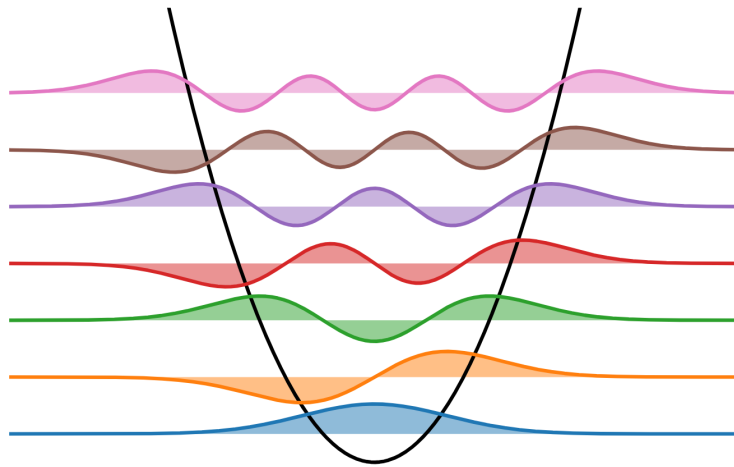


ECUACIONES DIFERENCIALES

SEGUNDO CUATRIMESTRE - 2025



Sobre la existencia de soluciones para la Ecuación de Schrödinger

Valentín Nico

Índice general

Introducción	3
Capítulo 1. Cálculo de variaciones	5
1.1. Formulación débil del problema	6
1.2. Condiciones de integrabilidad en el potencial	7
1.3. El teorema de existencia	9
1.4. El átomo de hidrógeno	10
Capítulo 2. Potenciales confinantes	13
2.1. Un espacio de Hilbert adecuado	13
2.2. Análisis espectral	14
Capítulo 3. Oscilador armónico cuántico	19
3.1. Motivación física del potencial armónico	19
3.2. Esquema de diferencias finitas	20
3.3. Resultados experimentales	21
3.4. Anexo: códigos de Python	25
Bibliografía	29

Introducción

En los inicios del siglo XX, diversos experimentos condujeron a la comunidad científica a formular una teoría que permita explicar la dinámica de partículas microscópicas que se mueven a velocidades cercanas a la de la luz. El ejemplo más sencillo de un sistema de este tipo es el de un electrón sometido al potencial eléctrico de un protón, sobre el cual pretendemos conocer su posición y estudiar su evolución temporal; es decir: un átomo.

¿Será posible conocer la localización exacta de un electrón en un dado instante con total precisión?

En busca de responder la pregunta anterior, los físicos del siglo XX contrastaron mediante experiencias que la naturaleza de los electrones (y de sus pares en el mundo subatómico) no era en su totalidad comparable a la de una *partícula*. En concreto, encontraron fuertes similitudes con el comportamiento de la luz, y de las ondas electromagnéticas. Propusieron, entonces, la denominada **dualidad onda-partícula**, que permitió entender matemáticamente a los electrones bajo esta dicotomía. Por otra parte, el denominado experimento de la doble rendija [Zei99] proporcionó evidencia respecto un comportamiento probabilístico y no determinista en los resultados de las mediciones de ciertas magnitudes de estas onda-partículas. En este sentido, predecir la *probabilidad* de un resultado de una medición es el foco central de la Teoría Cuántica desarrollada. Estos dos aspectos claves de la teoría cuántica serán tenidos en cuenta en la llamada *función de onda* de una partícula. La función de onda de una partícula es una función que toma valores complejos definida en $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$, que estará ligada a los posibles valores que la posición de la partícula puede tomar, y tiene una dependencia temporal regida por una ecuación postulada: la Ecuación de Schrödinger.

Para una función $\psi : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ suficientemente regular y una función que modela un *potencial* $V : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$, asociado a una fuerza $F = -\nabla V$, la ecuación de Schrödinger viene dada por la siguiente expresión:

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

donde $\hbar$ es la constante de Planck reducida, m la masa de la partícula cuántica y el Laplaciano depende de la variable x . Mediante el método de separación de variables, asumiendo que tanto ψ como V se descomponen en su parte espacial y su parte temporal, se consigue una nueva ecuación denominada **Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo**. Adimensionalizando dicha ecuación, obtenemos la ecuación diferencial que resulta el principal objeto de estudio de nuestro trabajo:

$$-\Delta \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x),$$

para cierta ψ suficientemente regular y $E \in \mathbb{R}$ un número real al que llamamos *energía*. De forma inmediata se observa que el problema anterior se puede considerar como un problema

de autovectores y autovalores para el operador diferencial $\mathcal{L} = (-\Delta + V)$, definido sobre algún espacio adecuado. Claro está que la existencia de soluciones dependerá de las condiciones de regularidad impuestas sobre el potencial $V(x)$, y la unicidad del dominio del operador diferencial. Un posible camino, y el que tomaremos a lo largo de este texto, será elegir, en función del potencial $V(x)$, un espacio de Sobolev adecuado y formular una versión débil del problema anterior que conduzca a teoremas de existencia.

En el primer capítulo del texto, daremos una formulación débil del problema en $H^1(\mathbb{R}^n)$ y utilizaremos cálculo de variaciones para demostrar, utilizando resultados de Análisis Funcional, un teorema de existencia cuando $V(x)$ es una función con *suficiente* integrabilidad. Veremos que este teorema aplica en el sistema que modela el átomo de Hidrógeno, consiguiendo un resultado clásico de los libros de texto de Física Cuántica con un acercamiento teórico que no es estándar.

En el segundo capítulo del texto, daremos otra formulación débil en un subespacio de $H^1(\mathbb{R}^n)$ que permitirá describir el espectro del operador $\mathcal{L}$ y resolverá la ecuación para potenciales no acotados conocidos como **confinantes**. Un ejemplo arquetípico de este escenario es el del oscilador armónico cuántico, donde la función potencial es radial y de la forma $V(x) = |x|^2$.

Finalmente, en el tercer y último capítulo proponemos un esquema numérico de diferencias finitas para poner en evidencia el teorema (no constructivo) de existencia y unicidad para el oscilador armónico cuántico. En concreto, aproximaremos las soluciones para un oscilador unidimensional y comprobaremos experimentalmente el error, comparando con los autovectores y autovalores explícitos conocidos de los libros de texto.

Cálculo de variaciones

En análisis matemático es bien conocido que toda función continua sobre un conjunto compacto alcanza su mínimo. Una posible demostración se basa en tomar una sucesión *minimizante*, extraer una subsucesión convergente y usar la continuidad de la función para pasar al límite. El **Cálculo de Variaciones** extiende esta idea al contexto de Análisis Funcional. En lugar de funciones reales definidas sobre subconjuntos compactos de $\mathbb{R}^n$, se consideran funcionales (no necesariamente lineales) continuos $\mathcal{F} : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{R}$ en un espacio de Hilbert $\mathcal{H}$. De esta manera, el problema central del Cálculo de Variaciones consiste en determinar si el ínfimo

$$\inf\{\mathcal{F}(\psi) : \|\psi\| \leq 1\}$$

existe y es alcanzado por algún elemento $\psi \in \mathcal{H}$. Sin embargo, a diferencia del caso finito dimensional, los conjuntos cerrados y acotados en espacios de Hilbert no son compactos en general. Por lo tanto, una sucesión minimizante no tiene por qué admitir una subsucesión convergente. Para superar esta dificultad, es necesario debilitar la noción de convergencia. Por el Teorema de Kakutani, en los espacios de Banach reflexivos toda sucesión acotada admite una subsucesión débilmente convergente (y de hecho, ¡vale la vuelta!). No obstante, los funcionales rara vez son continuos respecto de esta convergencia, por lo tanto no podríamos argumentar como en el caso de las funciones continuas. La ventaja es que, en numerosos problemas relevantes, un tal funcional suele resultar **débilmente semicontinuo inferior**:

$$\liminf_{j \rightarrow \infty} \mathcal{F}(\psi^j) \geq \mathcal{F}(\psi) \quad \text{si } \psi^j \xrightarrow{w} \psi.$$

Suponiendo que $(\psi^j)_{j \in \mathbb{N}}$ es una sucesión minimizante y que $\lambda = \inf\{\mathcal{F}(\psi) : \|\psi\| = 1\}$, obtenemos por Kakutani que existe una subsucesión débilmente convergente $\psi^{j_k} \xrightarrow{w} \psi$. Este elemento $\psi \in \mathcal{H}$ verifica que $\|\psi\| \leq 1$ y que

$$\lambda = \lim_{k \rightarrow \infty} \mathcal{F}(\psi^{j_k}) \geq \mathcal{F}(\psi) \geq \lambda,$$

concluyendo que ψ es solución del problema de minimización.

Utilizaremos esta estrategia para, mediante una formulación débil de la Ecuación de Schrödinger, definir la **energía** asociada a la formulación débil y demostrar que un minimizante de la energía es solución débil de la ecuación. Más aún, formularemos el problema de minimización para funciones $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ de norma 1, de modo que deberemos tomarnos el trabajo adicional de verificar que la solución minimizante verifica que $\|\psi\|_2 = 1$; lo cual no es directo, pues la esfera

$$S_1(0) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^n) : \|\psi\|_2 = 1\}$$

no es débilmente compacta.¹

¹De hecho, se puede probar que su clausura es $B_1(0)$, que por Kakutani sí es débilmente compacta.

1.1. Formulación débil del problema

Fijemos $V: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ una función potencial cuyas hipótesis de regularidad introduciremos más adelante para que la siguiente formulación tenga sentido. Considerando que

$$H^1(\mathbb{R}^n) = \overline{C_c(\mathbb{R}^n)} = H_0^1(\mathbb{R}^n),$$

para $u, v: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ suficientemente regulares la fórmula de integración por partes dice que

$$\int_{\mathbb{R}^n} \nabla u(x) \cdot \nabla v(x) dx = \int_{\mathbb{R}^n} -\Delta u(x) v(x) dx.$$

Lo anterior motiva la siguiente formulación débil de la ecuación de Schrödinger:

Formulación débil. Dada $V: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ *suficientemente* integrable, hallar $u \in H^1(\mathbb{R}^n)$ y $E \in \mathbb{R}$ tal que para toda $v \in H^1(\mathbb{R}^n)$ valga que:

$$\int_{\mathbb{R}^n} \nabla u(x) \cdot \nabla v(x) dx + \int_{\mathbb{R}^n} V(x) u(x) v(x) dx = E \int_{\mathbb{R}^n} u(x) v(x) dx.$$

Para estudiar el problema variacional, definimos el funcional de interés a minimizar:

Definición 1.1. La **energía cinética** es el operador dado por:

$$T: H^1(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathbb{R} \\ \psi \mapsto \int_{\mathbb{R}^n} |\nabla \psi|^2.$$

Dada $V: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ *suficientemente* integrable, la **energía potencial asociada a V** es el operador:

$$V: H^1(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathbb{R} \\ \psi \mapsto \int_{\mathbb{R}^n} V(x) \psi^2(x) dx.$$

La **Energía Total** $\mathcal{E} = T + V$ es la suma de la energía cinética y la potencial.

