. La teoría de funciones analíticas la dimos en el curso de Análisis Complejo siguiendo el libro [10]. Muchos de los resultados de variable compleja utilizados los sacamos de ahí.

DEFINICIÓN 5.6. Una cierta función f (real o compleja) es **analítica** en un punto x_0 de su dominio si existe una serie de potencias centrada en x_0

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n (x - x_0)^n,$$

que converge en un entorno U (contenido en \mathbb{R} o \mathbb{C}) de x_0 y que coincide con la función en dicho entorno, es decir se cumple que

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (x - x_0)^n, \quad \forall x \in U.$$

El método para resolver la mayoría de ecuaciones diferenciales que se estudian en este trabajo consiste en plantear una solución en serie de potencias como la anterior y sustituirla en la ecuación diferencial derivando la serie término a término. Al hacer esto, estamos utilizando implícitamente el siguiente teorema:

TEOREMA 5.7 (Teorema de Derivación de Series de Potencias). Sea $a \in \mathbb{C}$, $\sum_{n \geq 0} a_n (z - a)^n$ una serie de potencias no trivial y $\Omega \subseteq \mathbb{C}$ su dominio de convergencia. Sea $f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ la función suma de la serie, es decir,

$$f(z) := \sum_{n \geq 0} a_n (z - a)^n, \quad \forall z \in \Omega.$$

Entonces f es infinitamente derivable en Ω y, para cada $k \in \mathbb{N}$ su derivada k -ésima se obtiene derivando k veces la serie término a término, es decir

$$f^{(k)}(z) = \sum_{n \geq k} n(n-1) \dots (n-k+1) a_n (z - a)^{n-k}, \quad \forall z \in \Omega.$$

DEMOSTRACIÓN. Ver [10, Teorema 1.41 pág 48]. \square

Aunque este resultado se enuncia para funciones complejas, como podemos ver \mathbb{R} inmerso en \mathbb{C} podemos aplicarlo a las funciones que manejamos en este trabajo (que tienen dominio en \mathbb{R}).

Por otro lado, otro resultado clásico de análisis complejo que usamos en este trabajo es el teorema de Cauchy (en la demostración del Lema 2.28).

DEFINICIÓN 5.8. Dado $\Omega \subseteq \mathbb{C}$ abierto y $f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ continua, decimos que f es **holomorfa** en Ω (y escribimos $f \in \mathcal{H}(\Omega)$) si f es derivable en todo punto de Ω .

DEFINICIÓN 5.9. Sea $[a, b] \subset \mathbb{R}$, decimos que $\gamma : [a, b] \rightarrow \mathbb{C}$ es un **camino** en \mathbb{C} si γ es continua y derivable. Decimos que γ es cerrada si $\gamma(a) = \gamma(b)$.

DEFINICIÓN 5.10. Sea $\gamma : [a, b] \rightarrow \mathbb{C}$ un camino y $f : \gamma^* \rightarrow \mathbb{C}$ (donde γ^* denota el soporte de γ) una aplicación continua.

Definimos la **integral curvilínea** de f sobre γ como

$$\int_{\gamma} f(z) dz = \int_a^b f(\gamma(t)) \gamma'(t) dt.$$

TEOREMA 5.11 (Teorema de Cauchy). Sea $\Omega \subseteq \mathbb{C}$ abierto, $\gamma \subset \Omega$ un camino cerrado y $f \in \mathcal{H}(\Omega)$. Entonces se verifica que

$$\int_{\gamma} f(z) dz = 0.$$

DEMOSTRACIÓN. Ver [10, Teorema 4.9 pág 149]. □

Por último, un resultado que también usamos de forma recurrente en este trabajo es que las soluciones de E.D.O.s lineales con coeficientes analíticos sólo admiten soluciones analíticas. Esto lo vemos en el libro de Coddington [2], como conclusión de un estudio de la ecuación general lineal con coeficientes analíticos que se hace en uno de sus capítulos (el Capítulo 3, que comienza en la página 123).

En concreto, al final de la Sección 7 de este capítulo se da por demostrado el siguiente resultado, que incluimos aquí:

TEOREMA 5.12 (Resolución de E.D.O.s Lineales con Coeficientes Analíticos). Sea x_0 un número real, y supongamos que los coeficientes a_1, \dots, a_n que aparecen en la ecuación:

$$L(y) = y^{(n)} + a_1(x)y^{(n-1)} + \dots + a_n(x)y,$$

tienen desarrollos en series de potencias, de la forma $x - x_0$ en un intervalo

$$|x - x_0| < r, \quad \text{con } r > 0.$$

Si $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ son n constantes cualesquiera, entonces existe una única solución ϕ del problema:

$$L(y) = 0, \quad y(x_0) = \alpha_1, \quad \dots, \quad y^{(n-1)}(x_0) = \alpha_{n-1},$$

la cual tiene un desarrollo en serie de potencias de la forma

$$\phi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k (x - x_0)^k, \quad ,$$

que es convergente para $|x - x_0| < r$.

DEMOSTRACIÓN. Ver [2, Theorem 12 pág 151] □

2. La integral gaussiana

La integral

$$\mathcal{I} := \int_{\mathbb{R}} e^{-x^2} dx$$

es conocida en la literatura como *integral de Gauss* o, como nosotros la hemos llamado, la **integral gaussiana** (o simplemente *gaussiana*). Esta es una integral que aparece de manera

recurrente en el análisis real, y es célebre por su relación con la distribución normal de probabilidad. Su cálculo se le atribuye por primera vez a Gauss, pero se han encontrado posteriormente otras formas más sencillas de hallar su valor.

