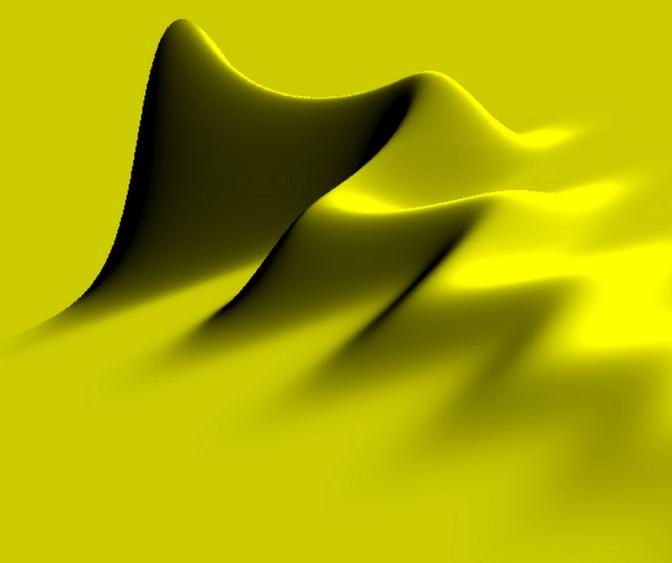


***Estudio de procesos cuánticos  
disipativos mediante ecuaciones  
en derivadas parciales en la  
formulación de Schrödinger***



***Jesús Montejo Gámez***

***Tesis doctoral  
febrero 2011***



Jesús Montejo Gámez

**Estudio de procesos cuánticos  
disipativos mediante ecuaciones  
en derivadas parciales en la  
formulación de Schrödinger**

Tesis doctoral



La presente memoria, titulada “Estudio de procesos cuánticos disipativos mediante ecuaciones en derivadas parciales en la formulación de Schrödinger” ha sido realizada bajo la dirección del doctor José Luis López Fernández del Departamento de Matemática Aplicada de la Universidad de Granada, para obtener el título de Doctor por la Universidad de Granada.

V.B. El director

El doctorando

Fdo: José Luis López Fernández

Fdo: Jesús Montejo Gámez



**Universidad de Granada**



*A MIS PADRES*



Quiero expresar desde estas líneas mi más profundo agradecimiento a aquellas personas que me han apoyado en la elaboración de esta tesis doctoral.

Muchas gracias a mis padres por dedicar su vida a hacer que la mía sea más fácil, dándome siempre apoyo, amor y comprensión. Gracias también a mis hermanos por estar siempre ahí y constituir, cada uno a su manera, dos referencias en la vida.

Muchas gracias a mi director de tesis por iniciarme en el mundo de la investigación, por estar cuando lo he necesitado, por confiar en mi trabajo y por enseñarme que en Matemáticas  $1 + 1$  es, casi siempre, mucho mayor que 2.

Gracias a Juan Soler porque sin él esta tesis no sería posible.

Gracias a mis compañeros de despacho, por hacer la soledad del doctorando más llevadera, y a todo el grupo por lo que he aprendido trabajando con ellos.

Gracias al Departamento de Matemática Aplicada por darme soporte y permitirme entrar en el mundo de la docencia universitaria.

Muchas gracias a los miembros del tribunal de tesis, por concederme el honor de evaluar mi trabajo.

Gracias a Antonio Cañada y a Aurelio Montero, que me dieron mi primera oportunidad en la investigación.

Gracias a Pablo Blanco y a Manuel Sutil porque, desde talentos totalmente opuestos, despertaron mi amor por las Matemáticas. Igualmente, gracias a Rafael Payá, Manuel Barros, Ángel Rodríguez, Armando Villena, Antonio Cañada, Sebastián Montiel y otros grandes matemáticos que ahora mismo olvido, por hacerme sonreír en clase pensando en una buena idea.

Gracias a Gabri, Javi, Jose, Juan, Magda, Manolín, María José y Pilar, porque han servido de ideólogos para muchos detalles del texto. Y por supuesto, muchas gracias a Óscar por el magnífico trabajo que ha realizado en el diseño y ejecución de la portada de esta tesis.

Y como realmente soy deuda, sólo (con tilde, te echaré de menos) puedo deshacerme en agradecimientos hacia las personas que me importan. Algunas me habéis ayudado con la tesis, otras con la vida. Y la mayoría ni lo uno ni lo otro, pero soy lo que soy gracias a vosotros y no me da la gana de no deciros que os quiero. INFINITAS GRACIAS:

A Manuel y Magdalena, por veintimuchos años de estar ahí dándolo todo. Por tanto trabajo y esfuerzo, alguno con más cabeza y otra todo corazón, con el único objetivo de hacernos felices. Por preocuparos por todo, a veces en exceso, pero siempre con razón (y con razones). Porque si algún día soy padre, tengo el mejor modelo del mundo para imitarlo.

A Manolín, porque luchando por parecerme a ti he llegado a donde estoy.

A Álvaro, porque piensas lo que te da la gana y actúas en consecuencia. Y aunque muchas veces te equivocas, yo quisiera ser tan valiente.

A José Luis, porque sólo tú sabes hasta qué punto puedo ser una pejuguera y nunca he recibido ningún reproche. Por aguantar el timón cuando lo fácil era abandonar el barco. Y sobre todo por la confianza que demuestras en ti mismo y en nuestro trabajo, que tantas veces ha sido la gasolina que me ha hecho seguir adelante.

A Fernando Cornet, no tengo muy claro por qué, pero muchas gracias.

A Mar.ia y Simone, mis dos modelos científicos a imitar, ejemplos de coherencia y sentido común en un mundillo dominado por egos desbocados, buenos científicos y mejores personas. Por dejarme aprender de vosotros.

A Mar.ia y a Pili, porque ayudasteis a corregir lo que otros simplemente borrraron.

A Gabri, Magda, Mar.ia, Óscar, Pili e Yvonne porque a base de hipocondria, humor dudoso, tertulianismo, supermánager, cháchara variada y cargo de conciencia por el vendedor de la papelería habéis conseguido que a las 10.. ¡me apetezca ir a tomar café! Y a Blanca, Pilar y Simone por todas esas cervezas, mojitos y demás jarabes nocturnos. Somos unos puretas, pero todavía sabemos pasarlo ¡PI-RA-TA!

A Ale, por seguir siendo mi amigo aunque no te cojo el teléfono. A Fran, porque no perdemos la esperanza de que algún día el Madrid juegue a algo. A JuanMa, porque además de ser Super Guapo no tienes medida. A Óscar, porque *el de la rodillera* siempre ha sido mi ídolo. A Santi, por tu asertividad, que ya sabes cómo me pone. A todos vosotros y algún otro matao adicional, por horas y horas de arrastrarnos en las pistas de fútbol.

A Fran, JuanMa y Óscar, porque juntos (y con el permiso de Mariano) estamos pagando la casa de Miguel el del Van Gogh. Y a Vera e Yvonne que, haciendo gala de un acopio inmenso de dignidad, nos acompañan finde tras finde sonrientes. Como unas señoras.

A Patri, porque no tienes ni un minuto libre pero siempre has estado ahí cuando he necesitado a alguien. A Ana, por esos vergeles de conversación e irnos de tiendas (mirarte, quiero decir) que tenemos entre estrés y estrés. A Patriana, porque todavía me parto de risa cuando recuerdo el día que me regañasteis.

A Francisco, porque siempre haces lo que te sale de los huevos, porque juntos nos hemos hecho doctores honoris causa en mugre. Y porque eres un cebollero. A Dani, porque llevo 5 años de carrera y otros tantos de tesis y sigo sin entender tus cuentas. A Javo y a Patri, porque da igual que no os vea porque os quiero. A Fran Montoro, Javi, Jesús y todos los talegas, porque tengo cerca de treinta tacos y me hace ilusión echar un litro o hacer botellón en el auditorio. Y no me gusta beber. Es verdad. Lo prometo.

A Laura, porque *ser buena gente* es el peor insulto que se te puede hacer. A Paco Romero, porque eres mi patero malo favorito. A Juancho, porque son ellas las que tienen que llamar. A Nono, porque eres un papa frita pero no veas qué bocasa tienes. A Juan, por lo rico que está el pan pa hoy. A todos los miserables, por todo lo que he aprendido con vosotros. Siempre hay alguien peor que uno jugando al pro, claro.

A Thais, Raquel, María, Rocío, Miguel Ángel, Irene y Ángela porque un ratito de cháchara con vosotros hace que el día merezca la pena. A Dilyara, Alberto, Luis, Elena, Patri, Diego y muchos otros, porque habitualmente no estáis, pero cuando lo hacéis todo es como siempre.

Por supuesto muchas gracias a aquellas personas que, a veces por las circunstancias de la vida y otras por mi deseo explícito, unas por acción y otras por omisión, algunas por ser ejemplo a seguir y la gran mayoría por mostrarme el camino a evitar, se han convertido en innombrables.

Y cómo no gracias a Dioni, paradigma de los más bellos deseos y de la vileza más miserable. Manipulador de contrastada categoría pero el amigo más fiel que he conocido. Porque me has machacado cuando lo he pedido a gritos y lo has dado todo por mí, incluso cuando no me lo merecía. Porque has conseguido que me haga ilusión el día de mi cumpleaños. Porque podemos pasar tres horas discutiendo si 2.2 es un número y semanas intercambiando marcas de coche. Porque me has enseñado las cosas importantes de la vida: el capicúa en  $\mathbb{Z}_p$ , dónde está el centro del universo, qué es el cero absoluto o qué pasa si isomorfo es isomorfo a patata<sup>1</sup>. Porque has conseguido que todo el mundo me inspire compasión, ya que ellos ni siquiera pueden sospechar lo que es un amigo.