El camino será utilizar el Cálculo de Variaciones para minimizar la energía total y encontrar $\psi_0 \in H^1(\mathbb{R}^n)$ tal que

$$\mathcal{E}(\psi_0) = \inf\{\mathcal{E}(\psi) : \|\psi\|_2 = 1\}.$$

No obstante, el problema de minimización no tiene solución para cualquier elección de potencial. Veamos un ejemplo muy sencillo donde esto no ocurre:

Ejemplo 1.2. Consideremos como función potencial la función nula $V \equiv 0$, para la cual vale

$$\mathcal{E}(\psi) = \int_{\mathbb{R}^n} |\nabla \psi|^2 \geq 0$$

Si tomamos $\psi \in C_c(\mathbb{R}^n)$ cualquier función tal que $\mathcal{E}(\psi) = 1$, consideremos $\psi_R(x) = \frac{1}{R^{n/2}} \psi(x/R)$, para cada $R > 0$. En ese caso, tenemos que

$$\nabla \psi_R(x) = \frac{1}{R^{n/2+1}} \nabla \psi(x/R)$$

y por lo tanto

$$\mathcal{E}(\psi_R) = \frac{1}{R^2} \int_{\mathbb{R}^n} \frac{1}{R^n} |\nabla \psi(x/R)|^2 dx = \frac{1}{R^2} \xrightarrow{R \rightarrow \infty} 0.$$

Luego, de existir un minimizante $\psi_0 \in H^1(\mathbb{R}^n)$ debiera de ser que

$$\int_{\mathbb{R}^n} |\nabla \psi_0|^2 = 0.$$

Veamos que esto implica que $\psi_0 = 0$ en casi todo punto y por ende no puede existir un minimizante restringido a la condición de que $\|\psi_0\|_2 = 1$. En efecto, como $\|\nabla \psi_0\|_2 = 0$, esto dice que $|\nabla \psi_0| = 0$ y por ende ψ_0 debe ser igual (como distribución) a una función constante $C \in \mathbb{R}$. En consecuencia, para que $C \in H^1(\mathbb{R}^n)$ debe ser que $C \in L^2(\mathbb{R}^n)$ y por tanto que $\psi_0 = C = 0$.

En la sección a continuación enunciamos un lema técnico que introduce las condiciones de integrabilidad necesarias para que el problema débil pueda enunciarse y con las que, de hecho, la energía potencial resultará débilmente continua. Más aún, el teorema de existencia que probaremos requerirá de hipótesis adicionales sobre V que evitarán escenarios como el del ejemplo anterior en donde no existe una función minimizante de la energía.

1.2. Condiciones de integrabilidad en el potencial

Buscamos imponer condiciones para que la energía total $\mathcal{E}$ esté bien definida y resulte débilmente semicontinua. En primer lugar, la energía cinética T está bien definida para cualquier función de $H^1(\mathbb{R}^n)$. Por otra parte, la energía potencial asociada a V resulta, por lo menos, bien definida para funciones $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ siempre que $V \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n)$. No obstante, veamos que una mala elección de potencial podría implicar que la energía total no sea acotada inferiormente en la esfera:

Ejemplo 1.3. Consideremos $V: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $V(x) = -\frac{1}{|x|^3}$ junto a $\psi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ tal que $\|\psi\|_2 = 1$ y con la propiedad de que

$$\int_{\mathbb{R}^n} V(x) |\psi(x)|^2 dx < \infty.$$

Definiendo $\psi_R(x) := R^{n/2} \psi(Rx)$, para $R > 0$, tenemos que $\|\psi_R\|_2 = 1$ y que

$$\mathcal{E}(\psi_R) = R^2 \int_{\mathbb{R}^n} |\nabla \psi(x)|^2 dx - R^3 \int_{\mathbb{R}^n} \frac{|\psi(x)|^2}{|x|^3} \xrightarrow{R \rightarrow +\infty} -\infty.$$

Lo cual implica que la energía total no es acotada inferiormente en elementos de norma 1.

El rumbo será encontrar alguna desigualdad que *controle* inferiormente la energía total con respecto a la energía cinética. Cualquier desigualdad de este tipo se conoce como **principio de incertidumbre**. La razón histórica para el nombre anterior proviene del siguiente hecho experimental: uno no puede hacer la energía potencial muy negativa sin aumentar la energía cinética. En palabras físicas, uno no puede conocer simultáneamente la posición y el momento de una partícula. Aunque el siguiente lema, cuya demostración omitiremos, puede resultar técnico, se basa fuertemente en la Desigualdad de Sobolev (Theorem 8.3 [LL01]). La desigualdad dice que si $n \geq 3$, entonces existe $S_n > 0$ tal que para toda $f \in H^1(\mathbb{R}^n)$ vale:

$$S_n \|f\|_{\frac{2n}{n-2}}^2 \leq \|\nabla f\|_2^2.$$

Es posible conseguir una desigualdad análoga para los casos donde $n = 1, 2$, de modo tal que las hipótesis sobre el potencial V estarán divididas en casos según estas consideraciones dimensionales.

Lema 1.4 (Continuidad débil del potencial 11.4 [LL01]). Consideremos $V: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ una función potencial tal que

$$V \in \begin{cases} L^{n/2}(\mathbb{R}^n) + L^\infty(\mathbb{R}^n), & n \geq 3 \\ L^{1+\epsilon}(\mathbb{R}^2) + L^\infty(\mathbb{R}^2), & n = 2 \\ L^1(\mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}), & n = 1 \end{cases}$$

Entonces la energía potencial $V: H^1(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathbb{R}$ es un operador bien definido y existen $C, D > 0$ tales que para toda $\psi \in H^1(\mathbb{R}^n)$:

$$T(\psi) \leq C\mathcal{E}(\psi) + D\|\psi\|_2^2.$$

Más aún, tenemos que

$$E_0 = \inf\{\mathcal{E}(\psi) : \|\psi\|_2 = 1\} \text{ es finito.}$$

Finalmente, supongamos que V **decae en infinito**; es decir:

$$|\{x : V(x) > a\}| < \infty, \quad \forall a > 0.$$

Entonces vale que $V: H^1(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathbb{R}$ es débilmente continuo. ■

Gracias al lema anterior, podemos probar la semicontinuidad débil de la energía total. Para ello, recordemos el siguiente lema de Análisis Funcional:

Lema 1.5 (Semicontinuidad inferior de la norma). Sea E un espacio normado y $v^j \xrightarrow{w} v$ una sucesión débilmente convergente. Entonces

$$\liminf_{j \rightarrow \infty} \|v^j\|^2 \geq \|v\|^2.$$

DEMOSTRACIÓN. Sin pérdida de generalidad, supongamos que $v \neq 0$. Por el Teorema de Hahn-Banach, existe $\varphi \in E^*$ tal que $\|\varphi\| = 1$ y $|\varphi(v)| = \|v\|$. La convergencia débil implica que $\varphi(v^j) \rightarrow \varphi(v)$. De esta forma, tenemos que para cada $j \in \mathbb{N}$ vale la desigualdad $|\varphi(v^j)| \leq \|v^j\|$ y por ende

$$\|v\|^2 = \lim_{j \rightarrow \infty} |\varphi(v^j)|^2 \leq \liminf_{j \rightarrow \infty} \|v^j\|^2,$$

como queríamos. ■

Finalmente, tenemos el teorema buscado:

Teorema 1.6. Sea $V: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ una función potencial tal que

$$V \in \begin{cases} L^{n/2}(\mathbb{R}^n) + L^\infty(\mathbb{R}^n), & n \geq 3 \\ L^{1+\epsilon}(\mathbb{R}^2) + L^\infty(\mathbb{R}^2), & n = 2 \\ L^1(\mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}), & n = 1 \end{cases}$$

Entonces la energía total $\mathcal{E}: H^1(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathbb{R}$ es débilmente semicontinua inferior.

DEMOSTRACIÓN. Consideremos una sucesión $(\psi^j)_{j \in \mathbb{N}} \subseteq H^1(\mathbb{R}^n)$ tal que $\psi^j \xrightarrow{w} \psi \in H^1(\mathbb{R}^n)$. Recordando que

$$\nabla: H^1(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n) \times \cdots \times L^2(\mathbb{R}^n)$$

es un operador acotado, entonces ∇ es w - w continuo y por ende

$$\nabla \psi^j \xrightarrow{w} \nabla \psi.$$

Por el Lema 1.5 aplicado al espacio producto, tenemos que

$$\liminf_{j \rightarrow \infty} \|\nabla \psi^j\|_2^2 \geq \|\nabla \psi\|_2^2.$$

En otras palabras, tenemos que

$$\liminf_{j \rightarrow \infty} T(\psi^j) \geq T(\psi).$$

Es decir, T es débilmente semicontinuo inferior y por ende, por el Lema 1.4, la energía total $\mathcal{E} = T + V$ es también un operador débilmente semicontinuo inferior. ■

1.3. El teorema de existencia

En esta sección probaremos que, bajo ciertas hipótesis de negatividad para el potencial V , el Cálculo Variacional consigue un minimizante de la energía que resulta ser solución de la Ecuación de Schrödinger en el sentido débil.