El cálculo que damos nosotros se sigue de una aplicación simple del teorema de Fubini y un cambio de variable a coordenadas polares en el plano. El truco está en calcular el cuadrado de \mathcal{I} y aplicar Fubini:

$$\begin{aligned}\mathcal{I}^2 &= \left(\int_{\mathbb{R}} e^{-x^2} dx \right)^2 \\ &= \left(\int_{\mathbb{R}} e^{-x^2} dx \right) \left(\int_{\mathbb{R}} e^{-y^2} dy \right) \\ &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} e^{-(x^2+y^2)} dx dy.\end{aligned}$$

Ahora, esta última integral se puede calcular fácilmente si utilizamos coordenadas polares en el plano:

$$\begin{cases} x = r \cos \theta \\ y = r \sin \theta \\ r > 0, \quad 0 \leq \theta \leq 2\pi. \end{cases}$$

De esta manera, aplicando el cambio de variable en la integral:

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} e^{-(x^2+y^2)} dx dy &= \int_0^{2\pi} \int_0^{+\infty} r e^{-r^2} dr d\theta \\ &= 2\pi \int_0^{+\infty} r e^{-r^2} dr \\ &= -\pi \int_0^{+\infty} e^{-s} ds = \pi,\end{aligned}$$

donde en la última integral hemos aplicado el cambio de variable $r^2 = s$. De aquí se sigue el resultado:

$$\mathcal{I}^2 = \pi \implies \mathcal{I} = \int_{\mathbb{R}} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}.$$

3. La fórmula de Green

La *fórmula de Green* es uno de los resultados fundamentales del análisis real multivariable, y se puede entender como una suerte de generalización de la integración por partes en varias variables. Esta se puede obtener como corolario de otro resultado más clásico: el *teorema de la divergencia* para funciones de varias variables.

En un contexto general, el teorema de la divergencia se enuncia para campos vectoriales en $\mathcal{C}^1(\mathbb{R}^d)$ y volúmenes delimitados por variedades diferenciables (véase [4, Theorem 1, pág 711]), pero nosotros sólo lo necesitamos para un caso particular. Antes de entrar en materia, fijemos algo de notación.

DEFINICIÓN 5.13. Dado $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ abierto, denotamos su clausura (el menor cerrado que contiene a Ω) con $\bar{\Omega}$. Para referirnos a la frontera de Ω (el conjunto $\bar{\Omega} \setminus \Omega$) utilizamos la notación $\partial\Omega$.

DEFINICIÓN 5.14. Dado $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ abierto y $k \in \mathbb{N}_0$, decimos que

$$\vec{F} : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}^d$$

es un campo vectorial k -diferenciable (o simplemente campo vectorial si $k = 0$ o campo vectorial diferenciable si $k = 1$) en Ω si

$$\vec{F}(x_1, \dots, x_d) := (F_1(x_1, \dots, x_d), \dots, F_d(x_1, \dots, x_d)), \quad F_i \in \mathcal{C}^k(\Omega) \quad \forall i \in \{1, \dots, d\}.$$

Extendiendo la definición anterior, decimos que $\vec{F} \in C^k(\bar{\Omega})$ cuando

$$\vec{F} : \bar{\Omega} \longrightarrow \mathbb{R}^d$$

y cuando sea posible extender por continuidad las funciones F_i y sus derivadas hasta orden k a todo $\bar{\Omega}$.

DEFINICIÓN 5.15. Dado un campo vectorial diferenciable \vec{F} definido en un abierto $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, se define su **divergencia** como la magnitud

$$\operatorname{div}(\vec{F})(x) := \left(\frac{\partial F_1}{\partial x_1} + \cdots + \frac{\partial F_d}{\partial x_d} \right)(x), \quad \forall x \in \Omega.$$

Si el campo \vec{F} es diferenciable en $\bar{\Omega}$, la definición anterior se extiende por continuidad también para valores de \vec{F} en la frontera de Ω .

DEFINICIÓN 5.16. Se define el **cubo de orden m** en el espacio \mathbb{R}^d como el conjunto

$$C_m := [-m, m]^d, \quad m \in \mathbb{N}.$$

En nuestro contexto, enunciamos y demostramos el teorema de la divergencia en los siguientes términos:

TEOREMA 5.17. Dado un campo vectorial diferenciable $\vec{F} \in C^1(C_m)$ (con $m \in \mathbb{N}$ fijo), se tiene que

$$\int_{\partial C_m} \vec{F} \cdot \vec{n} \, dS = \int_{C_m} \operatorname{div}(\vec{F}) \, dx,$$

donde \vec{n} es el campo vectorial normalizado ortogonal a ∂C_m orientado hacia fuera del cubo.

DEMOSTRACIÓN. Definamos los conjuntos

$$C_i^+ := \{(x_1, \dots, x_d) \in C_m : |x_j| < m \quad \forall j \neq i, \quad x_i = m\}, \quad \forall i \in \{1, \dots, d\}$$

y

$$C_i^- := \{(x_1, \dots, x_d) \in C_m : |x_j| < m \quad \forall j \neq i, \quad x_i = -m\}, \quad \forall i \in \{1, \dots, d\}.$$

Estos conjuntos forman cada una de las caras del cubo. Notemos que como las aristas del cubo tienen medida de Lebesgue nula, a efectos de calcular la integral podemos hacer

$$\int_{\partial C_m} \vec{F} \cdot \vec{n} \, dS = \sum_{i=1}^d \left(\int_{C_i^+} \vec{F} \cdot \vec{n} \, dS - \int_{C_i^-} \vec{F} \cdot \vec{n} \, dS \right).$$

Por lo tanto, podemos elegir el campo vectorial \vec{n} definido en ∂C_m de manera que

$$\vec{n}(x_1, \dots, x_d) := (\delta_{i,1}, \dots, \delta_{i,d}), \quad \forall (x_1, \dots, x_d) \in C_i^+$$

y

$$\vec{n}(x_1, \dots, x_d) := -(\delta_{i,1}, \dots, \delta_{i,d}), \quad \forall (x_1, \dots, x_d) \in C_i^-$$

(donde cada $\delta_{i,j}$ es una *delta de Kronecker*) y tenga un valor arbitrario en las aristas (aunque no hace falta ni definirlos, porque no lo vamos a considerar).