---

<sup>1</sup>Demasiado profundo, no lo entenderíais

# Índice

---

<b>Introducción y resultados principales</b>	<b>1</b>
<b>1. Preliminares</b>	<b>17</b>
1.1. Notación . . . . .	17
1.2. Comentarios y resultados útiles . . . . .	19
<b>2. Derivación de una ecuación de Schrödinger multidimensional que representa la misma hidrodinámica de Wigner–Fokker–Planck</b>	<b>25</b>
2.1. Desde la ecuación maestra hasta el sistema hidrodinámico asociado a la ecuación de Wigner–Fokker–Planck . . . . .	26
2.2. Análisis del tensor de esfuerzos y relaciones de clausura . . . . .	32
2.3. Construcción de una función de onda que reproduce el comportamiento de la función de Wigner: la ecuación de Schrödinger–Langevin difusiva . . . . .	36
2.4. Casos particulares y discusión acerca de las hipótesis . . . . .	40
2.4.1. Casos particulares destacados de la ecuación de Schrödinger–Langevin con difusión . . . . .	40
2.4.2. Discusión sobre la consistencia de $P_v^c$ y $F$ . . . . .	41
<b>3. Validación numérica de la ecuación de Schrödinger–Langevin con difusión</b>	<b>47</b>
3.1. Soluciones particulares . . . . .	47
3.1.1. $J = D_{qq}\nabla n$ . . . . .	48
3.1.2. Densidad de corriente nula ( $J = 0$ ) . . . . .	52
3.1.3. $J = -D_{qq}\nabla n$ . . . . .	53
3.2. Comparativa con Wigner–Fokker–Planck vía potenciales linealizados . . . . .	55
3.2.1. Soluciones exactas de la ecuación de Wigner–Fokker–Planck: partícula libre y oscilador armónico . . . . .	56
3.2.2. Linealización de SLD y resultados numéricos . . . . .	59
<b>4. Existencia de argumento de una función de onda</b>	<b>65</b>
4.1. Sobre el problema del argumento . . . . .	65
4.2. Argumento de una función compleja independiente del tiempo . . . . .	69

4.3. Argumento de la solución de una ecuación de Schrödinger . . . . .	74
<b>5. Buen planteamiento de una ecuación de Schrödinger disipativa con difusión en dominios acotados</b>	<b>81</b>
5.1. Planteamiento e hipótesis del problema . . . . .	81
5.2. Sobre la derivación del modelo . . . . .	84
5.3. Equivalencia entre las ecuaciones de Schrödinger difusiva y pura- mente logarítmica . . . . .	87
5.4. Buen planteamiento de la ecuación logarítmica . . . . .	91
5.5. Existencia y unicidad de solución en dominios acotados . . . . .	98
<b>6. Interpretación rigurosa y buen planteamiento local de la ecuación de Schrödinger–Langevin</b>	<b>101</b>
6.1. Sobre la interpretación unívoca de la ecuación Schrödinger–Langevin	102
6.2. Existencia y unicidad de solución local para la ecuación de Schrödinger– Langevin generalizada . . . . .	106
6.3. Aplicación: Sistema de Schrödinger–Langevin–Poisson con entalpía . . . . .	115
<b>A. Distintas formulaciones de un sistema cuántico</b>	<b>121</b>
A.1. El operador de densidad y la ecuación de Liouville Von Neumann . . . . .	121
A.2. Interpretación cinética. La ecuación de Wigner . . . . .	123
A.3. Enfoque hidrodinámico . . . . .	124
A.4. Formulación de onda y ecuación de Schrödinger . . . . .	126
<b>B. Soluciones exactas de la ecuación de Wigner–Fokker–Planck</b>	<b>129</b>
B.1. Solución del problema de valores iniciales asociado a la ecuación de Wigner–Fokker–Planck . . . . .	129
B.1.1. La partícula libre . . . . .	131
B.1.2. El oscilador armónico . . . . .	134
B.2. Densidad local asociada a la ecuación de Wigner–Fokker–Planck . . . . .	137
B.3. Densidad de corriente asociada a la solución de la ecuación de Wigner– Fokker–Planck . . . . .	140
<b>Índice alfabético</b>	<b>147</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>149</b>

# Introducción y resultados principales

---

El modelado de procesos en los que resulta relevante la pérdida de alguna magnitud observable es un campo de gran interés en Física e Ingeniería, ya que gran parte de los problemas que aparecen en dichas áreas puede plantearse de forma realista en el marco teórico de un sistema disipativo. A escalas meso y macroscópicas la teoría cinética proporciona una herramienta poderosa para representar, simular numéricamente y analizar matemáticamente una gran variedad de fenómenos de esta índole en campos tan variados que van desde la Astronomía hasta la Biología. A escalas pequeñas los efectos cuánticos se tornan esenciales y se hace necesario obtener una descripción matemática fiel de los factores que pueden generar disipación en este contexto. Encontrar una formulación adecuada para englobar fenómenos cuánticos disipativos constituye una cuestión de interés creciente por su gran aplicabilidad en múltiples ramas de la Física y la Tecnología como dinámica browniana, dispersión de iones pesados, óptica cuántica, estudio del efecto túnel o microelectrónica, especialmente a través del modelado de transporte cuántico de carga en dispositivos semiconductores.

El objetivo de esta tesis es el estudio de fenómenos disipativos en el ámbito de la mecánica cuántica mediante modelos basados en ecuaciones en derivadas parciales. Nos centraremos en la formulación de onda adaptada a este tipo de mecanismos, estudiando qué términos no lineales pueden tener cabida en una ecuación de Schrödinger disipativa y analizando el buen planteamiento del problema de Cauchy asociado a algunas ecuaciones de Schrödinger que contienen dichos términos. Prestaremos especial atención a los efectos de fricción y difusión, estudiando generalizaciones cuánticas de la ecuación de Langevin para el movimiento browniano clásico. Este análisis está estrechamente relacionado con el problema de la existencia de un argumento suficientemente regular para una función de onda dada, al que prestaremos atención específica.

El problema de la representación de procesos cuánticos disipativos puede enfocarse de forma natural desde dos perspectivas. La primera de ellas consiste en partir de un sistema clásico y aplicarle un procedimiento de cuantización, idea que se basa en la existencia de una función de Hamilton o de Lagrange (independiente del tiempo) que describe la dinámica de dicho sistema. Sin embargo si consideramos,

por ejemplo, la ecuación de Langevin

$$m \frac{d^2x}{dt^2} + \eta \frac{dx}{dt} + V'(x) = F(t), \quad (1)$$

que gobierna el movimiento browniano de una partícula clásica de masa efectiva  $m$  inmersa en un fluido viscoso con coeficiente de fricción  $\eta$  y sujeta a la acción del potencial  $V$  y a la fuerza aleatoria  $F$ , tenemos una ecuación disipativa sencilla que no se puede derivar a partir de las ecuaciones de Hamilton (o de Lagrange) aplicadas a una función independiente del tiempo. Como consecuencia existen fenómenos que exhiben disipación y no admiten cuantización, por lo que parece que este enfoque no resulta lo suficientemente general. No obstante, podemos encontrar en la literatura algunos modelos fenomenológicos basados en reglas de cuantización no estándar que han sido validados posteriormente mediante técnicas más aceptadas. Por ejemplo, en 1.977 H. Dekker aplica un método de cuantización basado en variables complejas al oscilador armónico amortiguado [39], dando lugar a un modelo con términos difusivos que posteriormente ha ido apareciendo en otros contextos más generales.

El segundo enfoque natural en la búsqueda de una descripción adecuada de fenómenos cuánticos disipativos consiste en razonar de forma inversa: se parte de un sistema cuántico y se intentan explicar las diversas causas que puedan ser germen de los efectos de disipación observados. Este planteamiento puede materializarse de distintas maneras, dependiendo de la formulación de la mecánica cuántica que utilicemos (en el apéndice A presentamos un breve resumen de aquellas que nos serán de utilidad y la relación que existe entre ellas). Desde el punto de vista del modelado, sin embargo, el formalismo de operadores de densidad constituye el marco teórico más apropiado para la inclusión de efectos de disipación en un proceso mecano-cuántico, ya que permite trabajar de forma sencilla con los denominados sistemas cuánticos abiertos. En ellos se respeta la idea básica de que todo sistema físico aislado es siempre hamiltoniano y se interpreta cualquier disipación observable en el sistema objeto de estudio  $\mathcal{S}$  como resultado de la interacción con el entorno  $\mathcal{E}$  que lo rodea. Interpretando  $\mathcal{S}$  y  $\mathcal{E}$  como sistemas cuánticos que se influyen mutuamente, descomponiendo la función de Hamilton del sistema compuesto  $\mathcal{S} \otimes \mathcal{E}$  como suma del hamiltoniano de  $\mathcal{S}$ , el de  $\mathcal{E}$  y un tercero de interacción y observando solo el comportamiento de  $\mathcal{S}$  (operación que se puede llevar a cabo de forma simple si trabajamos con operadores de densidad) se obtiene la denominada ecuación maestra, que consiste en la ley de evolución temporal del operador de densidad reducido de  $\mathcal{S}$  y constituye una descripción completa de un proceso cuántico disipativo. Existen muchos modelos basados en una ecuación maestra proveniente de un sistema abierto que son aceptados y ampliamente estudiados en la literatura física, por ejemplo [21, 41, 42, 48, 66, 108]. Uno de los más relevantes fue introducido en 1.983 por A. O. Caldeira y A. J. Leggett (CL) en [21], donde proponen una generalización de la ecuación de Langevin (1) para el caso cuántico que se obtiene bajo hipótesis de altas temperaturas:

$$\frac{d}{dt} R = -\frac{i}{\hbar} [H_r, R] - \frac{i}{\hbar} \lambda [q, \{p, R\}] - \frac{1}{\hbar^2} D[q, [q, R]], \quad (2)$$

donde  $R$  es el operador de densidad reducido del sistema a estudiar,  $q$  y  $p$  son los operadores cuánticos de posición y momento respectivamente, y donde denotamos  $[\cdot, \cdot]$  y  $\{\cdot, \cdot\}$  al conmutador y anticonmutador de operadores respectivamente. Además  $H_r$  es el hamiltoniano renormalizado [68] y  $\hbar$  es la constante de Planck reducida. Los parámetros que modelan la interacción con el ambiente son  $\lambda = \frac{\eta}{2m}$  y  $D = \eta k_B T_0$ , donde  $\eta > 0$  y  $T_0 > 0$  son la constante de acoplamiento y la temperatura del entorno respectivamente,  $m$  es la masa del sistema y  $k_B$  es la constante de Boltzmann. La ecuación (2) se deduce interpretando el sistema  $\mathcal{E}$  como un conjunto infinito de osciladores armónicos de frecuencia muy alta en equilibrio térmico (al que se denomina *baño térmico* o *reservorio*) y utilizando el funcional de influencia de Vernon y Feynmann [46] para tratar los efectos de la interacción. Este es un modelo disipativo muy aceptado en mecánica cuántica debido a su simplicidad (se trata de una ecuación lineal que puede resolverse de forma exacta) y porque de él se derivan aproximaciones numéricas fiables. Además, la interpretación del entorno como baño térmico ha dado lugar a modelos más completos que generalizan el de Caldeira y Leggett. En 1.993, L. Diósi estudió una aproximación markoviana del mismo proceso (no markoviano) que describen Caldeira y Leggett para temperaturas medias y altas, obteniendo la siguiente ecuación maestra:

$$\mathbf{A}(R) = -\frac{i\lambda}{\hbar}[q, \{p, R\}] - \frac{1}{\hbar^2} \left( D_{pp}[q, [q, R]] + 2D_{pq}[q, [p, R]] + D_{qq}[p, [p, R]] \right), \quad (3)$$

donde  $\mathbf{A}(R) := \frac{d}{dt}R + \frac{i}{\hbar}[H_r, R]$  y se ha usado la misma notación que en (2) y  $D_{pp}$ ,  $D_{pq}$  y  $D_{qq}$  son constantes que dependen de la interacción con el baño térmico. Pueden verse las definiciones precisas y una descripción más detallada de este modelo en el Capítulo 2. La ecuación (3) incorpora a la ecuación maestra de CL dos términos que ya había obtenido Dekker [39] mediante su método de cuantización y que permiten escribir (3) en la llamada forma de Lindblad (véanse [78, 11]). Se dice que la ecuación

$$\frac{d}{dt}R = -\frac{i}{\hbar}[H, R] + \mathbf{A}(R)$$

está en la forma de Lindblad si  $H$  es un operador autoadjunto (un hamiltoniano) y existe una familia de operadores lineales  $\{L_j\}_{j \in \mathbb{N}}$  tales que

$$\mathbf{A}(R) = \sum_{j \in \mathbb{N}} L_j R L_j^* - \frac{1}{2}(LR + RL), \quad \text{con} \quad L = \sum_{j \in \mathbb{N}} L_j^* L_j,$$

donde  $A^*$  denota el adjunto del operador  $A$ . Son necesarias, además, algunas hipótesis adicionales sobre  $H$  y  $\mathbf{A}$  (véase [28] para más detalles). Las ecuaciones en la forma de Lindblad tienen propiedades convenientes como disipatividad (en el sentido de los operadores) [78], entropía monótona bajo hipótesis sobre  $\{L_j\}_{j \in \mathbb{N}}$  (véase [15]), y conservación de la positividad del operador de densidad [28, 78]. Se pueden encontrar modelos en la literatura obtenidos partiendo de este esquema (por ejemplo en [48]). La ecuación maestra de CL no se puede escribir en la forma de Lindblad; de hecho no puede garantizarse la positividad del operador de densidad en todo tiempo (véase [2]), por lo que podemos entender la ecuación (3) como una

mejora de dicho modelo y nos basaremos en ella para describir el movimiento de un sistema cuántico que sufre disipación.