Teorema 1.7. Sea $V : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ una función potencial que decrece en infinito y tal que

$$V \in \begin{cases} L^{n/2}(\mathbb{R}^n) + L^\infty(\mathbb{R}^n), & n \geq 3 \\ L^{1+\epsilon}(\mathbb{R}^2) + L^\infty(\mathbb{R}^2), & n = 2 \\ L^1(\mathbb{R}) + L^\infty(\mathbb{R}), & n = 1 \end{cases}$$

Supongamos además que

$$E_0 = \inf\{\mathcal{E}(\psi) : \|\psi\|_2 = 1\} < 0.$$

Entonces existe $\psi_0 \in H^1(\mathbb{R}^n)$ tal que $\|\psi_0\|_2 = 1$ y que es minimizante: $\mathcal{E}(\psi_0) = E_0$. Más aún, toda $\psi \in H^1(\mathbb{R}^n)$ minimizante verifica la Ecuación de Schrödinger en el sentido distribucional:

$$-\Delta\psi(x) + V(x)\psi(x) = E_0\psi(x).$$

DEMOSTRACIÓN. Consideremos $(\psi^j)_{j \in \mathbb{N}} \subseteq H^1(\mathbb{R}^n)$ una sucesión tal que $\mathcal{E}(\psi^j) \rightarrow E_0$ y $\|\psi^j\|_2 = 1$ para todo $j \in \mathbb{N}$. Por el Lema 1.4, tenemos que para cada $j \in \mathbb{N}$

$$\|\psi^j\|_{H^1(\mathbb{R}^n)}^2 = \|\psi^j\|_2^2 + T(\psi^j) \leq 1 + C\mathcal{E}(\psi^j) + D + 1.$$

En particular, se tiene que $(\psi^j)_{j \in \mathbb{N}}$ es acotada en $H^1(\mathbb{R}^n)$ y, por el Teorema de Kakutani, existen una subsucesión $(\psi^{j_k})_{k \in \mathbb{N}}$ y $\psi_0 \in H^1(\mathbb{R}^n)$ tales que

$$\psi^{j_k} \xrightarrow{w} \psi_0.$$

Por la semicontinuidad inferior débil del Teorema 1.6 obtenemos que

$$0 > E_0 = \liminf_{k \rightarrow \infty} \mathcal{E}(\psi^{j_k}) \geq \mathcal{E}(\psi_0).$$

En particular, tenemos que $\psi_0 \neq 0$. Para concluir que ψ_0 es minimizante, basta con ver que $\|\psi_0\|_2 = 1$. Como la inclusión $H^1(\mathbb{R}^n) \hookrightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$ es un operador lineal continuo, entonces preserva sucesiones débilmente convergentes y por lo tanto $\psi^{j_k} \xrightarrow{w} \psi_0$ en $L^2(\mathbb{R}^n)$. En particular, como $\psi^j \in B_1^{L^2(\mathbb{R}^n)}(0)$ para todo $j \in \mathbb{N}$ y la bola es débilmente compacta en $L^2(\mathbb{R}^n)$, tenemos que $\|\psi_0\|_2 \leq 1$. Notemos que si $\psi \in H^1(\mathbb{R}^n)$ y $\lambda \in \mathbb{R}$ entonces

$$\mathcal{E}(\lambda\psi) = \int_{\mathbb{R}^n} |\nabla(\lambda\psi(x))|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^n} V(x)(\lambda\psi(x))^2 dx = \lambda^2 \mathcal{E}(\psi).$$

Luego, por hipótesis, se tiene que

$$0 > E_0 \geq \mathcal{E}(\psi_0) = \|\psi_0\|_2^2 \mathcal{E}\left(\frac{\psi_0}{\|\psi_0\|_2}\right) \geq \|\psi_0\|_2^2 E_0.$$

Como E_0 es negativo, lo anterior dice que $1 \leq \|\psi_0\|_2^2$ y por lo tanto que $\|\psi_0\|_2 = 1$. En conclusión, tenemos que

$$E_0 \leq \mathcal{E}(\psi_0) \leq \liminf_{k \rightarrow \infty} \mathcal{E}(\psi^{j_k}) = E_0,$$

y, por tanto, que ψ_0 es minimizante. Veamos ahora que cualquier $\psi \in H^1(\mathbb{R}^n)$ de norma $\|\psi\|_2 = 1$ y minimizante es solución débil de la Ecuación de Schrödinger en el sentido distribucional. Para ello, tomemos $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ y definamos para $\epsilon > 0$

$$\psi^\epsilon = \psi + \epsilon f.$$

Utilicemos un argumento variacional a través del denominado **cociente de Rayleigh**

$$R(\epsilon) := \frac{\mathcal{E}(\psi^\epsilon)}{\|\psi^\epsilon\|_2^2}.$$

Notemos que $R(\epsilon)$ está bien definida como función en un entorno abierto del $\epsilon = 0$, pues $R(0) = E_0 < 0$. Más aún, el cociente define una función racional que es cociente de dos cuadráticas y por lo tanto es diferenciable. Por otra parte, $R(\epsilon) \geq E_0$ para todo $\epsilon > 0$, por la propia definición de E_0 ; implicando (por la regla de derivación del cociente) que

$$(1.8) \quad 0 = \frac{dR}{d\epsilon} \Big|_{\epsilon=0} = \frac{d\mathcal{E}(\psi^\epsilon)}{d\epsilon} \Big|_{\epsilon=0} - E_0 \frac{d\|\psi^\epsilon\|_2^2}{d\epsilon}.$$

Veamos que la igualdad anterior se traduce en que ψ es solución de Ecuación de Schrödinger en el sentido distribucional. Expandiendo las derivadas, obtenemos que

$$\frac{d}{d\epsilon} \mathcal{E}(\psi^\epsilon) \Big|_{\epsilon=0} = 2 \left(\int_{\mathbb{R}^n} \nabla \psi(x) \cdot \nabla f(x) dx + \int_{\mathbb{R}^n} V(x) \psi(x) f(x) dx \right)$$

y

$$\frac{d}{d\epsilon} (\|\psi^\epsilon\|_2^2) \Big|_{\epsilon=0} = 2 \int_{\mathbb{R}^n} \psi(x) f(x) dx.$$

Por la Igualdad 1.8, conseguimos que

$$\int_{\mathbb{R}^n} \nabla \psi(x) \cdot \nabla f(x) dx + \int_{\mathbb{R}^n} V(x) \psi(x) f(x) dx = \int_{\mathbb{R}^n} \psi(x) f(x) dx,$$

lo cual es precisamente la afirmación de que ψ verifica la ecuación en el sentido distribucional. ■

El resultado anterior puede extenderse a los niveles de energía *superiores*. En efecto, podemos replicar el argumento del teorema anterior inductivamente para conseguir una sucesión $E_0 \leq E_1 \leq \dots < \infty$ de autovalores cuyos autoespacios asociados son de dimensión finita. Más aún, en el Capítulo 11 de [LL01] puede encontrarse la demostración de un teorema de unicidad y un corolario que dice que para potenciales acotados las soluciones no negativas son precisamente las del estado fundamental (es decir, las del menor autovalor).

1.4. El átomo de hidrógeno

Para concluir, veremos un caso en concreto en el cual estamos en condiciones de aplicar el Teorema 1.7.

Observación 1.9. Si $V: \mathbb{R}^3 \setminus \{0\} \rightarrow \mathbb{R}$ es la función $V(x) = -\frac{1}{|x|}$, entonces si $x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$

$$V(x) = -\frac{1}{|x|} \chi_{\{|x|<1\}} - \frac{1}{|x|} \chi_{\{|x|\geq 1\}}.$$

De esta forma, se tiene que $V \in L^{3/2}(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$ y, además, V decae en infinito. Esto implica que V es un potencial sobre el cual se pueden aplicar las conclusiones del Lema 1.4.

El potencial anterior es uno de los más relevantes para la teoría Cuántica. Motivado por el postulado de Coloumb, este potencial radial representa la fuerza eléctrica ejercida por una carga puntual centrada en el origen y es utilizada para modelar la función potencial asociada a la Ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno.

Observación 1.10. Consideremos $\psi_0: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ dada, para cada $x \in \mathbb{R}^3$, por

$$\psi_0(x) = e^{-\frac{1}{2}|x|}.$$

Es claro que $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}^3) \cap L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^3)$. Además, como la función es $C^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$, es claro que que su derivada distribucional, para cada $i = 1, 2, 3$, coincide con la fórmula de la derivada usual:

$$\frac{dV}{dx_i}(x) = \frac{-\psi_0(x)}{2} \frac{x_i}{|x|}.$$

De hecho, se tiene la siguiente desigualdad

$$\left| \frac{dV}{dx_i}(x) \right| = \frac{|\psi_0(x)|}{2} \frac{|x_i|}{|x|} \leq \frac{|\psi_0(x)|}{2},$$

de modo tal que $\psi_0 \in H^1(\mathbb{R}^3)$. Integrando sobre $x \neq 0$ y utilizando la formula de integración por partes, es directo verificar que ψ_0 es solución débil del problema

$$-\Delta \psi_0(x) - \frac{\psi_0(x)}{|x|} = \frac{-1}{4} \psi_0(x).$$

Además, utilizando coordenadas esféricas se sigue que

$$\int_{\mathbb{R}^3} \psi_0(x)^2 = \int_{\mathbb{R}^3} e^{-|x|} = 8\pi.$$

En consecuencia, tenemos que $\frac{\psi_0}{\sqrt{8\pi}}$ es autovector de la Ecuación de Schrödinger de autovalor

$$E_0 = \frac{-1}{4} < 0.$$

La observación exhibe un elemento de $H^1(\mathbb{R}^3)$ con norma $L^2(\mathbb{R}^3)$ unitaria para el cual su energía total es negativa. De esta forma, el estado fundamental de energía para la Ecuación de Schrödinger del átomo de hidrógeno debe ser negativo y por ende obtenemos el siguiente resultado:

Teorema 1.11. El Átomo de Hidrógeno asociado a la Ecuación de Schrödinger de potencial $V: \mathbb{R}^3 \setminus \{0\} \rightarrow \mathbb{R}$ dado por $V(x) = -\frac{1}{|x|}$ admite un estado fundamental (ψ_0, E_0) , con $\psi_0 \in H^1(\mathbb{R}^3)$ y $E_0 \leq \frac{-1}{4}$, que verifican la siguiente ecuación en el sentido distribucional:

$$-\Delta \psi_0 - \frac{\psi_0(x)}{|x|} = E_0 \psi_0(x).$$

■

De hecho, utilizando un cambio de variables a esféricas y mediante resultados previos de Teoría de Representaciones de grupos de Lie, es posible conocer el espectro total del Átomo de Hidrógeno. En efecto, el autovalor $E_0 = -\frac{1}{4}$ resulta el de menor energía, y el anterior es precisamente el estado fundamental. Incluimos el enunciado del siguiente teorema² por completitud:

Teorema 1.12 (Átomo de Hidrógeno 18.3 [Hal13]). El espectro negativo del operador diferencial asociado a la Ecuación de Schrödinger de potencial $V : \mathbb{R}^3 \setminus \{0\} \rightarrow \mathbb{R}$ dado por $V(x) = -\frac{1}{|x|}$ es una sucesión $\{E_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ dada, para cada $n \in \mathbb{N}$, por

$$E_n = \frac{-1}{4n^2}.$$

Más aún, cada E_n es un autovalor con multiplicidad n^2 .