Se tiene entonces que:

$$\int_{\partial C_m} \vec{F} \cdot \vec{n} \, dS = \sum_{i=1}^d \left(\int_{C_i^+} F_i \, dS - \int_{C_i^-} F_i \, dS \right).$$

Ahora, una parametrización de cada cara C_i^\pm es

$$\varphi^{-1}(x_1, \dots, x_{d-1}) = (x_1, \dots, \pm m, \dots, x_{d-1}), \quad \forall (x_1, \dots, x_{d-1}) \in (-m, m)^{d-1},$$

donde $\pm m$ está en la coordenada i -ésima. De esta manera, se tiene que para cada $i \in \{1, \dots, d\}$ es

$$\int_{C_i^\pm} F_i \, dS = \int_{-m}^m \cdots \int_{-m}^m F_i(x_1, \dots, \pm m, \dots, x_d) \, dx_1 \cdots dx_{i-1} dx_{i+1} \cdots dx_d.$$

Ahora, observemos que fijas las coordenadas x_j para $j \neq i$ se tiene que

$$F_i(x_i) := F_i(x_1, \dots, x_d), \quad |x_i| < m,$$

es una función real derivable en todo su dominio (y con derivadas continuas), luego por la fórmula de Barrow se tiene que

$$F_i(x_1, \dots, m, \dots, x_d) - F_i(x_1, \dots, -m, \dots, x_d) = \int_{-m}^m \frac{\partial F_i}{\partial x_i} dx_i.$$

Utilizando el teorema de Fubini y aplicando todo lo anterior para cada $i \in \{1, \dots, n\}$ llegamos finalmente al resultado deseado

$$\begin{aligned} \int_{\partial C_m} \vec{F} \cdot \vec{n} dS &= \sum_{i=1}^d \left(\int_{-m}^m \dots \int_{-m}^m \left(\int_{-m}^m \frac{\partial F_i}{\partial x_i} dx_i \right) dx_1 \dots dx_{i-1} dx_{i+1} \dots dx_d \right) \\ &= \sum_{i=1}^d \left(\int_{-m}^m \dots \int_{-m}^m \frac{\partial F_i}{\partial x_i} dx_1 \dots dx_d \right) \\ &= \int_{-m}^m \dots \int_{-m}^m \sum_{i=1}^d \frac{\partial F_i}{\partial x_i} dx_1 \dots dx_d \\ &= \int_{C_m} \operatorname{div}(\vec{F}) dx. \end{aligned}$$

□

A partir del teorema anterior se sigue fácilmente una fórmula de integración por partes para funciones en varias variables (es decir, una fórmula de Green) para funciones integrables en los cubos C_m definidos antes. Antes de enunciarlo, recordamos la forma del *operador gradiente*.

DEFINICIÓN 5.18. *Dada una cierta función $f \in \mathcal{C}^1(\Omega)$ con $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ abierto, se define el **gradiente de f** como el campo vectorial siguiente:*

$$\nabla f := \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_d} \right) (x), \quad \forall x \in \Omega.$$

Las siguientes dos propiedades son inmediatas:

LEMA 5.19. *Dado $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ abierto, se tiene que para cada $f \in \mathcal{C}^2(\Omega)$*

$$\operatorname{div}(\nabla f)(x) = \Delta f(x), \quad \forall x \in \Omega.$$

DEMOSTRACIÓN. Se sigue directamente de las definiciones de los operadores involucrados. □

LEMA 5.20. *Dados $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ abierto, \vec{F} campo vectorial diferenciable definido en Ω y $f \in \mathcal{C}^1(\Omega)$, entonces*

$$\operatorname{div}(f\vec{F}) = (\nabla f) \cdot \vec{F} + f \operatorname{div}(\vec{F}).$$

DEMOSTRACIÓN. Es un cálculo directo aplicando la regla de Leibniz en las derivadas parciales:

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(f\vec{F}) &= \operatorname{div}((fF_1, \dots, fF_d)) \\ &= \frac{\partial(fF_1)}{\partial x_1} + \dots + \frac{\partial(fF_d)}{\partial x_d} \\ &= \left(\frac{\partial f}{\partial x_1} F_1 + f \frac{\partial F_1}{\partial x_1} \right) + \dots + \left(\frac{\partial f}{\partial x_d} F_d + f \frac{\partial F_d}{\partial x_d} \right) \\ &= \left(\frac{\partial f}{\partial x_1} F_1 + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_d} F_d \right) + f \left(\frac{\partial F_1}{\partial x_1} + \dots + \frac{\partial F_d}{\partial x_d} \right) \\ &= (\nabla f) \cdot \vec{F} + f \operatorname{div}(\vec{F}). \end{aligned}$$

□

COROLARIO 5.21 (Fórmula de Green en el cubo). *Sea $m \in \mathbb{N}$, $v \in \mathcal{C}^2(C_m)$ y $u \in \mathcal{C}^1(C_m)$. Entonces*

$$\int_{C_m} u(\Delta v) dx = \int_{\partial C_m} u(\nabla v \cdot \vec{n}) dS - \int_{C_m} \nabla v \cdot \nabla u dx.$$

DEMOSTRACIÓN. Basta aplicar el Teorema 5.17 al campo vectorial diferenciable $\vec{F} = u(\nabla v)$:

$$\int_{C_m} \operatorname{div}(u(\nabla v)) dx = \int_{\partial C_m} u(\nabla v \cdot \vec{n}) dS.$$

Ahora, se tiene por los dos lemas anteriores que

$$\int_{C_m} \operatorname{div}(u(\nabla v)) dx = \int_{C_m} \nabla v \cdot \nabla u + u(\Delta v) dx,$$

de donde se sigue la fórmula inmediatamente. \square

En la sección 2.5 usamos una versión de la fórmula de Green donde las integrales se toman sobre \mathbb{R}^d . Para probar dicha versión necesitamos cierto decaimiento en las funciones (y sus derivadas) cuando $|x| \rightarrow \infty$. Para evitar consideraciones técnicas nos vamos a restringir a funciones en la *clase de Schwartz*.