El formalismo de operadores de densidad resulta adecuado para incorporar los efectos del ambiente sobre un sistema cuántico, pero no es una representación operativa a la hora de estudiar las propiedades de un modelo, ya que desde el punto de vista computacional resulta demasiado costoso (requiere  $2d$  variables para un problema de dimensión  $d$ ) y matemáticamente es difícil de tratar, pues  $R$  es un operador sobre un espacio de Hilbert y no está claro en qué marco funcional debe encuadrarse su estudio. Esta interpretación de la mecánica cuántica, sin embargo, se puede reformular en términos de una función de densidad de probabilidad definida en el espacio de fases gracias a una transformación  $\mathcal{W}$ , que fue introducida en 1.932 por E. Wigner para instaurar una versión cuántica de la distribución de Boltzmann [114]. La transformada que propone Wigner consiste esencialmente en la transformada de Fourier del núcleo integral de  $R$  (cf. (2.5)), estableciendo de este modo, en virtud del Teorema de Plancherel, una correspondencia biyectiva e isométrica entre los operadores de densidad (definidos positivos, autoadjuntos, de clase traza sobre  $L^2(\mathbb{R}^d)$ ) y cierto subconjunto de  $L^2(\mathbb{R}^d)$ . De esta manera, para estudiar el movimiento de un sistema cuántico (que se puede considerar abierto o aislado) en el espacio  $d$ -dimensional se define la función de Wigner de dicho sistema  $W : \mathbb{R}^{2d} \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$  como  $W := \mathcal{W}(R)$  con una interpretación bien definida:  $W(x, \xi, t)$  debe ser la densidad de probabilidad asociada al sistema en la posición  $x \in \mathbb{R}^d$ , a la velocidad  $\xi \in \mathbb{R}^d$  y el instante  $t \geq 0$ . La transformada de Wigner, por tanto, establece una representación canónica de un sistema cuántico contemplándolo desde el punto de vista cinético, lo que nos permite conocer propiedades de cada modelo a través de  $\mathcal{W}(R)$ , cuyo tratamiento presenta múltiples ventajas. Como ya hemos comentado, la función de Wigner de un sistema es una función real definida en el espacio de fases, lo que simplifica la interpretación de los cálculos asociados al sistema objeto de estudio y permite establecer analogías con el caso clásico. De hecho existen diversos modelos disipativos, por ejemplo Wigner–BGK y Wigner–Boltzmann en el estudio de dispositivos semiconductores [38, 70, 88], que se formulan de modo natural en términos de  $W$  en analogía con el caso clásico. Es reseñable, por otra parte, que la representación de Wigner de un sistema cuántico permite describir sistemas de muchas partículas y conserva toda la información que contiene el operador de densidad convirtiendo a  $R$  y  $\mathcal{W}(R)$  en equivalentes, de manera que cualquier modelo derivado en el ámbito de los sistemas cuánticos abiertos puede describirse en la formulación cinética respetando todas las propiedades físicas. En particular la ecuación (3), en términos de  $W$ , da lugar a la ecuación de Wigner–Fokker–Planck (WFP):

$$\partial_t W + (\xi \cdot \nabla)W + \Theta_{\hbar}[V]W = L_{WFP}[W], \quad (4)$$

que constituye un modelo disipativo ampliamente aceptado y muy estudiado en la literatura (véanse [8, 9, 10, 11, 22, 47, 84, 98, 103, 106]) y describe los efectos disipativos mediante el núcleo de interacción lineal  $L_{WFP}$  (cf. (2.7)). Nótese que este queda determinado por las mismas constantes que el modelo de Diósi (cf. (3)) y puede resolverse de forma exacta en casos sencillos, dependiendo del operador

pseudo-diferencial  $\Theta_{\hbar}$ , que consiste en la transformada de Wigner del potencial externo  $V$ . En la formulación cinética, este núcleo representa efectos de fricción y difusión. Además, eliminando en (4) los términos con coeficientes  $D_{pq}$  y  $D_{qq}$ , que modelan difusiones anómala y en posición respectivamente, obtenemos la reescritura del modelo de CL en función de  $W$  (que denominaremos también como CL aprovechando la equivalencia entre las formulaciones de Wigner y de operadores de densidad). Este hecho implica que la incorporación de efectos difusivos permite escribir el modelo de Caldeira–Leggett en la forma de Lindblad. Debe tenerse en cuenta, por último, que la difusión de la que hablamos es de naturaleza cuántica y por tanto en el límite semiclásico tanto CL como WFP conducen a la ecuación de Vlasov–Fokker–Planck, lo que permite interpretar ambos como una versión cuántica de un modelo clásico de gran aceptación.

A pesar de las ventajas que proporciona la descripción cinética de un proceso cuántico, la representación que proporciona la función de Wigner también presenta carencias. De entrada la interpretación de  $W$  como densidad de probabilidad resulta ficticia, ya que puede tomar valores negativos incluso en casos muy sencillos. Desde el punto de vista computacional, además, la representación en el espacio de fases resulta bastante costosa ya que, al igual que ocurría con el operador de densidad, el tratamiento de  $W$  requiere el doble de variables que la dimensión de nuestro problema. Esto se debe a la complejidad que acompaña la representación mediante  $W$  (o  $R$ ), por lo que en las aplicaciones prácticas resulta útil simplificar los modelos utilizando los momentos (respecto de la velocidad) de la función de Wigner, que describen propiedades hidrodinámicas macroscópicas de un sistema cuántico. Multiplicando la ecuación cinética por la  $k$ -ésima potencia de  $\xi$  e integrando respecto de dicha variable, se puede deducir la ecuación de evolución para el momento de orden  $k$ , lo que permite obtener una jerarquía de ecuaciones para los momentos asociados a  $W$  y establecer en particular un sistema para los de orden más bajo. En el caso no disipativo el sistema hidrodinámico formado por los dos primeros momentos  $n$  y  $J$  (que se interpretan como densidad local y densidad de corriente) es cerrado y el estudio de dicho sistema es equivalente a la ecuación de Wigner, con lo que las propiedades físicas derivadas de aquel contienen la misma información que las deducidas de esta. En dichas condiciones se puede obtener la formulación de De Broglie–Bohm [34, 18] de la mecánica cuántica en términos de  $n$  y  $u$ , donde  $u = J/n$  es el campo de velocidades asociado al sistema hidrodinámico que forman las evoluciones temporales de  $n$  y  $J$ . En este contexto, además, se demuestra (formalmente) que  $u$  admite un potencial escalar  $S$  al menos localmente, lo que permite establecer el denominado sistema hidrodinámico de flujo potencial, que describe el sistema en términos de  $n$  y  $S$ . Al introducir efectos disipativos a nivel de  $W$ , sin embargo, no cabe esperar que el sistema de momentos de algún orden permanezca cerrado, por lo que es imposible retener todas las propiedades físicas de la función de Wigner y se hace necesario suplir esta pérdida de información imponiendo *ad hoc* ciertas condiciones de cierre basadas en algún conocimiento adicional o en hipótesis razonables sobre la física del sistema. Este procedimiento, que es usual también en la teoría disipativa clásica, permite obtener modelos hidrodinámicos con fricción basados en  $n$  y  $J$ . Además, el campo de

velocidades  $u$  genera vorticidad típicamente, por lo que es imposible que admita un potencial (ni siquiera localmente) y no se puede establecer la formulación de flujo potencial. No obstante, imponiendo la existencia de  $S$  tal que  $J = n\nabla S$  se deducen sistemas hidrodinámicos de flujo potencial que representan efectos de fricción. Obsérvese que dicha hipótesis supone una pérdida adicional de información, ya que supone describir la hidrodinámica de un sistema disipativo mediante una representación irrotacional, eliminando todos los efectos de vorticidad que pudieran derivarse de interacciones disipativas.

Como vemos, tanto la formulación cinética como las hidrodinámicas constituyen herramientas poderosas para describir procesos disipativos en mecánica cuántica y darles un tratamiento más operativo. En cuanto a la formulación de onda, es destacable que la introducción de cualquier efecto que pueda generar pérdida o ganancia de alguna magnitud observable debe dar lugar a un hamiltoniano efectivo dependiente del tiempo en la ecuación de Schrödinger o a la aparición de términos no lineales en la misma, que deben interpretarse como operadores de disipación. Ambas consecuencias resultan en principio indeseables, pues conducen a propiedades que no admiten interpretación en la teoría estándar como la violación del principio de superposición. El conocimiento profundo y la interpretación de los términos no lineales que modelan efectos disipativos en la ecuación de Schrödinger resulta de gran interés, ya que la descripción mediante funciones de onda es básica en mecánica cuántica. Además, el análisis matemático de la ecuación de ondas es a todas luces más simple que cualquier sistema hidrodinámico cuántico, y no solo porque se trata de una única ecuación frente a un sistema. El efecto de deslocalización habitual en mecánica cuántica se describe en la formulación de Schrödinger como un operador lineal, mientras que en el sistema de *arrastré-difusión* aparece el el tensor  $\frac{J \otimes J}{n}$  y en el hidrodinámico de flujo potencial se obtiene una ecuación de Hamilton–Jacobi. Este hecho señala la función de onda como privilegiada para representar cualquier fenómeno que sea sensible a los efectos cuánticos y focaliza nuestro trabajo hacia el estudio de la evolución de una función de onda adecuada a cada problema disipativo, que abordaremos desde el punto de vista del modelado y a través de un enfoque matemático exhaustivo. Respecto a lo primero, es destacable que hoy en día no existe todavía un conocimiento profundo sobre cómo deben entenderse las interacciones disipativas en la ecuación de Schrödinger, aunque hay diversos modelos basados en diferentes interpretaciones. En 1.981 N. Gisin introduce una familia de ecuaciones de Schrödinger disipativas partiendo de un sistema cuántico abierto muy general [53] y usando un operador de proyección que permite recuperar un único estado en el sistema objeto de estudio. Este modelo resulta interesante porque admite una amplia generalidad en la interpretación de los hamiltonianos de cada uno de los sistemas y de la interacción, pero resulta difícil de tratar y se construye en un contexto poco realista, ya que es de sobra conocido que la evolución temporal de un sistema cuántico compuesto por dos subsistemas genera entrelazamiento entre ambos, lo que causa decoherencia cuántica y hace imposible materializar el estado de Gisin. De hecho, hace imposible cualquier representación de un sistema abierto (y por tanto de cualquiera que sufra efectos de disipación) mediante una única función de onda, ya que el sistema objeto de estudio no se

puede representar como tal. Una posible solución a este problema consiste en considerar un sistema de Schrödinger de estado mixto, aunque este planteamiento solo mejora el modelo si tenemos información sobre los estados que conforman la mezcla en cada tiempo. Esta cuestión está relacionada con el fenómeno de *einselección* (del inglés *Environment Induced Superselection*), que se fundamenta en la idea de que el ambiente determina de algún modo los estados del sistema que vamos a poder observar. No obstante, esta línea de pensamiento escapa de nuestros intereses, por lo que no tendremos en cuenta este punto de vista.