Un aspecto central de la Teoría Cuántica se basa en utilizar a las funciones de onda como funciones de densidad de probabilidad para la posición electrónica. Conocer explícitamente las funciones de onda para un sistema atómico resulta inviable al aumentar la cantidad de protones y electrones. El Átomo de Hidrógeno es uno de los pocos sistemas del cual tenemos información completa y, a partir de él, fue que desarrollamos las principales aproximaciones, teorías o analogías para extrapolar información física sobre otros sistemas. En particular, fue fundamental en visualizar y comprender cómo se distribuye la *densidad electrónica* de un sistema atómico y para predecir en qué secciones del espacio es más probable encontrar un electrón. Los científicos del siglo XX y XXI se encontraron con la sorprendente noticia de que sencillos modelos computacionales³ o aproximaciones burdas basadas en las expresiones como la de la Observación 1.10, pueden explicar, *incluso*, el enlace químico entre moléculas de gran tamaño y relevancia biológica!

²La demostración del teorema da, de hecho, una fórmula explícita para computar los autovectores asociados a cada autovalor del operador diferencial de la Ecuación de Schrödinger. Decidimos no incluirla para evitar introducir más notación, pero puede encontrarse en el Capítulo 18 de [Hal13].

³Un ejemplo (posiblemente el más conocido) es el método de Hartree-Fock [Löw55], que plantea de manera iterativa utilizar como punto de partida estas funciones de onda para realizar cálculos computacionales de estructura electrónica.

Potenciales confinantes

2.1. Un espacio de Hilbert adecuado

A lo largo de este capítulo, trabajaremos con una función potencial no negativa $V: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$ medible con la propiedad de que $V(x) \rightarrow \infty$ cuando $|x| \rightarrow \infty$. En la literatura, un tal potencial se conoce como **confinante**. Inspirados por la formulación débil del capítulo anterior, buscamos trabajar en un subespacio de $H^1(\mathbb{R}^n)$ de funciones $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ tales que $V(x)f^2(x) \in L^1(\mathbb{R}^n)$. De esta forma, tenemos la siguiente definición

Definición 2.1. Sea $V: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$ medible tal que $V(x) \rightarrow \infty$ cuando $|x| \rightarrow \infty$. Definimos el espacio de Hilbert

$$H_V(\mathbb{R}^n) := \{f \in H^1(\mathbb{R}^n) : V(x)f^2(x) \in L^1(\mathbb{R}^n)\} = H^1(\mathbb{R}^n) \cap L_V^2(\mathbb{R}^n),$$

dotado de la norma inducida por el producto interno

$$\langle f, g \rangle := \int_{\mathbb{R}^n} \nabla f(x) \cdot \nabla g(x) dx + \int_{\mathbb{R}^n} V(x)f(x)g(x) dx$$

Una sencilla verificación muestra que $H_V(\mathbb{R}^n)$ es completo y por lo tanto resulta efectivamente un espacio de Hilbert con el producto interno anterior. El objetivo para lo que sigue es ver que, bajo ciertas hipótesis de la función potencial, la inclusión $H_V(\mathbb{R}^n) \hookrightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$ es un operador compacto, para así poder definir, mediante el uso del teorema de Lax-Milgram, un operador diferencial compacto y autoadjunto adecuado. Para ello, necesitaremos dos lemas de Análisis Real:

Lema 2.2. Sea $(f_k)_{k \in \mathbb{N}} \subseteq H^1(\mathbb{R}^n)$ una sucesión acotada. Entonces, existe una subsucesión $(f_{k_j})_{j \in \mathbb{N}}$ y $f \in L_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}^n)$ tal que para todo $r > 0$ vale que

$$f_{k_j} \rightarrow f \quad \text{en } L^2(B_r(0)).$$

DEMOSTRACIÓN. Por el Teorema de Rellich-Kondrachov (Capítulo 5 de [Eva22]), junto con el teorema de Extensión (Sección 5.4 [Eva22]), la sucesión de funciones debe admitir una subsucesión convergente a alguna función en $L^2(U)$, para cualquier abierto $U \subseteq \mathbb{R}^n$ con frontera de clase C^1 . De esta forma, consideremos $\{k_j^1\}_{j \in \mathbb{N}} \subseteq \mathbb{N}$ una sucesión estrictamente creciente de naturales y $f^1 \in L^2(B_1(0))$ tal que

$$f_{k_j^1} \rightarrow f^1 \quad \text{en } L^2(B_1(0)).$$

Para la sucesión anterior, nuevamente podemos considerar una subsucesión infinita $\{k_j^2\}_{j \in \mathbb{N}} \subseteq \{k_j^1\}_{j \in \mathbb{N}}$ junto a una función $f^2 \in L^2(B_2(0))$ tal que

$$f_{k_j^2} \rightarrow f^2 \quad \text{en } L^2(B_2(0)).$$

Por unicidad del límite, debe ser que en casi todo punto

$$f^2_{|_{B_1(0)}} = f^1.$$

Inductivamente, conseguimos una sucesión $\{k_j^{m+1}\}_{j \in \mathbb{N}} \subseteq \{k_j^m\}_{j \in \mathbb{N}}$ infinita y una función $f^{m+1} \in L^2(B_{m+1}(0))$ para la cual

$$f_{k_j^{m+1}} \rightarrow f^{m+1} \text{ en } L^2(B_{m+1}(0)),$$

y que coincide con f^m en $L^2(B_m(0))$. Definimos entonces

$$f(x) := f^m(x), \text{ si } x \in B_m(0).$$

Notar que la f está bien definida en casi todo punto como función pues no depende de la bola en que elijamos al punto. A su vez, todo compacto está contenido en una bola centrada en el origen, de donde se sigue que $f \in L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n)$. Consideremos la sucesión estrictamente creciente de naturales $\{k_j\}_{j \in \mathbb{N}} \subseteq \mathbb{N}$ dada diagonalmente por $k_j = k_j^j$. Para cada $m \in \mathbb{N}$, es claro que $\{k_j\}_{j \geq m} \subseteq \{k_j^m\}_{j \in \mathbb{N}}$. De esta forma, el límite de la subsucesión en $L^2(B_m(0))$ debe coincidir con el de $(f_{k_j^m})_{j \in \mathbb{N}}$ y por lo tanto se tiene que

$$f_{k_j} \rightarrow f^m \text{ en } L^2(B_m(0)).$$

En consecuencia, para todo $r > 0$ tenemos que $f_{k_j} \rightarrow f$ en $L^2(B_r(0))$, pues la bola $B_r(0)$ está contenida en alguna de radio entero. ■

De manera análoga a la demostración anterior, se puede probar el siguiente lema:

Lema 2.3. Sea $(f_k)_{k \in \mathbb{N}}$ una sucesión de funciones en $L^2(\mathbb{R}^n)$ y $f \in L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n)$ tal que para todo $r > 0$ vale que

$$f_k \rightarrow f \text{ en } L^2(B_r(0)).$$

Entonces existe una subsucesión $(f_{k_j})_{j \in \mathbb{N}}$ que converge en casi todo punto a f .

DEMOSTRACIÓN. Sabemos, como consecuencia de la Desigualdad de Chebyshev, que en cada bola la sucesión admite alguna subsucesión que converge en casi todo punto a f . Construyamos, una vez más, diagonalmente la subsucesión del enunciado. Inductivamente, podemos conseguir, para cada $m \in \mathbb{N}$ subsucesiones infinitas $\{k_j^m\}_{j \in \mathbb{N}}$ con la propiedad de que

$$\{k_j^{m+1}\}_{j \in \mathbb{N}} \subseteq \{k_j^m\}_{j \in \mathbb{N}}$$

y que $f_{k_j^m} \xrightarrow{\text{ctp}} f$ en $B_m(0)$. Definiendo la subsucesión diagonal $k_j = k_j^j$, y como la unión numerable de conjuntos de medida cero tiene medida cero, se sigue que

$$f_{k_j} \xrightarrow{\text{ctp}} f,$$

pues todo $x \in \mathbb{R}^n$ pertenece a alguna bola de radio entero. ■

2.2. Análisis espectral

Antes de probar el primer resultado de interés, vale la pena hacer la siguiente observación. Por la propia naturaleza de la Ecuación de Schrödinger, resolver el problema de autovectores y autovalores para $V(x) \geq 0$ es equivalente a resolver el siguiente problema de autovectores y autovalores:

$$-\Delta\psi(x) + (V(x) + 1)\psi(x) = E\psi(x).$$

Esto dice que, sin pérdida de generalidad, podemos asumir que la función potencial $V(x) \geq 1$ para todo $x \in \mathbb{R}^n$. De esta forma, demostremos el siguiente teorema:

Teorema 2.4. Sea $V: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 1}$ medible tal que $V(x) \rightarrow \infty$ cuando $|x| \rightarrow \infty$. Entonces la inclusión $H_V(\mathbb{R}^n) \hookrightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$ es un operador compacto.

DEMOSTRACIÓN. Comencemos por ver que la inclusión $H_V(\mathbb{R}^n) \hookrightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$ es un operador acotado. Para ello, para cada $f \in H_V(\mathbb{R}^n)$ resta observar que, como $V \geq 1$, vale la siguiente desigualdad:

$$\int_{\mathbb{R}^n} |f(x)|^2 \leq \|f\|_{H^1(\mathbb{R}^n)}^2 \leq \int_{\mathbb{R}^n} |\nabla f(x)|^2 + \int_{\mathbb{R}^n} V(x)|f(x)|^2 dx = \|f\|_{H_V(\mathbb{R}^n)}^2.$$

Para ver la compacidad, basta con probar que si $(f_k)_{k \in \mathbb{N}} \subseteq H_V(\mathbb{R}^n)$ es una sucesión acotada en $H_V(\mathbb{R}^n)$, entonces admite una subsucesión acotada en $L^2(\mathbb{R}^n)$. Sea $C > 0$ tal que $\|f_k\| \leq C$ para todo $k \in \mathbb{N}$. En particular, esto implica que $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ es acotada en $H^1(\mathbb{R}^n)$ y, por el Lema 2.2, existen una subsucesión $(f_{k_j})_{j \in \mathbb{N}}$ y $f \in L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n)$ tales que $f_{k_j} \rightarrow f$ en $L^2(B_r(0))$ para todo $r > 0$. Veamos que, como $(f_k)_{k \in \mathbb{N}}$ es acotada en $H_V(\mathbb{R}^n)$, se tiene que $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ y, de hecho, la subsucesión converge en $L^2(\mathbb{R}^n)$ a f . Como $(f_{k_j})_{j \in \mathbb{N}}$ es una subsucesión en $L^2(\mathbb{R}^n)$ que converge localmente a f en norma 2, por el Lema 2.3 existe $(f_{k_{j_l}})_{l \in \mathbb{N}}$ tal que $f_{k_{j_l}} \rightarrow f$ en casi todo punto de $\mathbb{R}^n$. Por el Lema de Fatou, tenemos una desigualdad

$$\int_{\mathbb{R}^n} |f|^2 \leq \liminf_{l \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^n} |f_{k_{j_l}}|^2 \leq \liminf_{l \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^n} V(x)|f_{k_{j_l}}(x)|^2 \leq C,$$

demostrando que $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$. Por otra parte, para ver que la subsucesión converge en $L^2(\mathbb{R}^n)$ a f , fijemos $\epsilon > 0$ y consideremos $R_0 > 0$ tal que valgan simultáneamente que

$$\int_{\mathbb{R}^n \setminus B_{R_0}(0)} |f|^2 < \frac{\epsilon}{6} \quad \text{y} \quad V(x) > \frac{6C}{\epsilon},$$

para todo $|x| > R_0$. Usando la desigualdad $(a - b)^2 \leq 2(a + b)$, se tiene que