DEFINICIÓN 5.22. *Definimos la **clase de Schwartz de funciones** en \mathbb{R}^d como el conjunto*

$$\mathcal{S}_d = \left\{ f \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^d) : \sup_{y \in \mathbb{R}^d} \left((1 + \|y\|)^M \left| \frac{\partial^{|\alpha|} f}{\partial x^\alpha}(y) \right| \right) < +\infty, \quad \forall M \geq 1, \quad \forall \alpha \in \mathbb{N}_0^d \right\}.$$

Razonando como con la clase de Schwartz de funciones en una variable (Definición 2.7) deducimos tres propiedades inmediatas de este conjunto de funciones:

LEMA 5.23. *Si $f \in \mathcal{S}_d$ y $\alpha \in \mathbb{N}_0^d$, entonces $\left| \frac{\partial^{|\alpha|} f}{\partial x^\alpha} \right| \in L^1(\mathbb{R}^d)$.*

DEMOSTRACIÓN. Se sigue inmediatamente de la definición del conjunto \mathcal{S}_d y de que la función $\frac{1}{(1+\|x\|)^M}$ está en $L^1(\mathbb{R}^d)$ para $M \geq d+1$. \square

LEMA 5.24. *Si $f \in \mathcal{S}_d$, entonces*

$$\lim_{\|x\| \rightarrow +\infty} \left| \frac{\partial^{|\alpha|} f}{\partial x^\alpha}(x) \right| = 0.$$

DEMOSTRACIÓN. Inmediato de la definición del conjunto \mathcal{S}_d . \square

LEMA 5.25. *Si $f \in \mathcal{S}_d$, entonces fija una coordenada cualquiera de f la función obtenida dejando las otras coordenadas tomando valores libremente en \mathbb{R} está en \mathcal{S}_{d-1}*

DEMOSTRACIÓN. Sea f_d la función resultante de fijar en f la coordenada d -ésima con un valor $a \in \mathbb{R}$ arbitrario (fijar cualquier otra coordenada sería equivalente).

Por un lado, está claro que $f_d \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^{d-1})$. Por otro lado, dado $\alpha \in \mathbb{N}_0^{d-1}$ se tiene que

$$\begin{aligned} \sup_{y \in \mathbb{R}^{d-1}} \left((1 + \|y\|)^M \left| \frac{\partial^{|\alpha|} f_d}{\partial x^\alpha}(y) \right| \right) &\leq \sup_{(y,a) \in \mathbb{R}^d} \left((1 + \|(y,a)\|)^M \left| \frac{\partial^{|\alpha|} f}{\partial x^{(\alpha,0)}}(y,a) \right| \right) \\ &\leq \sup_{y \in \mathbb{R}^d} \left((1 + \|y\|)^M \left| \frac{\partial^{|\alpha|} f}{\partial x^\alpha}(y) \right| \right) < +\infty, \end{aligned}$$

por lo que concluimos que $f_d \in \mathcal{S}_{d-1}$. \square

Teniendo en cuenta estos tres lemas, tomemos $f \in \mathcal{S}_d$.

Observemos por un lado que, como $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$ se tiene utilizando el teorema de la convergencia dominada que

$$\int_{\mathbb{R}^n} f dx = \int_{\mathbb{R}^n} \lim_{m \rightarrow \infty} f \chi_{C_m} dx = \lim_{m \rightarrow \infty} \int_{C_m} f dx,$$

donde χ_A denota la **función característica** del conjunto A , es decir, la función que vale idénticamente la unidad restringida al conjunto A y vale 0 fuera de este conjunto.

Por otro lado, se va a cumplir que

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \int_{\partial C_m} f \, dS = 0.$$

Para ver esto, utilizamos la notación introducida en la demostración del Teorema 5.17 para referirnos a las caras del cubo y para cada $m \in \mathbb{N}$ definimos

$$f_{\pm m}^i(x_1, \dots, x_{d-1}) := f(x_1, \dots, \pm m, \dots, x_{d-1}), \quad \forall (x_1, \dots, x_{d-1}) \in \mathbb{R}^{d-1},$$

donde $\pm m$ está en la i -ésima coordenada de f . Notar que, si $f \in \mathcal{S}_d$, entonces

$$|f_{\pm m}^i(x_1, \dots, x_{d-1})| \leq \frac{C_N}{(1 + \max\{|x_1|, \dots, |m|, \dots, |x_{d-1}|\})^N} \leq \frac{C_N}{(1 + |m|)^N}.$$

Se tiene entonces que

$$\begin{aligned} \left| \int_{\partial C_m} f \, dS \right| &= \left| \sum_{i=1}^d \left(\int_{C_i^+} f \, dS + \int_{C_i^-} f \, dS \right) \right| \\ &\leq \sum_{i=1}^d \int_{[-m, m]^{d-1}} |f_m^i(x)| + |f_{-m}^i(x)| \, dx \\ &\leq 2C_N \sum_{i=1}^d \frac{(2m)^{d-1}}{(1+m)^N} \end{aligned}$$

que tiende a 0 cuando $m \rightarrow \infty$, tomando cualquier $N \geq d$.

Con los razonamientos anteriores podemos dar por demostrada la siguiente proposición, que se deduce de la fórmula de Green en el cubo C_m haciendo $m \rightarrow +\infty$.

PROPOSICIÓN 5.26. Sean $u, v \in \mathcal{S}_d$. Entonces

$$\int_{\mathbb{R}^n} u(\Delta v) \, dx = - \int_{\mathbb{R}^n} \nabla v \nabla u \, dx.$$

Volviendo a la sección 2.5, fijémonos un momento en el conjunto de funciones admisibles \mathcal{A}_d dado en la Definición 2.21. Es evidente (por cómo se han definido los conjuntos) el siguiente lema

LEMA 5.27.

$$\Psi(t, x) \in \mathcal{A}_d \implies \Psi(t, \cdot) \in \mathcal{S}_d, \quad \forall t \in \mathbb{R}.$$

Por lo tanto, en el Teorema 2.19 de la sección 2.4 podemos aplicar la Proposición 5.26 a las funciones Ψ y $\bar{\Psi}$ que se consideran en el teorema.