Debemos ser conscientes, por tanto, de que cualquier representación de un proceso disipativo mediante una ecuación de Schrödinger conlleva una pérdida intrínseca de información. Sin embargo, como hemos visto, hay también descripciones hidrodinámicas que tampoco contienen todas las propiedades físicas del sistema objeto de estudio pero que resultan adecuadas y constituyen buenas aproximaciones. Bajo esta consideración podemos buscar ecuaciones de onda que describan fenomenológicamente procesos con disipación observable. M. D. Kostin puso en práctica esta idea en [73] para describir la dinámica de Langevin en términos de una ecuación de Schrödinger con fricción:

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi + V_R(t)\psi + 2\lambda S\psi, \quad (5)$$

donde  $\psi = \psi(t, x)$  es la función de onda,  $\lambda > 0$  es el coeficiente de fricción,  $V$  es el potencial externo y  $V_R$  es un potencial aleatorio dependiente solo del tiempo que representa la interacción del sistema cuántico con el entorno. En la ecuación (5) los efectos de fricción quedan descritos, tras algunas simplificaciones, por el término  $\lambda S\psi$  donde  $S$  representa el argumento de la función de onda, lo que significa que se verifica la descomposición módulo-argumento de  $\psi$  (también conocida como descomposición de Madelung [85] o perfil WKB):

$$\psi(t, x) = \sqrt{n(t, x)} \exp\left\{\frac{i}{\alpha} S(t, x)\right\}, \quad (6)$$

donde  $\alpha$  denota la constante de Planck o una constante que desempeña el mismo papel. Es claro que la fórmula (6) no determina unívocamente  $S$ , lo que genera graves problemas a la hora de llevar a cabo un estudio matemático riguroso de la ecuación de Kostin, cuestión que nos ocupará más adelante. Desde el punto de vista del modelado, sin embargo, la ecuación (5) tiene propiedades deseables, como disipación de energía ([74]), y desprende aproximaciones numéricas fieles a la dinámica de Langevin ([102]). Además este modelo es equivalente a la ecuación maestra de CL salvo por la pérdida de información descrita anteriormente. Esto significa que partiendo de la ecuación (2), calculando el sistema hidrodinámico de flujo potencial asociado a las variables  $n$  y  $S$  y construyendo la función de onda  $\psi$  según la fórmula (6), obtenemos que la evolución de  $\psi$  está gobernada por (5). Este hecho, además de corroborar la ecuación de Kostin como modelo (formalmente) válido, nos marca una pauta para construir una ecuación de Schrödinger asociada a cada ecuación maestra. En particular podemos aplicar este esquema a la ecuación maestra de Diósi (3), o equivalentemente a la ecuación de Wigner–Fokker–Planck, para

obtener una familia de ecuaciones de Schrödinger disipativas cuya hidrodinámica coincide con la de aquellas, estableciendo así nuestro primer resultado de interés (puede consultarse el enunciado preciso en el Teorema 2.3.2 del Capítulo 2).

**Teorema 1**

Sea  $W = W(x, \xi, t)$  una solución de la ecuación de WFP suficientemente regular con densidad local  $n = \int W d\xi > 0$  y densidad de corriente  $J = \int \xi W d\xi$ . Si existen campos escalares  $S$ ,  $F$  y  $U$  tales que

$$\frac{J}{n} = \frac{\hbar}{m\alpha} \nabla S, \quad \nabla U = \frac{1}{n} \operatorname{div} P_v^c, \quad \text{y} \quad \nabla F = \left( \frac{\nabla n}{n} \cdot \nabla \right) \nabla S,$$

donde  $P_v^c = P_v^c(n)$  es un tensor de rango 2 que surge como consecuencia de la mezcla de estados que conforman  $W$ , entonces existe una función de onda  $\psi(t, x)$  que es solución de la siguiente ecuación de Schrödinger–Langevin logarítmica con difusión (SLD)

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\psi &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + \left(V + mU + \frac{\hbar\lambda}{mD_{qq}}S + 2D_{pq}\log(n)\right)\psi \\ &\quad + \frac{i\hbar D_{qq}}{2} \left(\frac{\Delta n}{n}\right)\psi - \frac{\hbar}{m}F\psi - mD_{qq}\operatorname{div}\left(\frac{J}{n}\right)\psi \end{aligned} \quad (7)$$

y describe la misma dinámica que  $W$ , en el sentido de que

$$|\psi(t, x)|^2 = n(t, x), \quad \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im}(\overline{\psi}(t, x)\nabla\psi(t, x)) = J(t, x).$$

La ecuación SLD constituye una generalización de (5), ya que contiene un término de fricción proporcional a la fase  $S$  además de algunos otros que mejoran el modelo en dos sentidos. En primer lugar, señalamos que la presencia del potencial efectivo  $U$  permite incorporar información adicional sobre la mezcla de estados que conforman la función de Wigner mediante un término eventualmente no lineal que depende exclusivamente de la densidad local  $n$  y, por tanto, deja libertad para establecer relaciones de clausura concretas, lo que supone una optimización respecto al potencial aleatorio  $V_R$  en la ecuación de Kostin. Por otra parte debemos observar que tanto el logarítmico (que fue introducido en la formulación de Schrödinger por Białynicki–Birula y Mycielski en [16]) como el resto de términos que aparecen en (7) describen al nivel de Schrödinger los efectos difusivos extra que contiene la ecuación de WFP respecto del modelo de CL. Comentamos previamente que esta difusión observable altera muy poco el comportamiento observable del sistema pero confiere propiedades deseables a la ecuación (4) que no tiene (2), por lo que su influencia en SLD debe entenderse como una propiedad adicional de este modelo respecto de (5). Obsérvese, además, que la ecuación de continuidad asociada a SLD es de tipo Fokker–Planck, luego la difusión de naturaleza cuántica que representa el coeficiente  $D_{qq}$  es de hecho observable. Estos efectos de difusión en la formulación de onda de la mecánica cuántica fueron estudiados originariamente por H-D.

Doebner y G. A. Goldin ([43, 44]) dando lugar a una clase de modelos no lineales cuya forma más general viene dada por

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + \frac{i\hbar D}{2}\left(\frac{\Delta n}{n}\right)\psi + V\psi + mD'\mu_1\left(\frac{\operatorname{div}(J)}{n}\right)\psi \\ + \frac{m^2}{\hbar}D'\mu_3\left(\frac{|J|}{n}\right)^2\psi + mD'\mu_4\left(\frac{J\cdot\nabla n}{n^2}\right)\psi + \hbar D'\left(\mu_2\frac{\Delta n}{n} + \mu_5\frac{|\nabla n|^2}{n^2}\right)\psi,$$

donde  $D, D' > 0$  son coeficientes de difusión y  $\mu_j, j = 1, \dots, 5$  son números reales arbitrarios. La familia de ecuaciones de Schrödinger (no lineales) de tipo Doebner–Goldin se caracterizan porque determinan una ecuación de continuidad de Fokker–Planck, lo que permite interpretar la ecuación (7) dentro de este contexto. Por último, la influencia del campo escalar  $F$  surge también como consecuencia del término de difusión en posición de la ecuación de WFP, si bien no está clara la interpretación que debemos darle. Dedicaremos el final del Capítulo 2 a discutir hipótesis razonables que permitan eliminarlo o incluirlo en la familia de Doebner–Goldin.

El modelo SLD constituye una familia de ecuaciones de Schrödinger disipativas basadas en el sistema hidrodinámico asociado a la ecuación de Wigner–Fokker–Planck, al que se han impuesto relaciones de cierre para establecer después la evolución temporal de una función de onda que resume el sistema en el sentido de que las densidades local y de corriente asociadas a dicha función de onda coinciden (bajo las hipótesis que permiten cerrar el sistema) con las de la función de Wigner. En [62] se deriva otro modelo a partir de la hidrodinámica asociada a la ecuación de WFP siguiendo las mismas premisas básicas a la hora de construir la función de onda. En este caso, sin embargo, la clausura del sistema de momentos surge de manera natural por medio de una interpretación microscópica clásica de las velocidades de difusión y aplicando al caso disipativo las técnicas de E. Nelson para derivar la mecánica cuántica a partir de la newtoniana ([92, 93]). El resultado es la siguiente ecuación de Schrödinger no lineal de tipo logarítmico (a la que denominaremos SLC en futuras referencias):

$$i\alpha\partial_t\psi = -\frac{\alpha^2}{2m}\Delta\psi + \frac{\alpha^2}{\hbar^2}Q\psi + \Lambda\log(n)\psi + \frac{\alpha}{2m}\left(\frac{i\alpha}{2}\frac{\Delta n}{n} + m\operatorname{div}\left(\frac{J}{n}\right)\right)\psi, \quad (8)$$

donde se mantiene la simbología que hemos utilizado hasta ahora y se introduce la notación

$$\alpha = 2mD_{qq}, \quad \Lambda = 2D_{pq} + \eta D_{qq}.$$

Obsérvese que el término de fricción de Kostin queda reemplazado en (8) por el logarítmico como resultado de la aproximación realizada para la clausura de los momentos. Además, este modelo contiene términos no lineales de la familia de Doebner–Goldin que describen efectos difusivos. En este sentido es destacable que aparece el potencial cuántico de Bohm (que surge de forma natural en la descripción hidrodinámica) en la formulación de onda, dando lugar a un término no lineal de tipo modular con coeficiente menor que uno, cuya interpretación puede consultarse en [12, 49]. Sin embargo, la característica más destacable de los elementos de

la clase de Doebner–Goldin en la ecuación SLC es que se pueden simplificar por completo. En efecto, bajo ciertas hipótesis sobre los parámetros que son verificados en este caso (cf. (5.6)), existen relaciones sobre los coeficientes de difusión y los parámetros numéricos (cf. (5.7)) que permiten construir una transformación Gauge para eliminar los efectos de difusión en la ecuación de ondas y reducir esta última a la ecuación de Schrödinger puramente logarítmica. Esta propiedad nos permitirá tratar de forma rigurosa la ecuación singular (8) trabajando con la ecuación logarítmica y transformando de forma adecuada las soluciones de una en soluciones de la otra. De este modo seremos capaces de demostrar existencia y unicidad de solución local para el problema de Cauchy asociado a SLC en el espacio  $H_\delta^2(\Omega)$ , que está constituido por funciones separadas de cero (consultese la definición concreta en el Capítulo 1), estableciendo así el Teorema 5.5.1, que constituye otro de nuestros resultados principales.