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^n} |f - f_{k_j}|^2 &\leq \int_{B_{R_0}(0)} |f - f_{k_j}|^2 + 2 \int_{\mathbb{R}^n \setminus B_{R_0}(0)} |f|^2 + 2 \int_{\mathbb{R}^n \setminus B_{R_0}(0)} |f_{k_j}|^2 \\ &\leq \int_{B_{R_0}(0)} |f - f_{k_j}|^2 + \frac{\epsilon}{3} + \frac{\epsilon}{3C} \int_{\mathbb{R}^n \setminus B_{R_0}(0)} V(x)|f_{k_j}|^2 \\ &\leq \int_{B_{R_0}(0)} |f - f_{k_j}|^2 + \frac{2\epsilon}{3}. \end{aligned}$$

Finalmente, como $f_{k_j} \rightarrow f$ en $L^2(B_{R_0}(0))$, tomemos $j_0 \in \mathbb{N}$ tal que para todo $j \geq j_0$ valga que

$$\int_{B_{R_0}(0)} |f - f_{k_j}|^2 < \frac{\epsilon}{3}.$$

De esta forma, para cada $j \geq j_0$ obtenemos que

$$\int_{\mathbb{R}^n} |f - f_{k_j}|^2 < \epsilon$$

y por lo tanto concluimos que $f_{k_j} \rightarrow f$ en $L^2(\mathbb{R}^n)$. Esto muestra la compacidad de la inclusión $H_V(\mathbb{R}^n) \hookrightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$, como queríamos. ■

Para lo que sigue, mantendremos hasta nuevo aviso la hipótesis de que $V(x) \geq 1$ para todo $x \in \mathbb{R}^n$. La estrategia de demostración será utilizar el Teorema de Lax-Milgram (6.2.1 [Eva22]) aplicado a la **forma bilineal simétrica** $B: H_V(\mathbb{R}^n) \times H_V(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathbb{R}$ dada por la siguiente formulación débil de la Ecuación de Schrödinger:

$$B[u, v] = \int_{\mathbb{R}^n} \nabla u(x) \cdot \nabla v(x) dx + \int_{\mathbb{R}^n} V(x)u(x)v(x) dx.$$

La **coercitividad** del operador se sigue inmediatamente de la siguiente igualdad:

$$B[u, u] = \int_{\mathbb{R}^n} |\nabla u|^2 + \int_{\mathbb{R}^n} Vu^2 = \|u\|_{H_V(\mathbb{R}^n)}^2.$$

Finalmente, la **continuidad** se sigue de que, para cada $u, v \in H_V(\mathbb{R}^n)$ tenemos que

$$\begin{aligned} |B[u, v]| &\leq \int_{\mathbb{R}^n} \|\nabla u\| \|\nabla v\| + \int_{\mathbb{R}^n} \sqrt{V(x)}|u(x)|\sqrt{V(x)}|v(x)| dx \\ &\leq \|\nabla u\|_2 \|\nabla v\|_2 + \|\nabla u\|_{L_V^2(\mathbb{R}^n)} \|\nabla v\|_{L_V^2(\mathbb{R}^n)} \\ &\leq (\|\nabla u\|_2 + \|\nabla u\|_{L_V^2(\mathbb{R}^n)}) (\|\nabla v\|_2 + \|\nabla v\|_{L_V^2(\mathbb{R}^n)}) \\ &= \|\nabla u\|_{H_V(\mathbb{R}^n)} \|\nabla v\|_{H_V(\mathbb{R}^n)} \end{aligned}$$

Para aplicar el Teorema de Lax-Milgram sobre B , consideramos para cada $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ el siguiente funcional:

$$\begin{aligned} \langle f, - \rangle: H_V(\mathbb{R}^n) &\rightarrow \mathbb{R} \\ u &\mapsto \int_{\mathbb{R}^n} f(x)u(x) dx, \end{aligned}$$

que resulta de norma menor o igual que $\|f\|_2$, por la desigualdad de Hölder. Más aún, define un operador lineal continuo:

$$\begin{aligned} L^2(\mathbb{R}^n) &\rightarrow H_V(\mathbb{R}^n)^* \\ f &\mapsto \langle f, - \rangle \end{aligned}$$

Como consecuencia del Teorema de Lax-Milgram y la asignación anterior, obtenemos el siguiente resultado:

Lema 2.5. Hay un operador lineal y acotado $\tilde{K}: L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow H_V(\mathbb{R}^n)$ que a cada $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ le asigna el único $u \in H_V(\mathbb{R}^n)$ tal que

$$B[u, -] = \langle f, - \rangle.$$

DEMOSTRACIÓN. La buena definición de $\tilde{K}$ se sigue del Teorema de Lax-Milgram aplicado a B y $\langle f, - \rangle$. El operador $\tilde{K}$ es lineal por la bilinealidad de B y resulta acotado pues, por la coercitividad, para cada $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ tenemos que

$$\|\tilde{K}(f)\|_{H_V(\mathbb{R}^n)}^2 \leq |B(\tilde{K}(f), \tilde{K}(f))| = |\langle f, \tilde{K}(f) \rangle| \leq \|f\|_2 \|\tilde{K}(f)\|_2.$$

Como la inclusión $H_V(\mathbb{R}^n) \hookrightarrow L_V^2(\mathbb{R}^n)$ es continua, tenemos que

$$\|\tilde{K}(f)\|_{H_V(\mathbb{R}^n)}^2 \leq \|f\|_2 \|\tilde{K}(f)\|_{H_V(\mathbb{R}^n)},$$

y por lo tanto que

$$\|\tilde{K}(f)\|_{H_V(\mathbb{R}^n)} \leq \|f\|_2,$$

probando que $\tilde{K}$ es lineal y acotado. ■

Gracias al lema anterior, podemos definir el operador $K: L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$ según el siguiente diagrama conmutativo:

$$\begin{array}{ccc} L^2(\mathbb{R}^n) & \xrightarrow{\quad K \quad} & L^2(\mathbb{R}^n) \\ & \searrow \tilde{K} \quad \nearrow & \\ & H_V(\mathbb{R}^n) & \end{array}$$

Más aún, como los operadores compactos forman un ideal, por el Teorema 2.4 resulta que K es también un operador compacto. Utilicemos esto para demostrar el teorema central de este capítulo:

Teorema 2.6. Sea $V: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ una función medible, acotada inferiormente y con la propiedad de que $V(x) \rightarrow \infty$ cuando $|x| \rightarrow \infty$. Entonces, existe una base ortonormal numerable $\{u_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ de $L^2(\mathbb{R}^n)$ de funciones en $H_V(\mathbb{R}^n)$ y una sucesión $\inf V(x) \leq E_0 \leq E_1 \leq \dots < \infty$ de autovalores de la Ecuación de Schrödinger:

$$-\Delta u_i(x) + V(x)u_i(x) = E_i u_i(x),$$

donde la igualdad anterior vale para cada $i \in \mathbb{N}$ en el sentido débil.

DEMOSTRACIÓN. Por lo visto, podemos suponer sin pérdida de generalidad que $V \geq 1$ y construir el operador compacto $K: L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$ como antes. Notar que, por el Teorema de Lax-Milgram, el operador $\tilde{K}$ es inyectivo y por lo tanto 0 no es autovalor de K . Si $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ es un autovector de K de autovalor $0 \neq E^{-1} \in \mathbb{R}$, entonces se tiene que $Ef = \tilde{K}(f)$ verifica, en sentido débil, la ecuación

$$-\Delta E^{-1}f(x) + V(x)E^{-1}f(x) = f(x).$$

En otras palabras, f es solución de la ecuación de Schrödinger para una energía E . De esta manera, para demostrar el enunciado basta ver que existe una base de $L^2(\mathbb{R}^n)$ de autovectores del operador compacto K de autovalores positivos, que, como V es acotado inferiormente, mediante la traslación verificarán lo buscado. Para esto, apelaremos al Teorema Espectral para Operadores Compactos Autoadjuntos (Capítulo IX [Con19]). En efecto, comencemos notando que, como B es simétrica, entonces para cada $f, g \in L^2(\mathbb{R}^n)$ vale que

$$\int_{\mathbb{R}^n} K(f)g = \langle g, K(f) \rangle = B[K(g), K(f)] = B[K(f), K(g)] = \langle f, K(g) \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} K(g)f.$$

Esto prueba que el operador K es autoadjunto. Finalmente, para ver que todos los autovalores son positivos resta ver que es definido positivo. En efecto, por lo mismo que antes, para cada $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$, tenemos que

$$\int_{\mathbb{R}^n} K(f)f = B[K(f), K(f)] \geq 0.$$

Aplicando el teorema espectral conseguimos una base ortonormal de $L^2(\mathbb{R}^n)$ que, por lo dicho anteriormente, consiste de una base de soluciones débiles a la Ecuación de Schrödinger. ■

Para concluir con el apartado, veamos un ejemplo de función potencial que será de interés para el próximo capítulo, y sobre el que desarrollaremos en profundidad a continuación.

Corolario 2.7 (Oscilador Armónico Cuántico). Consideremos $V: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ la función radial $V(x) = |x|^2$. Es claro que $V \geq 0$ y que $V(x) \rightarrow \infty$, cuando $|x| \rightarrow \infty$. Por el Teorema 2.6, existe una base ortonormal $\{u_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ de $L^2(\mathbb{R}^n)$ y una sucesión $0 < E_1 \leq E_2 \leq \dots < \infty$ tales que se verifica, para cada $i \in \mathbb{N}$, la Ecuación de Schrödinger en el sentido débil:

$$-\Delta u_i + |x|^2 u_i = E_i u_i.$$

Este espectro de *energía* destaca por diversos motivos. La primera, como para cualquier potencial confinante, es que los autovalores están **cuantizados**: solamente pueden tomar valores discretos. En la siguiente sección veremos experimentalmente que, precisamente, estos valores son enteros y semi-enteros y que están equiespaciados. La segunda es que la energía más baja no coincide con el mínimo del potencial (cero en este caso). Así, la energía más baja posible se denomina *energía del estado fundamental*. Finalmente, se puede demostrar que los autoespacios asociados a cada energía son de dimensión 1; es decir, un sistema cuántico asociado a este potencial tendrá autoestados que en la literatura se denominan **no degenerados**.