4. El teorema de Weierstrass

En un cierto espacio normado $(X, \|\cdot\|)$, un conjunto de vectores $V \subset X$ se dice que es *denso* en X si, dado un cierto vector $x \in X$ cualquiera, tenemos otro vector v de V que está tan cerca de x como queramos.

Es decir, V es denso en X si

$$\forall x \in X, \forall \epsilon > 0, \quad \exists v \in V : \|x - v\| < \epsilon.$$

Una caracterización equivalente es que, para cada $x \in X$, existe una cierta sucesión de vectores $(v_n)_{n \in \mathbb{N}}$ contenida en V que tiene a x como límite.

El teorema de Weierstrass viene a decir que los polinomios forman un conjunto denso de $\mathcal{C}([a, b])$ con la norma del supremo. Este se ha enunciado en muchos libros de manera más general (por ejemplo, en [6, pág 138] hay toda una sección dedicada al estudio de la densidad de los polinomios en distintos espacios desde el punto de vista topológico, y también se dan versiones más generales en [11, pág 121]), pero la versión que utilizamos nosotros es la siguiente:

TEOREMA 5.28 (El Teorema de Weierstrass (1885)). *El conjunto $\mathcal{P} = \text{span}\{x^n\}_{n \geq 0}$ de los polinomios es denso en $(\mathcal{C}([a, b]), \|\cdot\|_\infty)$.*

Es decir, si $f \in \mathcal{C}([a, b])$ y $\epsilon > 0$, entonces existe un polinomio $P \in \mathcal{P}$ tal que

$$\|f - P\|_\infty = \sup_{x \in [a, b]} |f(x) - P(x)| < \epsilon.$$

Para demostrar este teorema, vamos a utilizar un resultado clásico del análisis de Fourier: la convergencia uniforme de las series de Fourier de funciones continuas definidas en compactos. Este esquema de demostración se ha tomado del curso de EDP y series de Fourier de tercero del grado.

La teoría de series de Fourier se desarrolla para funciones periódicas. Por convención, se define el toro como el conjunto

$$\mathbb{T} := \mathbb{R}/(L\mathbb{Z}) \equiv [0, L),$$

de manera que la notación $f : \mathbb{T} \rightarrow \mathbb{C}$ significa que

$$f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \quad : \quad f(x + L) = f(x), \quad \forall x \in \mathbb{R},$$

o bien que, fijado $a \in \mathbb{R}$, la función $f : [a, L + a) \rightarrow \mathbb{C}$ se extiende a todo \mathbb{R} de forma L -periódica. La teoría de series de Fourier estudia la representación de estas funciones en términos del sistema de polinomios trigonométricos $\{e^{\frac{2\pi i n x}{L}}\}_{n \in \mathbb{Z}}$.

En la mayoría de libros se normaliza $L = 1$, y se desarrolla la teoría de series de Fourier en $\mathbb{T} \equiv [0, 1) \equiv [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. La siguiente proposición la enunciamos sin demostración, pero puede consultarse en cualquier libro sobre análisis de Fourier. Nosotros damos de referencia el libro de Stein-Shakarchi [13, Corollary 5.4, pág 54].

PROPOSICIÓN 5.29. *El conjunto $\mathcal{T} = \text{span}\{e^{2\pi i n x}\}_{n \in \mathbb{Z}}$ es denso en $\mathcal{C}(\mathbb{T})$, el conjunto de funciones continuas en el toro $\mathbb{T} \equiv [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$.*

DEMOSTRACIÓN TEOREMA DE WEIERSTRASS. Sin perder generalidad, podemos suponer que $[a, b] = [0, \frac{1}{2}]$ (si no, simplemente hacemos un cambio de variable).

Sea $f \in \mathcal{C}([0, \frac{1}{2}])$ y sea $g(x) := f(|x|)$ que extendemos de manera que sea $g \in \mathcal{C}(\mathbb{T})$. Tomemos un cierto $\epsilon > 0$. Por la proposición anterior, se tiene que existe un cierto $N_0 = N_0(\epsilon, f) \in \mathbb{N}$ y unos ciertos coeficientes $a_n \in \mathbb{C}$ tales que

$$\sup_{|x| \leq \frac{1}{2}} \left| g(x) - \sum_{|n| \leq N_0} a_n e^{2\pi i n x} \right| < \frac{\epsilon}{2}.$$

Como e^u es una función analítica en todo \mathbb{C} , su desarrollo en serie de Taylor converge uniformemente sobre compactos de \mathbb{C} . Por lo tanto, podemos escribir

$$e^u = P_L(u) + R_L(u),$$

donde $P_L(u)$ es el polinomio de Taylor de orden L de e^u desarrollado en el origen y $R_L(u)$ su resto de Lagrange.

Se tiene que $|R_L(u)| \rightarrow 0$ uniformemente sobre compactos cuando L tiende a infinito. En particular, existe un cierto $L = L(\epsilon, N_0, a_n) \in \mathbb{N}$ tal que

$$|R_L(u)| < \frac{\epsilon}{2 \sum_{|n| \leq N_0} |a_n|}, \quad \forall L \geq L_0, \forall |u| \leq \pi N_0.$$