### **Teorema 2**

Sean  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  ( $1 \leq d \leq 3$ ) un dominio acotado, simplemente conexo y con frontera de clase  $C^2$  y  $\psi_I \in H^2(\Omega)$ ,  $\psi_B \in H^{3/2}(\partial\Omega)$  funciones separadas de cero y compatibles en la frontera del dominio. Entonces se verifican las siguientes afirmaciones:

- (i) Existe  $T > 0$  tal que el problema de tipo mixto asociado a la ecuación de Schrödinger no lineal SLC con condiciones inicial y de frontera  $\psi_I$  y  $\psi_B$ , respectivamente, tiene solución única  $\psi \in C([0, T], H_\delta^2(\Omega)) \cap C^1([0, T], L^2(\Omega))$ .
- (ii) La dinámica asociada a dicho problema es equivalente a la subyacente al problema de tipo mixto para la ecuación de Schrödinger puramente logarítmica, en el sentido de que existe un homeomorfismo de  $C([0, T]; H_\delta^2(\Omega))$  que conserva la densidad local  $n = |\psi|^2$  y lleva soluciones de un problema en soluciones del otro.

La prueba de este resultado requiere la definición del homeomorfismo mencionado, que no es más que la transformación Gauge que simplifica formalmente los términos de la familia de Doebner–Goldin en (8), y su tratamiento matemático. Además, el *transporte* riguroso de soluciones de un problema a otro se puede efectuar a través de los sistemas hidrodinámicos de flujo potencial asociados a ambas ecuaciones de Schrödinger, ya que entre estos el cambio de fase que define el homeomorfismo no es más que una traslación. Para poder establecer dicho sistema hidrodinámico partiendo de la ecuación de onda y viceversa necesitamos utilizar propiedades que se derivan de la fórmula de Madelung (6). Este hecho nos conduce a formular de forma precisa la conexión entre el problema de la existencia de argumento para una función de onda dada y el de la derivación rigurosa del sistema hidrodinámico asociado a una ecuación de Schrödinger. De hecho, comenzaremos centrando nuestra atención sobre el primero y el flujo de trabajo nos lleva a resolver el segundo de forma paralela.

El problema de encontrar el argumento de una función compleja resulta de gran interés desde el punto de vista puramente matemático y tiene entidad propia fuera del contexto en el que trabajamos, ya que conlleva dificultades intrínsecas que resultan difíciles de tratar. La principal se plantea cuando trabajamos cerca de zonas

de vacío ( $|\psi| = 0$ ), ya que no se puede definir de forma razonable el argumento de cero. Este problema solo se puede evitar trabajando con funciones de módulo estrictamente positivo, lo que nos sitúa en el marco funcional del conjunto  $H^2_\delta(\Omega)$  que mencionamos en el teorema anterior. La segunda, más controvertida, está relacionada con el carácter multivaluado del argumento de un número complejo. Si entendemos, como es natural, que un argumento de  $\psi$  es una función  $S$  verificando la descomposición de Madelung (6), debemos observar que dicha fórmula no se puede invertir globalmente y por tanto la búsqueda de  $S$  debe efectuarse de forma indirecta, a través de una interpretación de (6) que permita determinar la función argumento de forma global *a posteriori*. En el contexto de las ecuaciones en derivadas parciales existen pocas aproximaciones a dicha reinterpretación, todas relativas a la ecuación (5), que es la que propone Kostin para describir la dinámica de Schrödinger–Langevin (pueden consultarse [7, 71, 76]), aunque resultan poco satisfactorias. En el Capítulo 4 discutimos algunas ideas que surgen a este respecto y nos damos cuenta que basta con derivar en la igualdad (6) para obtener la siguiente relación para  $S$  como potencial escalar del campo de velocidad asociado a  $\psi$ :

$$\nabla S = \alpha \operatorname{Im} \left( \frac{\nabla \psi}{\psi} \right) = m \frac{J}{n}, \quad (9)$$

donde  $n$  y  $J$  son las densidades local y de corriente relativas a la función de onda. Esta condición surge también de manera natural en la derivación de los modelos para obtener la formulación de flujo potencial de un sistema hidrodinámico. Además, la segunda igualdad de (9) depende solo de dos observables macroscópicos del sistema, lo que implica que dichas magnitudes determinan el estado cuántico del sistema (cf. Corolario 4.2.5). La interpretación de la descomposición de Madelung que nos proporciona la fórmula (9) consiste tan solo en encontrar un potencial escalar del campo de velocidades asociado a la función de onda, problema que se puede resolver aplicando resultados desarrollados en la literatura ([3] para la existencia y [4] para la regularidad), que imponen restricciones sobre la geometría del dominio  $\Omega$  donde vamos a trabajar. En concreto, la hipótesis de conexión simple de  $\Omega$  surge como condición técnica para encontrar potenciales escalares de un campo vectorial aprovechando los resultados clásicos y se destapa como inevitable para garantizar la existencia de argumento para una función compleja no nula. En la Sección 4.1 mostramos con un ejemplo la necesidad de esta condición que, no obstante, no resulta muy restrictiva para la aplicabilidad de los resultados. Por otra parte la interpretación del argumento basada en (9) requiere una condición de integrabilidad sobre todo el dominio para garantizar la dependencia continua de  $S$  respecto de la función de onda  $\psi$ . El cumplimiento de dicha condición, sin embargo, no es suficiente para asegurar la regularidad respecto del tiempo de  $S$  cuando  $\psi$  evoluciona temporalmente. Necesitamos imponer alguna ley de evolución temporal que permita probar dicha regularidad, y en estas condiciones vamos a ser capaces de demostrar el Teorema 4.3.2, que es fundamental para todos los resultados que le siguen.

**Teorema 3**

Sea  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  un dominio acotado, simplemente conexo y con frontera de clase  $C^1$ . Sean además  $\delta > 0$ ,  $T > 0$ , y  $\psi \in C([0, T], H_\delta^2(\Omega)) \cap C^1([0, T], L^2(\Omega))$  una solución de la siguiente ecuación de Schrödinger

$$i\partial_t \psi = -\frac{\alpha}{2m} \Delta \psi + \Theta[n, J] \psi,$$

donde  $\Theta : H_\delta^2(\Omega) \times H^1(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$  es un operador (no lineal) complejo y continuo. Entonces existe una familia numerable  $\mathbf{S}(\psi) = \{S^l\}_{l \in \mathbb{Z}} \subset C([0, T], H^2(\Omega)) \cap C^1([0, T], L^2(\Omega))$  tal que para cualquier  $S \in \mathbf{S}(\psi)$  se verifican las siguientes afirmaciones:

(i)  $\nabla S(t) = m \frac{J}{n}(t)$  para cualquier  $t \in [0, T]$  y

$$\psi(0, x) = \sqrt{n(0, x)} \exp \left\{ \frac{i}{\alpha} S(0, x) \right\} \quad \text{c.t. } x \in \Omega.$$

(ii)  $S$  satisface la siguiente ley de evolución:

$$\partial_t S = -\frac{\alpha^2}{\hbar^2} Q - \frac{m}{2} \frac{|J|^2}{n^2} - \alpha \operatorname{Re}(\Theta[n, J]).$$

Como consecuencia, para todo  $S \in \mathbf{S}(\psi)$  se verifica la descomposición de Madelung

$$\psi(t, x) = \sqrt{n(t, x)} \exp \left\{ \frac{i}{\alpha} S(t, x) \right\} \quad \forall t \in [0, T] \quad \text{c.t. } x \in \Omega.$$

Además  $\mathbf{S}(\psi)$  es única, ya que si  $S \in C([0, T], H^2(\Omega)) \cap C^1([0, T], L^2(\Omega))$  cumple la descomposición de Madelung de  $\psi$ , entonces  $S \in \mathbf{S}(\psi)$ .

Este resultado es clave para establecer el sistema hidrodinámico asociado a la ecuación de Schrödinger general que figura en el enunciado del teorema y pone de manifiesto la relación que ya mencionamos entre la cuestión de establecer dicho sistema y la existencia de  $S$ . De hecho, dos reescrituras adecuadas de la ecuación del apartado (ii) permiten dar una definición de  $S$  compatible con (9) por una parte y la ecuación de Hamilton–Jacobi que formalmente debe satisfacer la función  $S$  por otro. Es importante, además, que este teorema solo es aplicable cuando el potencial  $\Theta$  depende exclusivamente de los observables  $n$  y  $J$ , circunstancia que no se da cuando tratamos con la ecuación de Schrödinger–Langevin propuesta por Kostin.

Como hemos señalado anteriormente, la ecuación (5) constituye el modelo disipativo básico en la formulación de Schrödinger de la mecánica cuántica. De hecho, se puede entender como una reescritura de la ecuación maestra de Caldeira–Legget bajo dicho punto de vista y es formalmente equivalente (salvo restricciones obvias) a los sistemas hidrodinámicos cuánticos con fricción. Sin embargo existen muy pocas aproximaciones al estudio matemático riguroso de dicho modelo, ya que presenta dificultades desde la propia definición del mismo. De entrada es claro que (5) es una ecuación ambiguamente definida debido a la multivaluación de la correspondencia

$\psi \mapsto S(\psi)$ . Sin embargo, en [71] se da una interpretación objetiva y *a priori* de  $S$ , si bien no resulta completamente satisfactoria y la razón última de ello es que una elección concreta del argumento de la función de onda  $\psi$  modifica la ecuación de Schrödinger. Esta carencia estaría presente en cualquier lectura que podamos hacer de la fórmula (6), pero se puede solventar si somos capaces de modificar el término de fricción  $S\psi$  en la ecuación de Schrödinger–Langevin sin alterar el comportamiento observable del sistema. La clave para ello, que viene implícita en la propia derivación de Kostin, es considerar como término de fricción  $V_L \psi$ , con  $V_L$  determinado por

$$\nabla V_L = \operatorname{Im} \left( \frac{\nabla \psi}{\psi} \right), \quad \langle V_L \rangle = 0, \quad (10)$$

donde  $\langle A \rangle$  denota el valor esperado de la magnitud  $A$  respecto de la función de onda  $\psi$ . La propiedad esencial que exhibe  $V_L$  es que  $V_L = S - \langle S \rangle$  para cualquier  $S$  argumento de  $\psi$ , lo que genera independencia del término de fricción respecto de la elección del argumento y elimina cualquier ambigüedad en el tratamiento riguroso del término no lineal. De hecho, sustituyendo  $S$  por  $V_L$  en la ecuación de Schrödinger–Langevin seremos capaces de dar un tratamiento matemático adecuado a dicha ecuación. En concreto demostraremos la existencia y unicidad de solución local para el problema de tipo mixto asociado a la que denominaremos ecuación de Schrödinger–Langevin generalizada

$$i\partial_t \psi = -\frac{1}{2}\Delta \psi + V\psi + \Theta\psi + \lambda V_L \psi, \quad (11)$$

donde  $\Theta$  es un término genérico eventualmente no lineal que debe cumplir una propiedad de continuidad poco restrictiva. Estudiando la ecuación (10) de manera análoga a (9) y tratando adecuadamente  $V_L$  y  $\Theta$  en la frontera del dominio probamos el último resultado principal, cuyo enunciado preciso configura el Teorema 6.2.1.