Oscilador armónico cuántico

El objetivo de este capítulo es poner en práctica, mediante un esquema numérico sencillo, los resultados abstractos de existencia, unicidad y carácter espectral obtenidos en los capítulos anteriores para operadores de Schrödinger. Para ello es natural elegir un potencial que cumpla dos requisitos: (i) que sea confinante (de modo que el operador tenga espectro discreto y autofunciones en espacios adecuados), y (ii) que admita soluciones exactas conocidas, de manera de poder cuantificar el error del método numérico. El ejemplo arquetípico que satisface ambas condiciones es el **oscilador armónico cuántico**, aquel que vimos en el Corolario 2.7.

3.1. Motivación física del potencial armónico

Como mencionamos, en mecánica (clásica) el potencial codifica la fuerza a la que se somete un sistema mediante su gradiente. Así, si se toma un potencial cuadrático $V(x) = |x|^2$ obtenemos una fuerza proporcional al desplazamiento:

$$F(x) = -2x,$$

Más aún, el origen $x = 0$ es un equilibrio estable y cuanto mayor es $|x|$, mayor es la intensidad con que el sistema devuelve la partícula hacia el equilibrio. Este potencial no es una elección artificial: surge como aproximación universal de cualquier potencial suave cerca de un mínimo estable. En efecto, veamos qué ocurre en el caso unidimensional. Si $V : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ es cualquier potencial suave y $x_0 \in \mathbb{R}$ es un punto de equilibrio con $V'(x_0) = 0$ y $V''(x_0) > 0$, entonces, para desplazamientos pequeños,

$$V(x) \approx V(x_0) + \frac{1}{2} V''(x_0)(x - x_0)^2,$$

y la constante $V(x_0)$ solo desplaza la energía sin afectar la ecuación de autovalores. Por ello, el oscilador armónico modela el régimen de **pequeñas oscilaciones** alrededor de un equilibrio en una gran variedad de sistemas físicos.

Es usual que en mecánica cuántica se utilice el mismo perfil de energía potencial que en el modelo clásico. En efecto, el operador diferencial asociado a la Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo se interpreta, como vimos en el primer capítulo, como la suma de un término cinético y un término potencial. Recordando que, en mecánica clásica, la elección $V(x) = x^2$ corresponde exactamente a la energía potencial de un resorte ideal (ley de Hooke), recibe entonces el nombre de oscilador armónico (cuántico) un sistema cuántico sometido a un potencial de este tipo.

En el Capítulo 11 del Libro de Brian C. Hall *Quantum Theory for Mathematicians* se puede encontrar la deducción, mediante el uso de operadores de subida y de bajada, de una fórmula explícita para los autovectores y autovalores del operador diferencial asociado a la Ecuación de

Schrödinger para un potencial armónico **unidimensional**. En efecto, las soluciones halladas presentan alta regularidad y son no degeneradas; es decir, cada autoespacio es de dimensión 1. Las mismas nos serán de utilidad para comprobar la efectividad del método numérico en consideración.

Teorema 3.1 (Chapter 11 [Hal13]). Sean $V: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ un potencial armónico de la forma $V(x) = x^2$ y, para cada $n \in \mathbb{N}$, la función

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \pi^{-1/4} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x),$$

donde H_n denota el n -ésimo polinomio de Hermite. Entonces $\{u_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ es una base ortonormal de $L^2(\mathbb{R})$ de soluciones clásicas de

$$(3.2) \quad -\frac{1}{2} \frac{d^2 u_n}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 u_n = E_n u_n,$$

para las energías $E_n = n + \frac{1}{2}$. ■

Notar que el factor $\frac{1}{2}$ en la Ecuación 3.2 no modifica las conclusiones del Teorema 2.6, pues únicamente escala por un factor 2 a las energías. Sin embargo, incluimos dicho factor en la ecuación pues esta es la forma usual¹ en la que se encuentra presentado en la literatura.

3.2. Esquema de diferencias finitas

El objetivo de esta sección es proponer un esquema de discretización para aproximar numéricamente las soluciones de la Ecuación 3.2. Para ello, proponemos, para una función $u: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $x_0 \in \mathbb{R}$ y un paso h , la discretización usual de la segunda derivada:

$$u''(x_0) \approx \frac{u(x_0 + h) - 2u(x_0) + u(x_0 - h)}{h^2}.$$

Considerando que las soluciones explícitas del Teorema 3.1 decaen rápidamente para los primeros valores de energías, en pos de lograr una aproximación razonable confinaremos la ecuación diferencial al intervalo $[-L, L]$ y utilizaremos un mallado uniforme de paso $h = 2L/N$ para un N suficientemente grande. Impondremos la condición de contorno $u(L) = u(-L) = 0$, una suposición razonable conociendo el decaimiento de las soluciones. De esta forma, discretizando la variable espacial mediante $x_0 = -L$ y $x_i = x_{i-1} + h$, para cada $1 \leq i \leq N$, obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$(\star) \quad \begin{cases} -\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{2h^2} + \frac{x_i^2}{2} u_i = E u_i, & 1 \leq i \leq N-1, \\ u_0 = 0, \\ u_N = 0. \end{cases}$$

Proposición 3.3. El error de truncado local de la discretización $(\star)$ es de orden 2 en el paso h .

DEMOSTRACIÓN. Dado $x \in \mathbb{R}$, expandamos el polinomio de Taylor de orden 4 para una solución $u: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ suficientemente regular:

$$u(x+h) = u(x) + u'(x)h + \frac{u''(x)h^2}{2} + \frac{u'''(x)h^3}{6} + o(h^4).$$

¹La naturaleza del factor $\frac{1}{2}$ proviene del factor en el término cuadrático del desarrollo de Taylor para un potencial $V(x)$ arbitrario; haciendo énfasis en la relevancia de la aproximación armónica.

y además

$$u(x-h) = u(x) - u'(x)h + \frac{u''(x)h^2}{2} - \frac{u'''(x)h^3}{6} + o(h^4).$$

En consecuencia, se tiene que el error de truncado local τ_i viene dado por

$$\tau_i = -\frac{u(x_i+h) - 2u(x_i) + u(x_i-h)}{2h^2} + \frac{x_i^2}{2}u(x_i) - Eu(x_i) = o(h^2).$$

■

Ahora sí, formulemos matricialmente el problema de autovectores y autovalores para luego resolver numéricamente. En efecto, buscamos un vector $u = (0, u_1, \dots, u_{N-1}, 0)$ y un número real $E \in \mathbb{R}$ que satisfagan la siguiente igualdad matricial:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{h^2} + \frac{x_1^2}{2} & -\frac{1}{2h^2} & 0 & \cdots & 0 \\ -\frac{1}{2h^2} & \frac{1}{h^2} + \frac{x_2^2}{2} & -\frac{1}{2h^2} & \ddots & \vdots \\ 0 & -\frac{1}{2h^2} & \frac{1}{h^2} + \frac{x_3^2}{2} & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -\frac{1}{2h^2} \\ 0 & \cdots & 0 & -\frac{1}{2h^2} & \frac{1}{h^2} + \frac{x_{N-1}^2}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{N-1} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{N-1} \end{pmatrix}.$$

Utilizaremos un código de Python (Ver Anexo 3.4) para hallar los autovectores y autovalores de la matriz anterior, para un L y N suficientemente grandes, mediante la ayuda de la rutina `SCIPY.LINALG.EIGH_TRIDIAGONAL` para matrices tridiagonales. Recordar que la base de $L^2(\mathbb{R})$ del Teorema 3.1 es ortonormal y, por lo tanto, para lograr una comparación precisa debemos normalizar (con la norma de $L^2(\mathbb{R})$) los vectores que son solución del problema discreto. No obstante, la constante de normalización para una solución $u = (u_1, u_2, \dots, u_{N-1})$ no coincide con la norma 2 de vectores, y de esta forma debemos aproximar mediante algún método de cuadratura la norma de $L^2(\mathbb{R})$. Para ello, tras obtener una solución, proponemos normalizar utilizando la suma de Riemann asociada al paso espacial h elegido:

$$\|u\|_{L^2(\mathbb{R})} \approx \sum_{i=1}^{N-1} u_i^2 h.$$

3.3. Resultados experimentales

En primer lugar, el Gráfico 3.1 muestra las primeras 7 soluciones obtenidas numéricamente para una caja de parámetro $L = 6$ y una cantidad de puntos de discretización $N = 1000$. Tomamos la convención de graficar las soluciones desplazadas por la energía correspondiente, una práctica usual en la literatura. A su vez, utilizamos un factor de escala para la norma de las soluciones de $\frac{1}{2}$ para evitar la superposición y correcta visualización de las funciones.

Si bien la función de onda $\psi(x)$ solución de la Ecuación de Schrödinger no porta significado físico, uno de los postulados de la Mecánica Cuántica dice que la densidad de probabilidad de encontrar una partícula en un dado punto del espacio viene dada por $|\psi(x)|^2$. Por esto, tiene mayor relevancia estudiar numérica y gráficamente el módulo al cuadrado de las soluciones. Precisamente, el Gráfico 3.2 muestra, sin ningún factor de escala, las soluciones normalizadas y cuáles son las regiones del espacio donde es más probable encontrar una partícula sometida a un potencial armónico cuántico.

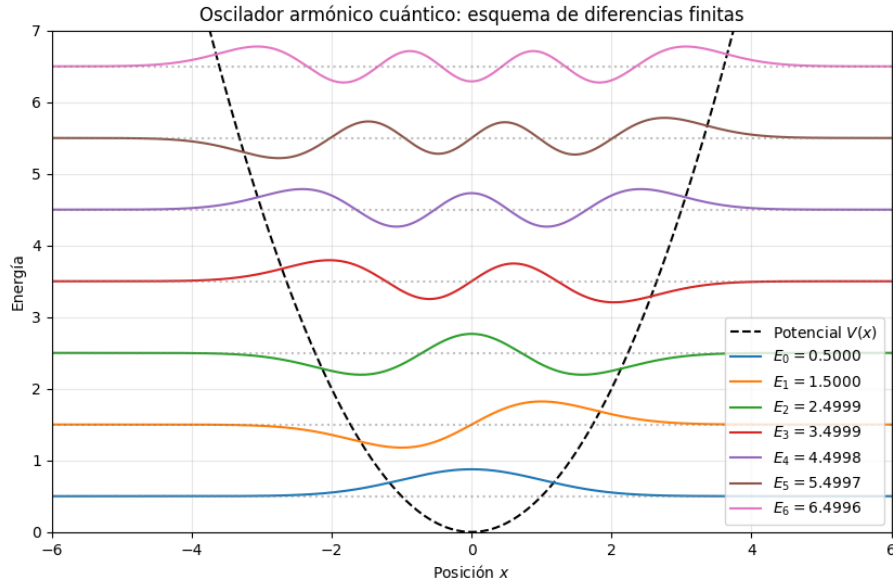


FIGURA 3.1. Gráfico de las primeras 7 soluciones obtenidas numéricamente.