Por lo tanto, por la desigualdad triangular se tiene que

$$\begin{aligned} \left| g(x) - \sum_{|n| \leq N_0} a_n P_{L_0}(2\pi i n x) \right| &\leq \left| g(x) - \sum_{|n| \leq N_0} a_n e^{2\pi i n x} \right| + \sum_{|n| \leq N_0} |a_n| |e^{2\pi i n x} - P_{L_0}(2\pi i n x)| \\ &< \frac{\epsilon}{2} + \frac{\epsilon}{2} = \epsilon, \quad \forall x \in \mathbb{T}, \end{aligned}$$

y tomando supremos sobre $[0, \frac{1}{2}]$, concluimos que

$$\left\| f - \sum_{|n| \leq N_0} a_n P_{L_0}(2\pi i n x) \right\|_{\infty} = \sup_{|x| \leq \frac{1}{2}} \left| f - \sum_{|n| \leq N_0} a_n P_{L_0}(2\pi i n x) \right| < \epsilon$$

y el resultado queda probado. \square

Esto termina por probar que el conjunto $\text{span}\{x^n\}_{n \geq 0}$ es denso en $(\mathcal{C}([a, b]), \|\cdot\|_{\infty})$. Como sabemos que $(\mathcal{C}([a, b]), \|\cdot\|_{\infty})$ es a su vez denso en $L^2((a, b))$ (pues se sabe en particular que $\text{span}\{e^{\frac{2\pi i n x}{b-a}}\}_{n \geq 0}$ es denso en $L^2((a, b))$, véase [13, pág 70]), se puede deducir que los polinomios son densos en este espacio.

Dada $f \in L^2((a, b))$ y $\epsilon > 0$, se tiene que existe una cierta función $g \in \mathcal{C}([a, b])$ tal que

$$\|f - g\|_2 = \left(\int_a^b |f(x) - g(x)|^2 dx \right)^{1/2} < \frac{\epsilon}{2}.$$

Por otro lado, existe un cierto polinomio $P \in \text{span}\{x^n\}_{n \geq 0}$ tal que

$$\|g - P\|_{\infty} = \sup_{x \in [a, b]} |g(x) - P(x)| < \frac{\epsilon}{2|b-a|^{1/2}}.$$

Por lo tanto, se tiene que

$$\begin{aligned} \|g - P\|_2 &= \left(\int_a^b |g(x) - P(x)|^2 dx \right)^{1/2} \leq \left(|b-a| \sup_{x \in [a, b]} |g(x) - P(x)|^2 \right)^{1/2} \\ &\leq |b-a|^{1/2} \|g - P\|_{\infty} < \frac{\epsilon}{2}, \end{aligned}$$

y concluimos por la desigualdad triangular que

$$\|f - P\|_2 \leq \|f - g\|_2 + \|g - P\|_2 < \epsilon.$$

Por lo tanto, concluimos que el sistema $\text{span}\{x^n\}_{n \geq 0}$ es denso en $L^2((a, b))$. Por otro lado, tenemos el siguiente resultado.

PROPOSICIÓN 5.30. *Sea \mathbb{H} un espacio de Hilbert y sea $\{x_n\}_{n=1}^{+\infty} \subset \mathbb{H}$.*

Si $\text{span}\{x_n\}_{n \geq 1}$ es denso en \mathbb{H} , entonces dado $f \in \mathbb{H}$ tal que cumple

$$(5.4.11) \quad \langle f, x_n \rangle = 0, \quad \forall n \in \mathbb{N},$$

tiene que ser $f \equiv 0$.

DEMOSTRACIÓN. Sea $f \in \mathbb{H}$ con la propiedad (5.4.11). Como $\text{span}\{x_n\}_{n \geq 1}$ es denso, para cada $m \in \mathbb{N}$ se tiene que existe un cierto $g_m \in \text{span}\{x_n\}_{n \geq 1}$ tal que

$$\|f - g_m\|_2 < \frac{1}{m}.$$

De aquí se va a desprender el resultado, pues se tiene que

$$\begin{aligned} \|f\|_2^2 = \langle f, f \rangle &= \langle f, f - g_m \rangle + \langle f, g_m \rangle \\ &\leq \|f\|_2 \|f - g_m\|_2 \\ &\leq \|f\|_2 \frac{1}{m}, \end{aligned}$$

donde en la segunda línea hemos utilizado la desigualdad de Cauchy-Schwarz y que $\langle f, g_m \rangle = 0$.

De aquí concluimos que

$$\|f\|_2 \leq \frac{1}{m}, \quad m \in \mathbb{N},$$

y como m era arbitrario haciendo $m \rightarrow +\infty$ llegamos a que

$$\|f\|_2 = 0 \implies f \equiv 0.$$

\square

Observemos que, dados $a, b \in \mathbb{R}$, $L^2((a, b))$ es un espacio de Hilbert que contiene al conjunto $\text{span}\{x^n\}_{n \geq 0}$, que es denso. Por lo tanto, de la proposición anterior deducimos la propiedad que utilizamos en la Proposición 3.11:

COROLARIO 5.31. *Sea f una función en $L^2((-1, 1))$ ortogonal a todos los monomios x^k con $k \in \mathbb{N}$. Entonces f vale cero en casi todo punto.*

5. Laplaciano en coordenadas esféricas

Pongamos que tenemos un campo escalar $\omega \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^3)$. Sabemos que su laplaciano se define como

$$\Delta[\omega] = \frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial z^2}$$

en coordenadas canónicas.

Si tenemos expresado $\omega = \omega(r, \theta, \phi)$ en coordenadas esféricas, para hallar la forma de Δ_E no tenemos más que calcular el cambio de variable. Es un cálculo tedioso, pero que se basa únicamente en derivar aplicando la regla de la cadena y simplificar. Hacemos un esbozo del cambio.