#### Teorema 4

Sean  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  ( $1 \leq d \leq 3$ ),  $\lambda > 0$  y  $\psi_I \in H^2(\Omega)$ ,  $\psi_B \in H^{3/2}(\partial\Omega)$  separadas de cero y compatibles en la frontera del dominio. Si  $\Theta$  es localmente lipschitziana respecto de  $\|\cdot\|_{H^2}$  y está completamente determinada en  $\partial\Omega$ , entonces existe  $T > 0$  y una única solución  $(\psi, \Theta, V_L)$  en  $[0, T]$  del problema de tipo mixto asociado a (11) con condiciones iniciales  $\psi_I$  y  $\psi_B$  respectivamente, donde  $\Theta = \Theta(\psi)$  y se tiene que

$$\begin{aligned} \psi &\in C([0, T], H^2_\delta(\Omega)) \cap C^1([0, T], L^2(\Omega)), \\ V_L &\in C([0, T], H^2(\Omega)) \cap C^1([0, T], L^2(\Omega)) \quad y \\ \Theta &\in C([0, T], H^2(\Omega)). \end{aligned}$$

Este resultado admite múltiples interpretaciones del potencial efectivo  $\Theta$ , propiedad de la que sacamos partido para establecer el buen planteamiento local del siguiente sistema de Schrödinger–Langevin–Poisson con entalpía que surge en el estudio de dispositivos semiconductores como equivalente a los sistemas hidrodinámicos

cuánticos con fricción y efectos de presión [71]:

$$\begin{aligned} i\partial_t\psi &= -\frac{1}{2}\Delta\psi + V\psi + U\psi + \lambda V_L\psi, \\ \lambda_D^2\Delta V &= \mathcal{C} - n, \\ V|_{\partial\Omega} &= V_B, \end{aligned}$$

donde  $\lambda_D > 0$  es la longitud de Debye,  $\lambda > 0$  el coeficiente de fricción,  $\mathcal{C} = \mathcal{C}(x)$  la concentración de dopaje del dispositivo,  $n = |\psi|^2$  la densidad local asociada a la función de onda  $\psi$  y  $V_B$  es el valor del potencial de Poisson en la frontera del dispositivo. Además  $U$  es un potencial efectivo que representa la entalpía del sistema, que describe los efectos de la presión en la formulación de Schrödinger. Dicho teorema de existencia y unicidad de solución, cuya formulación concreta da pie al Teorema 6.3.1 del Capítulo 6 es el último resultado de esta memoria de tesis.

El resumen del trabajo realizado es el siguiente: en el Capítulo 1 fijamos alguna notación que permanecerá inalterada a lo largo de todo el texto y destacamos algunos resultados no elementales que nos van a ser de utilidad. Los dos capítulos siguientes están orientados a la derivación y validación numérica del modelo de Schrödinger disipativo SLD (ecuación (7)), de manera que en el Capítulo 2 partimos de la ecuación maestra (3) a través de la ecuación de Wigner–Fokker–Planck, construimos el sistema hidrodinámico formado por sus dos primeros momentos en velocidad, establecemos condiciones de cierre precisas para dicho sistema, obtenemos la familia de ecuaciones SLD y finalizamos discutiendo sobre los términos no lineales  $U$  y  $F$  que aparecen en el modelo, ofreciendo condiciones suficientes que permiten simplificarlo. Asimismo, dedicaremos el tercer capítulo a explorar casos particulares de la familia SLD, estudiando sus soluciones en algunos casos sencillos y testando una versión linealizada mediante comparación con la ecuación de Wigner–Fokker–Planck. En estos dos capítulos nuestra intención es conocer en una primera aproximación el modelo que proponemos, por lo que se supondrá siempre la regularidad necesaria de las funciones que intervienen, así como aquellas hipótesis que puedan ser necesarias para efectuar los cálculos.

En los tres últimos capítulos nuestro objetivo es establecer con precisión varios teoremas referentes al buen planteamiento de algunos modelos cuánticos disipativos en la formulación de onda, por lo que otorgamos un tratamiento totalmente riguroso a los elementos que aparecen en nuestros modelos, a las hipótesis requeridas y los resultados demostrados. El Capítulo 4 está dedicado a discutir la interpretación rigurosa de la descomposición de Madelung (6) de una función compleja  $\psi$  lo que será de utilidad en la búsqueda de un argumento  $S$  para dicha  $\psi$ . Asimismo calcularemos  $S$  aprovechando dicha interpretación, en una primera aproximación para funciones de onda independientes del tiempo y posteriormente para soluciones de una ecuación de Schrödinger general. De este modo podremos establecer la conexión entre las formulaciones de onda e hidrodinámica de flujo potencial de un fenómeno disipativo. En el Capítulo 5 estudiamos el modelo SLC (ecuación (8)), dando en principio un esquema de la derivación, estableciendo más tarde de forma rigurosa la equivalencia entre dicha ecuación y la ecuación de Schrödinger puramente logarítmica y aprovechando finalmente el buen planteamiento de esta última

---

para probar existencia y unicidad de solución local al problema de tipo mixto asociado a SLC. Finalmente el Capítulo 6 tiene como objetivo estudiar la ecuación de Schrödinger–Langevin, motivando la interpretación del término de fricción que hemos anunciado y demostrando el buen planteamiento local de la ecuación de Schrödinger–Langevin generalizada (11) bajo este criterio. En la última sección de dicho capítulo aprovechamos la generalidad del teorema de existencia demostrado para aplicarlo en la resolución del problema de tipo mixto asociado al sistema de Schrödinger–Langevin–Poisson con entalpía.



# Preliminares

---

## 1.1. Notación

En la elaboración de esta memoria de tesis hemos trabajado con conceptos, constantes y ecuaciones conocidas tanto en Matemáticas como en Física, intentando utilizar la nomenclatura más extendida para cada símbolo nuevo que aparece y explicar su significado con precisión. No obstante la literatura es inabarcable y en ocasiones la terminología matemática difiere de la física, lo que en algunas ocasiones puede generar confusión. Hemos creído conveniente fijar en este punto alguna notación e introducir la mínima terminología nueva posible para evitar así cualquier tipo de ambigüedad, facilitar al máximo el seguimiento del texto y proporcionar un punto de consulta al lector interesado en capítulos sueltos. Del mismo modo recogemos en este primer capítulo algunos resultados que nos serán de utilidad, unos básicos pero que conviene establecer con precisión en nuestro contexto y otros más avanzados que sirven de herramienta para nuestros propósitos.

En primer lugar es destacable el hecho de que vamos a trabajar con funciones y números complejos. De este modo, para  $z \in \mathbb{C}$  denominaremos  $\text{Re}(z)$  e  $\text{Im}(z)$  a las partes real e imaginaria de  $z$ , respectivamente, mientras que  $\bar{z}$  y  $\log(z)$  denotarán el número complejo conjugado y el logaritmo neperiano de  $z$ . En particular representaremos la unidad imaginaria de  $\mathbb{C}$  como  $i$ , evitando utilizar esta letra como índice en sumas o sucesiones. A lo largo del texto utilizamos, además, las constantes universales  $\hbar$  y  $k_B$ , que representan la constante de Planck reducida (esto es, dividida entre  $2\pi$ ) y la constante de Boltzmann, respectivamente. Aparte de estas, existen símbolos cuyo significado va a permanecer inalterado a lo largo de todo el texto:  $m$  es la masa efectiva del sistema físico que consideremos,  $\omega_0$  es la frecuencia de un oscilador armónico,  $\lambda_D$  es la longitud de Debye de un dispositivo semiconductor, mientras que  $\lambda$  representa el coeficiente de fricción de un sistema disipativo. Del mismo modo  $T$  y  $T^*$  serán límites superiores de intervalos temporales,  $\delta > 0$  el límite inferior de funciones separadas de cero,  $\Omega$  un dominio acotado del espacio  $\mathbb{R}^d$  y  $V$  representa un potencial externo o el potencial de Poisson. Respecto a la ecuación de Wigner–Fokker–Planck denotaremos  $\Omega_0$ ,  $T_0$  y  $\eta$  a la frecuencia máxima, temperatura y constante de acoplamiento del baño térmico, respectivamente, mientras que  $D_{pp}$ ,  $D_{pq}$  y  $D_{qq}$  son las constantes que describen la interacción entre el

sistema físico y el baño térmico (véase el Capítulo 2), que también aparecerán en la formulación de nuestros modelos de Schrödinger. Usaremos a menudo  $\alpha = 2mD_{qq}$ , que desempeña el rol de unidad de acción en las ecuaciones que contienen efectos difusivos.

En un sistema cuántico se utiliza típicamente  $W$  para denotar la función de Wigner y  $\psi$  para la función de onda (aunque también utilizaremos  $\varphi$  y  $\phi$  según convenga), mientras que  $S_\psi$  (o simplemente  $S$ ) representa su función argumento. Utilizaremos además  $n$  y  $J$  para denotar las densidades local y de corriente que pueden conformar un sistema hidrodinámico autoconsistente o venir ligadas tanto a una función de Wigner como a una función de onda. Como pretendemos que siempre quede claro de cuál estamos hablando en cada caso, usaremos subíndices ( $n_\psi$ , por ejemplo, para denotar la densidad local asociada a  $\psi$ ) si puede haber lugar a confusión.

En cuanto a los símbolos diferenciales, denotaremos  $\partial_z$  la derivada parcial con respecto a la variable  $z$ , aunque eliminaremos por comodidad el subíndice cuando la derivada sea respecto de la variable espacial, usando preferentemente notación vectorial y tensorial: si  $f$  es un campo escalar denotaremos  $\nabla f$ ,  $\Delta f$  y  $(\nabla \otimes \nabla)f$  (con el correspondiente subíndice si procede) a los operadores gradiente, laplaciano (en el sentido adecuado) y matriz hessiana de  $f$ . Cuando  $v$  y  $w$  sean campos vectoriales usaremos  $\nabla \otimes v$  para la matriz jacobiana y  $\text{div}(v)$ ,  $\text{rot}(v)$ ,  $\Delta v$  para la divergencia, el rotacional y el laplaciano (entendido componente a componente) de  $v$ , así como la simbología  $(v \cdot \nabla)w$  y  $(\nabla \otimes v)w$  para los siguientes operadores vectoriales en  $\mathbb{R}^d$ :

$$[(v \cdot \nabla)w]_r = \sum_{s=1}^d v_s \partial_{x_s} w_r, \quad [(\nabla \otimes v)w]_r = \sum_{s=1}^d w_s \partial_{x_r} v_s,$$

y  $\text{Sym}(v \otimes w) = \frac{1}{2}(v \otimes w + w \otimes v)$  para la simetrización del tensor  $v \otimes w$ . Además, si  $A$  es un tensor de rango 2 denotaremos  $\text{div}(A)$  el vector formado por las divergencias de las filas de  $A$ .