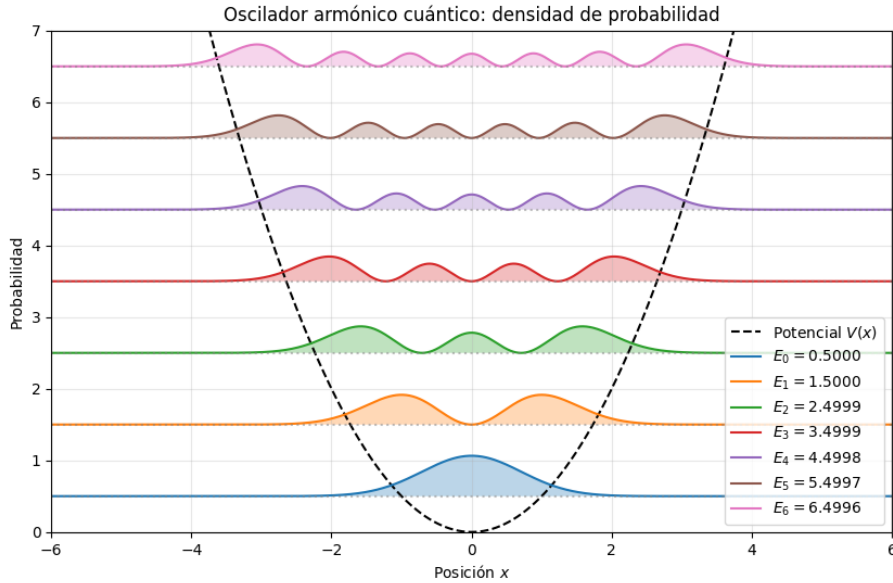


FIGURA 3.2. Gráfico de las primeras 7 densidades de probabilidad obtenidas numéricamente.

Un primer aspecto cualitativo que se observa es que las soluciones impares se anulan en el origen, de modo que hay baja probabilidad de encontrar una partícula en entornos de $x = 0$. Como el potencial está centrado en $x = 0$, el origen de coordenadas representa el punto de equilibrio, donde la partícula no está sometida a ninguna fuerza (en la interpretación clásica del potencial). Finalmente, se observa que las regiones de mayor probabilidad para encontrar

a una tal partícula son en las campanas exteriores de la solución, donde el potencial es lo mayor posible dentro del rango de *oscilación* asociado a cada energía. Una manera (física) de interpretar esto es que, para un dado estado de energía E_n , el sistema adquiere cierta energía potencial que lo confina dentro de la caja $[-\sqrt{E_n}, \sqrt{E_n}]$, como si estos fueran los extremos permitidos de un péndulo que oscila. La mayor densidad de probabilidad en los extremos tiene un correlato con un péndulo oscilando que transcurre la mayor parte de su tiempo en los extremos.

Para comparar con las energías esperadas $E_n = n + \frac{1}{2}$, graficamos las primeras 100 energías calculadas junto a la función lineal de las energías exactas. El Gráfico 3.3 muestra que para aproximadamente los primeros 30 estados energéticos la aproximación numérica es razonable. No obstante, como la discretización obtiene una base de autovectores discretos de un espacio vectorial de dimensión finita, es esperable que para valores grandes de N se pierda la precisión. A su vez, el número 30 donde comienza a perderse la precisión no es casualidad. De hecho, conociendo que las energías $E_n \approx n$, es de esperar que las soluciones tengan soporte en aproximadamente $[-\sqrt{n}, \sqrt{n}]$. Como la caja elegida para la discretización fue $[-6, 6]$, ninguna solución para $n \geq 36$ podría ser precisa pues parte de la densidad de probabilidad se perdería. En conclusión, para asegurarse mayor precisión en los niveles altos de energía, debemos aumentar simultáneamente la variable espacial L como el número de puntos en la discretización N .

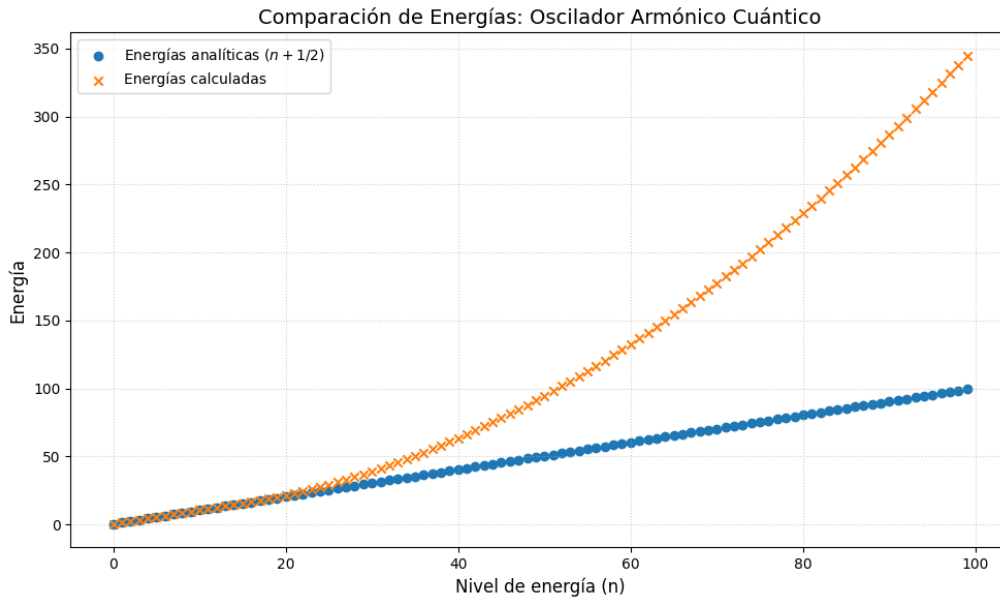


FIGURA 3.3. Gráfico de las energías exactas y las obtenidas numéricamente.

Finalmente, en los Gráficos 3.4, 3.5, 3.6, y 3.7 vemos una superposición entre las soluciones numéricas y las exactas dadas por el Teorema 3.1. Se observa un alto nivel de precisión para estas primeras soluciones, lo cual evidencia la efectividad de la discretización elegida. La única salvedad que debemos realizar es que tanto en el gráfico para $n = 2$ como para $n = 8$ observamos que la solución explícita tiene un signo cambiado respecto a la numérica. Esto se debe a que el autoespacio de soluciones asociado a una dada energía E_n es de dimensión 1.

En concreto, hay exactamente dos posibilidades para autovectores de autovalor E_n y de norma 1, que resultan virtualmente indistinguibles para el proceso computacional. Esto refuerza el hecho de que la magnitud física que sí debemos tener en cuenta es la densidad de probabilidad $|\psi(x)|^2$, en donde el signo (o, eventualmente, la fase) de la función de onda no modifica las conclusiones realizadas sobre el sistema.

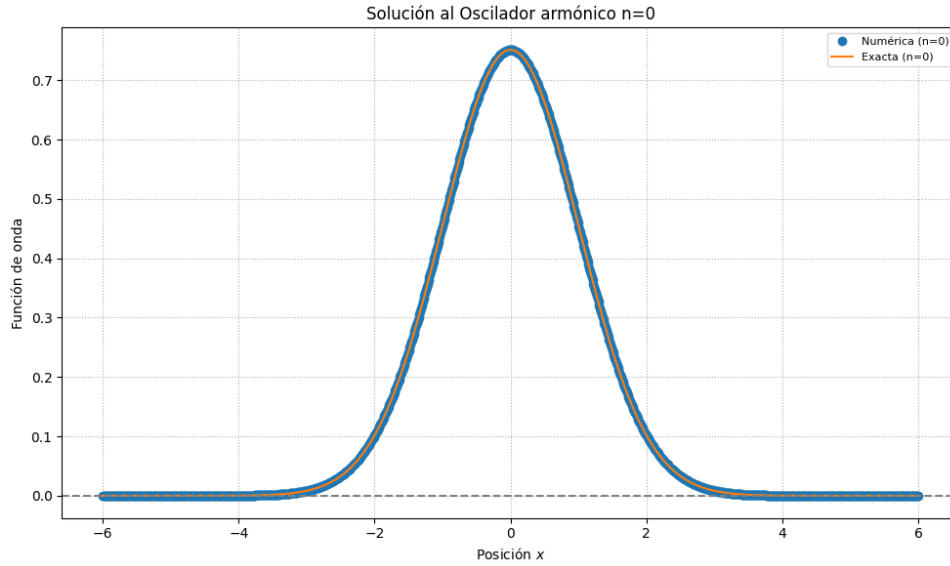


FIGURA 3.4. Gráfico de las soluciones exactas y numéricas para $n = 0$.