La expresión de ω en coordenadas esféricas se puede ver como la composición de la función con el cambio de coordenadas inverso, es decir, podemos escribir

$$\omega = \omega(r(x, y, z), \theta(x, y, z), \phi(x, y, z)),$$

donde el inverso del cambio de coordenadas esféricas viene dado por

$$\begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \theta = \arctan \frac{y}{x} \\ \phi = \arccos \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}. \end{cases}$$

Entonces, utilizando la regla de la cadena se sigue que

$$\frac{\partial \omega}{\partial x} = \frac{\partial \omega}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial \omega}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial \omega}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial x},$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial y} = \frac{\partial \omega}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial \omega}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial y} + \frac{\partial \omega}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial y},$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial z} = \frac{\partial \omega}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial z} + \frac{\partial \omega}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} + \frac{\partial \omega}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial z}.$$

Calculamos las parciales anteriores. Por un lado, es inmediato que:

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r}, \quad \frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r}, \quad \frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{r}.$$

Por otro lado, fijándonos en las partes angulares, se tiene por la regla de la cadena que

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{1}{1 + (y/x)^2} \partial_x \left[\frac{y}{x} \right] = -\frac{1}{1 + (y/x)^2} \frac{y}{x^2},$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{1 - (z/r)^2}} \partial_x \left[\frac{z}{r} \right] = -\frac{1}{\sqrt{1 - (z/r)^2}} \frac{zx}{r^3},$$

y haciendo cuentas análogas se llega a que

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{1}{1 + (y/x)^2} \frac{1}{x}, \quad \frac{\partial \theta}{\partial x} = 0$$

y

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = -\frac{1}{\sqrt{1 - (z/r)^2}} \frac{zy}{r^3}, \quad \frac{\partial \phi}{\partial z} = \frac{1}{\sqrt{1 - (z/r)^2}} \frac{r - z^2/r}{r^2}.$$

Por lo tanto, sustituyendo y utilizando la expresión del cambio a esféricas

$$\begin{cases} x = r \sin \phi \cos \theta \\ y = r \sin \phi \sin \theta \\ z = r \cos \phi, \end{cases}$$

llegamos a que

$$\frac{\partial \omega}{\partial x} = \cos \theta \sin \phi \frac{\partial \omega}{\partial r} - \frac{\cos \phi \cos \theta}{r} \frac{\partial \omega}{\partial \phi} - \frac{1 \sin \theta}{r \sin \phi} \frac{\partial \omega}{\partial \theta} =: v,$$

donde hemos definido la función $v(r, \theta, \phi)$. Por lo tanto, derivando la expresión anterior:

$$\frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} = \frac{\partial v}{\partial x} = \cos \theta \sin \phi \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{\cos \phi \cos \theta}{r} \frac{\partial v}{\partial \phi} - \frac{1 \sin \theta}{r \sin \phi} \frac{\partial v}{\partial \theta},$$

donde hemos derivado v respecto de x razonando como con ω .

Por otro lado, haciendo cuentas análogas se llega a que

$$\frac{\partial \omega}{\partial y} = \sin \theta \sin \phi \frac{\partial \omega}{\partial r} + \frac{\cos \phi \sin \theta}{r} \frac{\partial \omega}{\partial \phi} + \frac{1 \cos \theta}{r \sin \phi} \frac{\partial \omega}{\partial \theta} =: h$$

y también

$$\frac{\partial \omega}{\partial z} = \cos \phi \frac{\partial \omega}{\partial r} - \frac{\sin \phi}{r} \frac{\partial \omega}{\partial \phi} =: k.$$

Por lo tanto, calculando las segundas derivadas iterando las fórmulas anteriores (como se planteó con $\frac{\partial v}{\partial x}$) y simplificando llegamos a la expresión buscada:

$$\begin{aligned} \Delta_E[\omega] &= \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial h}{\partial y} + \frac{\partial k}{\partial z} \\ &= \frac{\partial^2 \omega}{\partial r^2} + \frac{\cos \phi}{r^2 \sin \phi} \frac{\partial \omega}{\partial \phi} + \frac{2}{r} \frac{\partial \omega}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \omega}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \phi} \frac{\partial^2 \omega}{\partial \theta^2} \\ &= \frac{\partial^2 \omega}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \omega}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Delta_{\mathbb{S}^2}[\omega]. \end{aligned}$$

6. Las funciones gamma y beta

La *función gamma* es una función que aparece en diversas áreas del análisis real y la teoría de la probabilidad. Quizá sea conocida en su aplicación estadística al definir una conocida distribución de probabilidad, pero es más interesante su concepción como *generalización del factorial* para números reales. En un momento veremos a qué nos referimos con esto; ahora, damos la definición explícita de la función gamma.

DEFINICIÓN 5.32. Se define a la **función gamma** (Γ) por la integral paramétrica

$$\Gamma(p) := \int_0^{+\infty} e^{-x} x^{p-1} dx, \quad p \in (0, +\infty).$$

Esta es una función definida en los reales positivos que toma valores reales positivos. Es una función interesante fundamentalmente porque tiene la siguiente propiedad:

LEMA 5.33.

$$\Gamma(p+1) = p\Gamma(p), \quad \forall p \in (0, +\infty).$$

DEMOSTRACIÓN. Basta integrar por partes:

$$\Gamma(p+1) = \int_0^{+\infty} e^{-x} x^p dx = [-e^{-x} x^p]_0^{+\infty} + p \int_0^{+\infty} e^{-x} x^{p-1} dx = p\Gamma(p).$$

□

Ahora, observemos que

$$\Gamma(1) = \int_0^{+\infty} e^{-x} dx = 1,$$

luego se sigue directamente que

$$\Gamma(n+1) = n!, \quad \forall n \in \mathbb{N},$$

(de ahí el entender a Γ como una generalización del factorial).

La función Γ es útil en muchas ocasiones, en particular para el cálculo de algunas integrales. Nosotros vamos a utilizar su relación con otra función bien conocida para calcular la integral

$$\int_{-1}^1 (1-x^2)^l dx, \quad l \in \mathbb{N}$$

de manera sencilla.

La otra función a la que nos referimos es la siguiente:

DEFINICIÓN 5.34. *Definimos la **función beta** por la integral biparamétrica*

$$B(p, q) = \int_0^1 x^{p-1}(1-x)^{q-1} dx, \quad p, q \in (0, +\infty).$$

A veces esta función conviene verla representada con otra integral. El siguiente resultado nos será de utilidad.