Respecto a los espacios funcionales, trabajaremos en el contexto de los espacios  $L^p$  y de Sobolev  $W^{k,p}$  (definidos, entre otros buenos textos, como en [20]) conservando la notación estándar  $H^k = W^{k,2}$  para  $k \in \mathbb{Z}$ , e incluyendo así aquellos de exponente negativo (véase [1]). Si en algún momento tratamos con derivadas cuyo sentido está sin determinar, las entenderemos en el sentido distribucional. En alguna ocasión utilizaremos espacios de funciones continuas o hölderianas, respetando la nomenclatura estándar  $C(Z; X)$  y  $C^{k,\gamma}(Z; X)$  respectivamente, y suprimiendo eventualmente el espacio de llegada si tratamos con funciones con valores en  $\mathbb{R}^d$  o  $\mathbb{C}^d$ . En este sentido, debemos tener siempre presente que vamos a tratar con campos tanto escalares como vectoriales y de distinta naturaleza:  $\psi$  toma valores complejos, en tanto que el argumento y la densidad local son campos escalares reales y  $\nabla\psi$  es un campo vectorial (complejo). No obstante utilizaremos la notación estándar para los espacios funcionales sin explicitar ninguna de estas diferencias, usando  $\psi \in L^2(\Omega)$ ,  $n \in L^2(\Omega)$  o  $\nabla\psi \in L^2(\Omega)$ , por ejemplo, en lugar de una simbología más concreta y haciendo hincapié en dicha ambigüedad solo si es relevante o puede generarse algún tipo de confusión. Cuando tratemos con campos vectoriales,

utilizaremos tácitamente la norma del máximo entre las componentes, es decir,

$$\|f\|_{X^d} = \max\{\|f_1\|_X, \dots, \|f_d\|_X\}.$$

Como el dominio  $\Omega$  en el que trabajamos va a estar prefijado, suprimiremos la dependencia del mismo en la notación de las normas, escribiendo  $\|\cdot\|_{L^2}$  en lugar de  $\|\cdot\|_{L^2(\Omega)}$ .

Finalmente, con el objeto de simplificar la escritura y dado que trabajaremos con regularidad  $H^2$ , introducimos la siguiente notación: si  $H$  es un subconjunto de  $L^2(\Omega)$  y  $\delta > 0$ , denotamos

$$H_\delta = \left\{ \varphi \in H : |\varphi| > \delta \text{ c.t. } x \in \Omega \right\},$$

donde la abreviatura “c.t.” responde a “para casi todo punto” (es decir, salvo en un conjunto de medida nula). Por otra parte, para  $T > 0$  definimos

$$X^T = C([0, T]; H^2(\Omega)) \cap C^1([0, T]; L^2(\Omega))$$

y, por coherencia con las definiciones previas,

$$X_\delta^T = \left\{ \varphi \in X^T : |\varphi| > \delta \text{ c.t. } x \in \Omega, \forall 0 \leq t < T \right\}.$$

Los espacios  $X^T$  y  $X_\delta^T$  constituyen el marco funcional adecuado para el trabajo que desarrollamos seguidamente.

## 1.2. Comentarios y resultados útiles

El tratamiento riguroso de las ecuaciones en derivadas parciales que vamos a estudiar se centra en el análisis de problemas de tipo mixto sobre dominios acotados  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ , exigiendo la regularidad apropiada a la frontera de dicho dominio en función del resultado que pretendemos obtener. Entenderemos esta regularidad en la forma estándar:  $\Omega$  es un dominio con frontera lipschitziana (respectivamente de clase  $k$ ,  $k \in \mathbb{N}$ ) si existe  $f : \partial\Omega \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{d-1}$  un homeomorfismo local tal que  $f$  es lipschitziana (respectivamente de clase  $k$ ) en un entorno de  $\partial\Omega$ . Además, debemos trabajar con condiciones iniciales  $\psi_I$  y de contorno  $\psi_B$  que deben ser compatibles, en el sentido de que  $\psi_I|_{\partial\Omega} = \psi_B$ , donde  $\varphi|_{\partial\Omega} = \mathbf{T}_{\partial\Omega}(\varphi)$  es el operador traza en la frontera de  $\Omega$  aplicado a  $\varphi$  (el lector interesado puede consultar [1]). Si consideramos  $W_0^{k,p}(\Omega)$ , la clausura de las funciones test en  $\Omega$  respecto de la norma  $\|\cdot\|_{W^{k,p}}$ , se verifica la propiedad estándar de la traza:  $\psi, \varphi \in W^{k,p}(\Omega)$  verifican  $\psi|_{\partial\Omega} = \varphi|_{\partial\Omega}$ , si y solo si  $\psi - \varphi \in W_0^{k,p}(\Omega)$ , propiedad que tendremos presente y utilizaremos cuando sea necesario. Las propiedades del operador  $\mathbf{T}_{\partial\Omega}$  establecen que si  $\psi_I \in W^{k,p}(\Omega)$ , entonces la condición de regularidad  $\psi_B \in W^{k,p-\frac{1}{p}}(\partial\Omega)$  es la más natural que se puede imponer al dato en la frontera y seguiremos este criterio cuando fijemos las hipótesis de nuestros problemas. Es importante destacar, sin embargo, que las condiciones con las que trabajaremos implican  $kp > d$  y nos permiten, por tanto,

aplicar el teorema de compacidad de Rellich–Kondrachov (véase [20], por ejemplo) y dar de esta manera sentido puntual a  $\psi_I$  en todo  $\overline{\Omega}$  y, como consecuencia, a  $\psi_B$  en  $\partial\Omega$ , evitando así tener que trabajar en espacios de Sobolev definidos sobre variedades y las dificultades técnicas que esto podría entrañar. En particular, podemos aplicar el siguiente resultado clásico para encontrar extensiones armónicas de elementos de  $W^{k,p-\frac{1}{p}}(\partial\Omega)$  a todo  $\Omega$  (la demostración puede encontrarse en [52], páginas 26 y 27 para la existencia y 15 para la unicidad).

**Lema 1.2.1**

Sean  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  un dominio acotado con frontera de clase  $C^2$  y  $g \in C(\partial\Omega)$ . Entonces el problema de Dirichlet para la ecuación de Laplace tiene una única solución clásica, es decir, existe una única  $u \in C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$  armónica en  $\Omega$  y tal que  $u|_{\partial\Omega} = g$ .

Para estimar la norma de dichas extensiones armónicas y ofrecer un tratamiento adecuado a los términos no lineales con los que trabajamos, necesitamos el siguiente resultado de dependencia continua de las soluciones de un problema elíptico en  $L^2(\Omega)$ .

**Lema 1.2.2**

Sean  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  un dominio acotado con frontera de clase  $C^2$  y  $f \in L^2(\Omega)$ . Entonces existe una única  $u \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$  solución (fuerte) de  $-\Delta u = f$  y  $C(\Omega) > 0$  tal que  $\|u\|_{H^2} \leq C\|f\|_{L^2}$ .

DEMOSTRACIÓN:

Aplicando el Teorema de Lax–Milgram (véase [20]) a los operadores

$$a(u, v) = \int_{\Omega} \nabla u(x) \nabla v(x) \, dx \quad \text{y} \quad \varphi(v) = \int_{\Omega} f(x)v(x) \, dx$$

obtenemos  $u \in H_0^1(\Omega)$  tal que  $-\Delta u = f$  en  $\Omega$  en sentido débil, que en particular verifica  $-\Delta u + u = f + u$  también en sentido débil. Es conocido (véase por ejemplo [20], Teoremas IX.21 y IX.25) que existe un única  $v \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$  solución de  $-\Delta v + v = f + u$  que cumple  $\|v\|_{H^2} \leq C_1\|f + u\|_{L^2}$ , donde  $C_1 > 0$  solo depende de  $\Omega$ . Además  $v$  es única, por lo que  $u = v$  y se tiene, por tanto, la estimación  $\|u\|_{H^2} \leq C_1(\|f\|_{L^2} + \|u\|_{L^2})$ . Aplicando ahora la desigualdad de Poincaré obtenemos  $C_2(\Omega) > 0$  tal que  $\|u\|_{H^2} \leq C_1\|f\|_{L^2} + C_2\|\nabla u\|_{L^2}$ . Por último basta observar que  $-\Delta u = f$  en sentido débil, luego tomando como test la propia  $u$  y usando las desigualdades de Cauchy-Schwarz primero y Poincaré después se tiene que  $\|\nabla u\|_{L^2}^2 \leq C_2\|f\|_{L^2}\|\nabla u\|_{L^2}$ . Por tanto, tomando  $C = C_1 + C_2^2$  tenemos completa la prueba.  $\square$

En las estimaciones sacaremos provecho de que el producto de funciones de  $H^2(\Omega)$  es también un elemento de  $H^2(\Omega)$ , resultado que se puede consultar en [1] (Teorema 4.39), por ejemplo, en un caso mucho más general.

**Lema 1.2.3**

Sea  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  ( $1 \leq d \leq 3$ ) un dominio acotado con frontera de clase  $C^1$ . Entonces  $H^2(\Omega)$  es un álgebra de Banach. Concretamente, existe  $C(\Omega) > 0$  tal que

$$\|\psi\varphi\|_{H^2} \leq C\|\psi\|_{H^2}\|\varphi\|_{H^2}$$

para cualesquiera  $\psi, \varphi \in H^2(\Omega)$ .

La última propiedad de los espacios de Sobolev que consideramos destacable es la regla de la cadena para la derivada débil (Teorema 6.16 en [77]).

**Lema 1.2.4**

Sean  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  un dominio acotado,  $I \subset \mathbb{R}$  un intervalo,  $h : I \rightarrow \mathbb{C}$  una función de clase  $C^1$  con derivada acotada,  $u \in W_{loc}^{1,p}(\Omega)$  y supongamos que  $u(\Omega) \subset I$ . Entonces, para  $U : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$  definida por  $U(x) = h(u(x))$  c.t.  $x \in \Omega$ , se tiene que  $U \in W_{loc}^{1,p}(\Omega)$  y se verifica la regla de la cadena

$$\nabla U(x) = h'(u(x))\nabla u(x) \quad \text{c.t. } x \in \Omega.$$

Además, si  $u \in W^{1,p}(\Omega)$  entonces  $U \in W^{1,p}(\Omega)$ .

Basaremos los resultados de existencia de soluciones en argumentos de punto fijo, por lo que necesitamos conocer algunas propiedades del propagador lineal de la ecuación de Schrödinger. Lo haremos basándonos en la teoría general de semigrupos (puede consultarse [95], por ejemplo) en espacios de Banach. En nuestro caso consideraremos  $X = L^2(\Omega)$  y  $A = iD\Delta$  el operador (no acotado) definido en  $L^2(\Omega)$  con dominio  $\mathcal{D} = H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ , donde  $D$  es una constante positiva arbitraria. Con esta definición es claro que  $\mathcal{D}$  es denso en  $L^2(\Omega)$  y  $D\Delta$  es autoadjunto, luego existe un operador lineal (no acotado)  $\overline{D\Delta}$ , definido en el dual topológico de  $\mathcal{D}$  (que denotaremos  $\mathcal{D}'$ ), con dominio  $L^2(\Omega)$  y tal que  $\overline{D\Delta}u = D\Delta u$  para cualquier  $u \in \mathcal{D}$ . Bajo esta perspectiva, el laplaciano de una función suave  $u$  que no se anula en  $\partial\Omega$  puede asumir dos valores en principio distintos: el correspondiente a la definición clásica  $\Delta u$  y  $\overline{D\Delta}u$ . Esto no genera conflicto, sin embargo, porque ambas interpretaciones conducen al mismo resultado, como ponemos de manifiesto en el siguiente lema.

**Lema 1.2.5**

Sean  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  un dominio acotado con frontera de clase  $C^2$  y  $u \in C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$  armónica. Entonces  $\overline{D\Delta}u = 0$ .