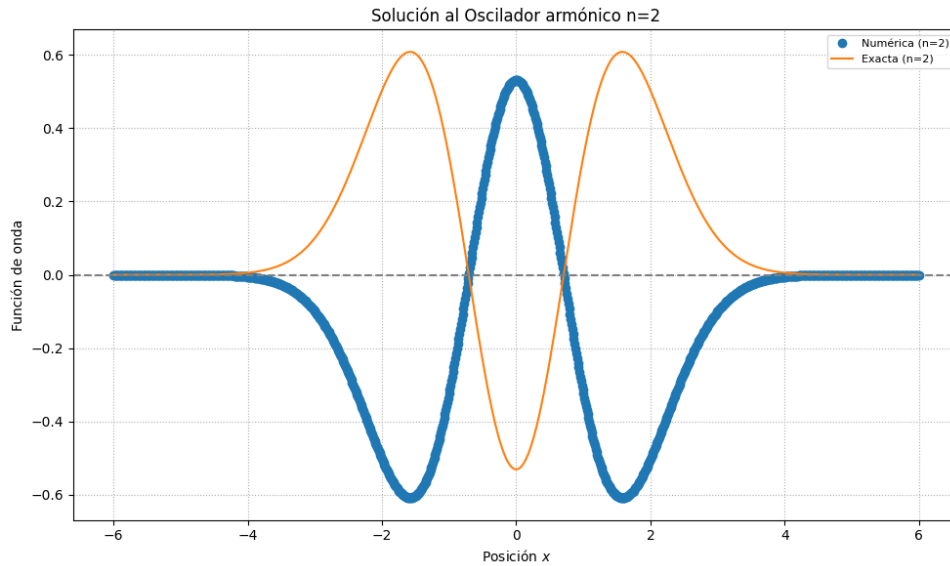
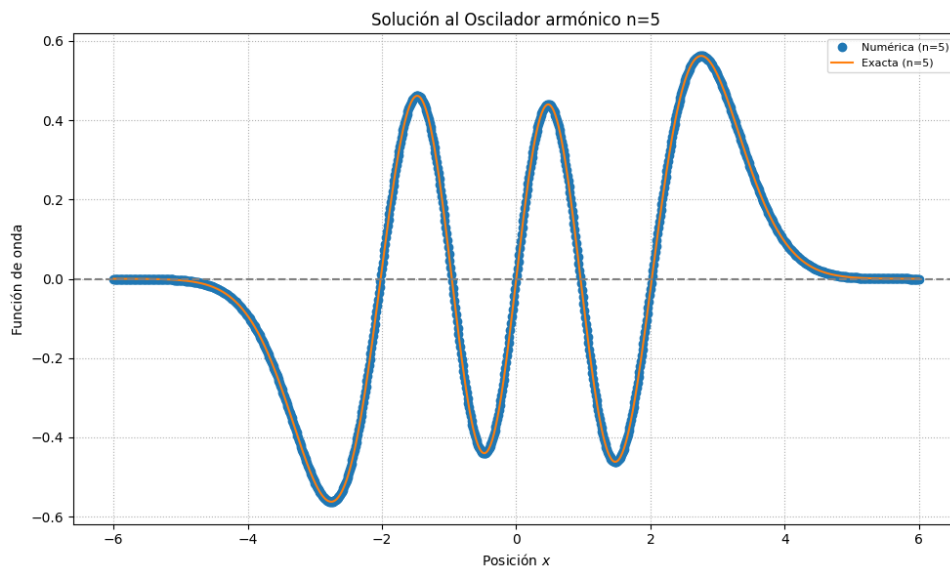
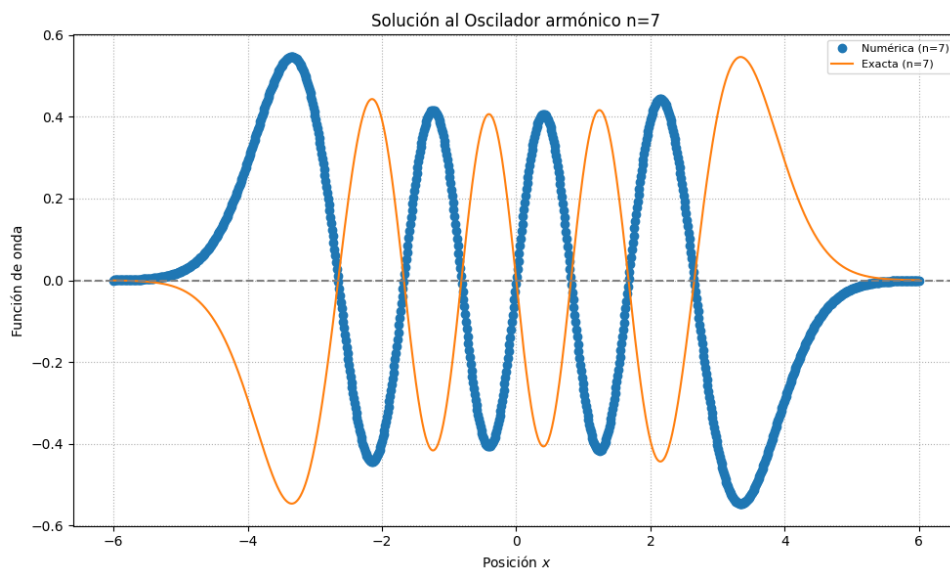


FIGURA 3.5. Gráfico de las soluciones exactas y numéricas para $n = 2$.

FIGURA 3.6. Gráfico de las soluciones exactas y numéricas para $n = 5$.FIGURA 3.7. Gráfico de las soluciones exactas y numéricas para $n = 8$.

3.4. Anexo: códigos de Python

Las librerías utilizadas vienen dadas por el siguiente preámbulo:

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import math as math
from scipy.linalg import eigh_tridiagonal
```

Solución numérica al problema de autovectores y autovalores. El siguiente código resuelve y grafica el sistema de ecuaciones dado por (*). Se propone un intervalo espacial con parámetro $L = 6$, centrado en 0 y una cantidad de puntos de discretización $N = 1000$.

```
# Resolvemos el oscilador armonico a-dimensional
#  $(-\Delta u)/2 + x^2 u/2 = E u$ 

def oscilador(N, L):
    # N = cantidad de puntos
    # L = largo de la caja
    x = np.linspace(-L, L, N)
    h = x[1] - x[0]
    # Definimos el potencial
    V = 0.5 * x**2
    # Definimos la diagonal
    d = (1/(h**2)) + V
    # Diagonales no principales
    e = -1/(2*(h**2)) * np.ones(N-1)
    # Encontramos autovectores y autovals con scipy
    autovals, autovec = eigh_tridiagonal(d, e)

    return x, autovals, autovec.T

N = 1000
L = 6
x, E, psi = oscilador(N, L)

psi_normalizada = []
for n in range(len(psi)):
    # Normalizamos la solución aproximando la integral
    norm_factor = np.sqrt(np.sum(psi[n]**2) * (x[1]-x[0]))
    psi_normalizada.append(psi[n] / norm_factor)

plt.figure(figsize=(10, 6))

# Graficamos el potencial
plt.plot(x, 0.5 * x**2, 'k--', label="Potencial  $V(x)$ ")

# Graficamos los primeros autoestados
estados = 7

for n in range(estados):
    # Graficamos energías
    scale = 0.5 # factor de escala para un gráfico adecuado
    plt.plot(x, E[n] + scale * psi_normalizada[n],
             label=f" $E_{\{n\}}=\{E[n]:.4f\}$ ")
    plt.axhline(E[n], color='gray', linestyle=':', alpha=0.5)
```

```
plt.title("Oscilador armónico cuántico: esquema de diferencias finitas")
plt.xlabel("Posición  $x$ ")
plt.ylabel("Energía")
plt.ylim(0, estados )
plt.xlim(-L, L)
plt.legend(loc='lower right')
plt.grid(True, alpha=0.3)
plt.show()
```

Densidades de probabilidad asociadas al sistema. Incluye un gráfico de las densidades de probabilidad sin ningún factor de escala.

```
# Graficamos las densidades de probabilidad
plt.figure(figsize=(10, 6))

# Graficamos el potencial
plt.plot(x, 0.5 * x**2, 'k--', label="Potencial  $V(x)$ ")

# Graficamos los primeros autoestados
estados = 7

for n in range(estados):
    # Graficamos energías
    # Sin factor de escala
    plt.plot(x, E[n]+(psi_normalizada[n])**2,
             label=f" $E_{\{n\}}=\{E[n]:.4f\}$ ")
    plt.axhline(E[n], color='gray', linestyle=':', alpha=0.5)
    plt.fill_between(x, E[n], E[n]+(psi_normalizada[n])**2, alpha=0.3)

plt.title("Oscilador armónico cuántico: densidad de probabilidad")
plt.xlabel("Posición  $x$ ")
plt.ylabel("Probabilidad")
plt.ylim(0, estados )
plt.xlim(-L, L)
plt.legend(loc='lower right')
plt.grid(True, alpha=0.3)
plt.show()
```

Aproximación de la energía. Incluye un gráfico que muestra la precisión en el cálculo de los autovalores en comparación a los reales.

```
# Comparación de energías reales versus calculadas
E_real = [n + 0.5 for n in range(100)]
naturales = np.arange(100)

plt.figure(figsize=(10, 6))

# Energías analíticas
plt.scatter(naturales, E_real[:len(naturales)],
```

```

label="Energías analíticas ( $n + 1/2$ )",marker='o')

# Energías calculadas
plt.scatter(naturales[:len(naturales)],E[:len(naturales)],
label="Energías calculadas",marker='x')

plt.title("Comparación de Energías: Oscilador Armónico Cuántico", fontsize=14)
plt.xlabel("Nivel de energía (n)", fontsize=12)
plt.ylabel("Energía", fontsize=12)
plt.legend(fontsize=10)
plt.grid(True, linestyle=':', alpha=0.6)
plt.tight_layout()
plt.show()

```

Comparación con soluciones exactas. Se grafican simultáneamente las soluciones numéricas y exactas para $1 \leq N \leq 10$, Se utiliza un módulo adicional de Scipy para graficar los polinomios de Hermite.

```

# Comparación con soluciones reales
from scipy.special import hermite

def solucion(n,x):
    return(
        (1/np.sqrt((2**n)*math.factorial(n)))*(np.pi)**(-1/4)*
        np.exp(-(x**2)/2)*hermite(n)(x)
    )

algunos_estados = [n for n in range(10)]
for n in algunos_estados:
    plt.figure(figsize=(10, 6))

    # Solución numérica
    psi_numerica = psi_normalizada[n]
    plt.plot(x, psi_numerica, 'o', label=f"Numérica (n={n})")

    # Solucion analítica
    psi_analitica = solucion(n, x)
    plt.plot(x, psi_analitica, '-', label=f"Exacta (n={n})")

    plt.title(f"Solución al Oscilador armónico n={n}", fontsize=12)
    plt.xlabel("Posición  $x$ ", fontsize=10)
    plt.ylabel("Función de onda", fontsize=10)
    plt.legend(fontsize=8, loc='upper right')
    plt.grid(True, linestyle=':')
    plt.axhline(0, color='gray', linestyle='--')
    plt.tight_layout()
    plt.show()

```

Bibliografia

- [Con19] John B Conway. *A course in functional analysis*. Springer, 2019.
- [Eva22] Lawrence C Evans. *Partial differential equations*, volume 19. American mathematical society, 2022.
- [Hal13] Brian C Hall. *Quantum theory for mathematicians*. Springer, 2013.
- [LL01] Elliott H Lieb and Michael Loss. *Analysis*, volume 14. American Mathematical Soc., 2001.
- [Löw55] Per-Olov Löwdin. Quantum theory of many-particle systems. ii. study of the ordinary hartree-fock approximation. *Physical Review*, 97(6):1490, 1955.
- [Zei99] Anton Zeilinger. Experiment and the foundations of quantum physics. *Reviews of Modern Physics*, 71(2):S288, 1999.