LEMA 5.35. *La función beta puede escribirse en la forma*

$$B(p, q) := \int_0^{+\infty} \frac{x^{p-1}}{(1+x)^{p+q}} dx, \quad \forall p, q \in (0, +\infty).$$

DEMOSTRACIÓN. Fijos $p, q \in (0, +\infty)$, basta aplicar el cambio de variable $t = \frac{x}{1+x}$ en la integral

$$\int_0^1 t^{p-1}(1-t)^{q-1} dt.$$

□

A partir de este resultado podemos deducir fácilmente una relación de gran utilidad entre las funciones gamma y beta. Lo vemos en el siguiente lema.

LEMA 5.36.

$$B(p, q) = \frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)}, \quad \forall p, q \in (0, +\infty).$$

DEMOSTRACIÓN. Utilizando el teorema de Fubini, podemos escribir el producto $\Gamma(p)\Gamma(q)$ en forma de integral doble:

$$\Gamma(p)\Gamma(q) = \int_0^{+\infty} e^{-x} x^{p-1} dx \int_0^{+\infty} e^{-y} y^{q-1} dy = \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} e^{-(x+y)} x^{p-1} y^{q-1} dx dy.$$

Entonces, realizando el cambio de variable doble

$$u = \frac{x}{y}, \quad v = x + y \quad \text{con inverso} \quad x = \frac{uv}{1+v}, \quad y = \frac{v}{1+u},$$

que se aplica de forma biyectiva en el cuadrante $(0, +\infty) \times (0, +\infty)$.

El Jacobiano del cambio inverso es

$$\frac{\partial(x, y)}{\partial(u, v)} = \frac{v}{(1+u)^2}.$$

Al aplicar el cambio en la integral podemos deducir fácilmente el resultado utilizando el lema anterior:

$$\begin{aligned}
\Gamma(p)\Gamma(q) &= \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} e^{-v} \frac{(uv)^{p-1}}{(1+u)^{p-1}} \frac{v^{q-1}}{(1+u)^{q-1}} \frac{v}{(1+u)^2} dudv \\
&= \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} e^{-v} v^{p+q-1} \frac{u^{p-1}}{(1+u)^{p+q}} dudv \\
&= \int_0^{+\infty} e^{-v} v^{p+q-1} dv \int_0^{+\infty} \frac{u^{p-1}}{(1+u)^{p+q}} du \\
&= \Gamma(p+q)B(p, q),
\end{aligned}$$

y a partir de la última igualdad el resultado es inmediato. \square

Es la hora de calcular la integral que necesitamos para hallar las normas de los armónicos esféricos. Para hacerlo, bastará utilizar los lemas anteriores.

PROPOSICIÓN 5.37.

$$\int_{-1}^1 (1-x^2)^l dx = \frac{2^{2l+1}(l!)^2}{(2l+1)!}, \quad \forall l \in \mathbb{N}_0.$$

DEMOSTRACIÓN. Sea $l \in \mathbb{N}_0$ fijo. Observemos que, como $(1-x^2)^l$ es una función simétrica par se tiene que

$$\int_{-1}^1 (1-x^2)^l dx = 2 \int_0^1 (1-x^2)^l dx.$$

Entonces, aplicando el cambio de variable $t = x^2$ y utilizando el Lema 5.4 obtenemos que

$$2 \int_0^1 (1-x^2)^l dx = 2 \int_0^1 (1-t)^l \frac{1}{2\sqrt{t}} dt = B(l+1, \frac{1}{2}),$$

por lo que basta aplicar los lemas 5.3 y 5.5 para obtener el resultado:

$$\int_{-1}^1 (1-x^2)^l dx = \frac{(l!)\Gamma(\frac{1}{2})}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} = \frac{(l!)\Gamma(\frac{1}{2})}{(l+\frac{1}{2}) \cdots \frac{1}{2}\Gamma(\frac{1}{2})} = \frac{2^{l+1}l!}{(2l+1)!!} = \frac{2^{l+1}l!(2l)!!}{(2l+1)!} = \frac{2^{l+1}2^l(l!)^2}{(2l+1)!}.$$

\square

Bibliografía

- [1] Marshall Bowen y Joseph Coster, *Methods of establishing the asymptotic behavior of the harmonic oscillator wave functions*, American Journal of Physics 48, 307 (1980).
- [2] Earl A. Coddington, *An introduction to ordinary differential equations*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J., 1968.
- [3] Robert Dautray, Jacques-Louis Lions, *Mathematical Analysis and Numerical and Numerical Methods for Science and Technology, Volume 3: Spectral Theory and Applications*, Springer, Germany, 2000.
- [4] Lawrence C.Evans, *Partial Differential Equations*, 2nd Ed, American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, 2010.
- [5] R. Feynman, R. Leighton, M. Sands, *Lectures on physics*, Vol 3, AW, 1964.
- [6] G. Folland, *Real Analysis*, 2nd Ed, John Wiley 1999.
- [7] Brian C. Hall, *Quantum Theory for Mathematicians*, Springer New York Heidelberg Dordrecht London, 2013.
- [8] Ira N. Levine, *Quantum Chemistry*, 5th Ed, Pearson Education S.A.
- [9] Elliot H.Lieb, Michael Loss, *Analysis*, 2nd Ed, American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, 2001.
- [10] Francisco Javier Pérez González, *Curso de Análisis Complejo*, Departamento de Análisis Matemático, Universidad de Granada, junio 2004.
- [11] Walter Rudin, *Functional Analysis*, 2nd Ed, McGraw-Hill, Inc, 1991.
- [12] George F. Simmons, *Differential Equations with Applications and Historical Notes*, 3rd Ed, Taylot & Francis Group, 2017.
- [13] Elias M.Stein, Rami Shakarchi, *Fourier Analysis*, Princeton University Press, 41 William Street, Princeton, New Jersey 08540, 2003.
- [14] Gabor Szegő, *Orthogonal Polynomials*, 4th Ed, American Mathematical Society, 1975.
- [15] Gerald Teschl, *Mathematical Methods in Quantum Mechanics With Applications to Schrödinger Operators*, American Mathematical Society, 2009.