DEMOSTRACIÓN:

Si  $u$  es idénticamente nula no hay nada que probar. En otro caso se tiene que  $u|_{\partial\Omega}$  es una función continua y no idénticamente nula en  $\partial\Omega$  (en virtud del Principio del Máximo). Usamos la densidad de  $\mathcal{D}$  en  $L^2(\Omega)$  para obtener una sucesión  $\{u_k\}_{k \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{D}$  que converge hacia  $u$  en  $L^2(\Omega)$ . Como  $\overline{D\Delta}$  es un operador lineal y acotado sobre  $L^2(\Omega)$  tenemos que  $\overline{D\Delta}u \in L^2(\Omega)$  y  $\Delta u_k \rightarrow \overline{D\Delta}u$  en  $L^2(\Omega)$ . En particular

$$\int_{\Omega} u_k(x)\Delta v(x) dx \rightarrow \int_{\Omega} u(x)\Delta v(x) dx \quad \text{y} \quad \int_{\Omega} \Delta u_k(x)v(x) dx \rightarrow \int_{\Omega} \overline{D\Delta}u(x)v(x) dx$$

para cualquier  $v \in C_c^\infty(\Omega)$ , por lo que

$$\int_{\Omega} \overline{\Delta u}(x)v(x) dx = \int_{\Omega} u(x)\Delta v(x) dx \quad \forall v \in C_c^\infty(\Omega).$$

La regularidad de  $u$  nos permite utilizar el Teorema de la Divergencia en el segundo miembro para obtener

$$\int_{\Omega} \overline{\Delta u}(x)v(x) dx = \int_{\Omega} \Delta u(x)v(x) dx = 0 \quad \forall v \in C_c^\infty(\Omega),$$

donde hemos usado que  $u$  es armónica. La prueba concluye gracias al Lema Fundamental del Cálculo de Variaciones.  $\square$

El Lema 1.2.5 servirá para estimar en norma  $\|\cdot\|_{H^2}$  la acción del propagador de Schrödinger en dominios acotados. Para definirlo, basta aplicar el Teorema de Stone (véase [95], teorema 1.10.8) para obtener un grupo fuertemente continuo de operadores  $\{e^{iD\Delta t}\}_{t \in \mathbb{R}}$  con generador infinitesimal  $A$ , de manera que para cada  $t \in \mathbb{R}$ ,  $e^{iD\Delta t}$  es una isometría sobre  $L^2(\Omega)$  y sobre  $\mathcal{D}$  (aunque no es una isometría de  $H^2(\Omega)$ ). Una primera propiedad abstracta de dicho grupo es la siguiente, que nos será de mucha utilidad para demostrar la regularidad adecuada de las soluciones de las ecuaciones de Schrödinger no lineales abordadas (véase el teorema 1.2.8 en [95]).

**Lema 1.2.6**

Sean  $X$  un espacio de Banach,  $U(t)$  un semigrupo fuertemente continuo y  $A$  su generador infinitesimal con dominio  $\mathcal{D}$ . Entonces, para cada  $x \in \mathcal{D}$  y  $t, s \geq 0$  se tiene que

$$U(t)x - U(s)x = \int_s^t U(\tau)Ax d\tau = \int_s^t AU(\tau)x d\tau.$$

El siguiente resultado establece la conexión entre la ecuación de Schrödinger no homogénea y su formulación integral asociada, que permite trabajar aprovechando las propiedades de  $\{e^{iD\Delta t}\}_{t \in \mathbb{R}}$ . Su demostración puede consultarse, por ejemplo, en [25].

**Lema 1.2.7**

Sean  $X$  un espacio de Hilbert,  $A$  un operador autoadjunto y definido negativo con dominio  $\mathcal{D}$  y  $T > 0$ . Entonces, para cualquier  $f \in C([0, T], X)$  y  $g \in X$  existe una única solución del problema

$$\begin{aligned} \psi &\in C([0, T], X) \cap C^1([0, T], \mathcal{D}'), \\ i\partial_t \psi + \overline{A}\psi + f &= 0, \\ \psi(0) &= g, \end{aligned}$$

donde  $\mathcal{D}'$  denota el dual topológico de  $\mathcal{D}$  y  $\overline{A}$  representa la extensión de  $A$  a todo  $X$ . Además,  $\psi \in C([0, T], X)$  es una solución de este problema si y solo si verifica

la siguiente ecuación integral:

$$\psi(t) = e^{iAt}g + i \int_0^t e^{iA(t-\tau)} f(\tau) d\tau, \quad \forall t \in [0, T],$$

donde  $e^{iAt}$  es el grupo de isometrías con generador infinitesimal  $iA$ . Más aún, si  $g \in \mathcal{D}$  y  $f \in W^{1,1}((0, T), X)$  o  $f \in L^1((0, T), \mathcal{D})$ , entonces  $\psi \in C([0, T], \mathcal{D}) \cap C^1([0, T], X)$ .

La aplicación del Lema 1.2.7 requiere un conocimiento previo del término no homogéneo en la ecuación de Schrödinger, de manera que si este no toma valores en  $\mathcal{D}$  se requiere regularidad temporal. En este contexto la condición de Lipschitz es suficiente para establecer estimaciones sobre la derivada con respecto al tiempo. El siguiente lema, que puede encontrarse en [23], será nuestra herramienta para materializar dichas cotas.

**Lema 1.2.8**

Sea  $X$  un espacio de Banach reflexivo,  $I \subset \mathbb{R}$  un intervalo y  $f : I \rightarrow X$  una aplicación lipschitziana y acotada. Entonces  $f \in W^{1,\infty}(I, X)$  y  $\|f'\|_{L^\infty(I, X)} \leq L$ , donde  $L > 0$  es la constante de Lipschitz de  $f$ .

Por último, vamos a exponer dos resultados que serán de gran importancia en lo referente al cálculo de un potencial escalar asociado a un campo vectorial conocido. El primero (Teorema 1 en [3]) establece existencia del mismo bajo hipótesis de conexión simple del dominio y basándose en propiedades clásicas del análisis vectorial.

**Teorema 1.2.9**

Sea  $f \in H^{-k}(\Omega)$  con  $k \geq 0$  entero. Los siguientes enunciados son equivalentes:

- (i)  $H^{-m}(\Omega) \langle f, \varphi \rangle_{H_0^m(\Omega)} = 0$  para toda  $\varphi \in V_m = \{\varphi \in (H_0^m(\Omega))^3 : \operatorname{div} \varphi = 0\}$ .
- (ii)  $H^{-m}(\Omega) \langle f, \varphi \rangle_{H_0^m(\Omega)} = 0$  para toda  $\varphi \in V = \{\varphi \in (\mathcal{D}(\Omega))^3 : \operatorname{div} \varphi = 0\}$ .
- (iii) Existe una distribución  $\chi \in H^{-m+1}(\Omega)$ , única salvo constantes aditivas, tal que  $f = \nabla \chi$  en  $\Omega$ .

Si además  $\Omega$  es simplemente conexo, entonces las tres afirmaciones anteriores son equivalentes a:

- (iv)  $\operatorname{rot}(f) = 0$  en  $\Omega$ .

El segundo (Proposición 2.10 en [4]) proporciona la regularidad de una distribución basándose en la de su gradiente y bajo una condición de integrabilidad global.

**Teorema 1.2.10**

Sean  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  un dominio acotado con frontera lipschitziana,  $k$  un número entero y  $p$  un número real tal que  $1 < p < \infty$ .

- (i) Si  $f$  es una distribución cuyo gradiente pertenece a  $W^{k-1,p}(\Omega)$ , entonces  $f$  pertenece a  $W^{k,p}(\Omega)$ . Además, si  $\Omega$  es conexo, entonces existe una constante  $C > 0$  tal que se verifica la siguiente desigualdad:

$$\forall [f] \in W^{k,p}(\Omega)/\mathbb{R}, \quad \|[f]\|_{W^{k,p}/\mathbb{R}} \leq C \|\nabla f\|_{W^{k-1,p}}.$$

Si  $\Omega$  es arbitrario (no necesariamente acotado ni con frontera lipschitziana), entonces  $f$  pertenece a  $W_{loc}^{k,p}(\Omega)$ .

- (ii) Si  $k \geq 0$  y  $\Omega$  es conexo, existe una constante  $C > 0$  tal que todas las distribuciones  $f$  que satisfacen  $\nabla f \in W^{k-1,p}(\Omega)$  y  $\int_{\Omega} f(x) dx = 0$  verifican la estimación

$$\|f\|_{W^{k,p}} \leq C \|\nabla f\|_{W^{k-1,p}}.$$

# Derivación de una ecuación de Schrödinger multidimensional que representa la hidrodinámica de Wigner–Fokker–Planck

---

Si consideramos el movimiento de un sistema cuántico aislado (sin efectos de disipación) bajo la acción de un potencial externo, es conocido que la transformada de Wigner y su inversa establecen una equivalencia entre las ecuaciones lineales de Wigner y de Schrödinger. Sin embargo esta equivalencia se pierde en general si introducimos efectos de disipación en la formulación cinética. El objetivo de este capítulo es derivar una familia de ecuaciones de Schrödinger disipativas que describan la misma hidrodinámica que la ecuación de Wigner–Fokker–Planck. Para ello formularemos el sistema de los momentos hidrodinámicos de orden más bajo, que no es cerrado, y le impondremos relaciones de clausura adecuadas para hacerlo autoconsistente, obteniendo de esta forma el módulo y el argumento de una función de onda cuyas densidades de posición y de corriente coinciden con las de la función de Wigner original. La evolución temporal de dicha función de onda determina la ecuación de Schrödinger buscada, que aúna efectos de fricción y difusión. En la última sección de este capítulo estudiaremos algunos casos particulares del modelo derivado y discutiremos condiciones sobre la física del sistema que verifiquen las hipótesis necesarias impuestas en la derivación. A lo largo de todo el capítulo supondremos cierta la regularidad que sea necesaria para poder llevar a cabo los cálculos.

## 2.1. Desde la ecuación maestra hasta el sistema hidrodinámico asociado a la ecuación de Wigner–Fokker–Planck

Consideramos un sistema cuántico representado por una partícula en  $\mathbb{R}^d$ , sometido a la influencia de un potencial  $V = V(t, x)$  e interactuando con un baño térmico idealizado por un conjunto infinito de osciladores armónicos en equilibrio térmico. Para estudiar la evolución del sistema teniendo en cuenta la influencia del baño consideramos  $R = R(t)$  el operador de densidad reducido del sistema (lineal, autoadjunto, definido positivo y de clase traza para todos los instantes de tiempo) y partimos de (3), la generalización del modelo de Caldeira–Leggett [21] obtenida en [41] y reescrita en términos del núcleo integral de  $R$ , de modo que considerando  $\rho = \rho(x, y, t)$  tal que

$$(R(t)\phi)(x) = \int_{\mathbb{R}^d} \phi(y)\rho(x, y, t) dy$$

para cualquier función de onda  $\phi$ , entonces la evolución temporal de  $\rho$  viene descrita por

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} = & -\frac{i}{\hbar}(H_x - H_y)\rho - \lambda(x - y) \cdot (\nabla_x - \nabla_y)\rho \\ & + \left( D_{qq}|\nabla_x + \nabla_y|^2 - \frac{D_{pp}}{\hbar^2}|x - y|^2 - \frac{2i}{\hbar}D_{pq}(x - y) \cdot (\nabla_x + \nabla_y) \right)\rho, \end{aligned} \quad (2.1)$$

donde  $m$  es la masa efectiva del sistema y  $\lambda, D_{pp}, D_{pq}, D_{qq}$  son las constantes que describen la interacción del mismo con el baño térmico

$$\lambda = \frac{\eta}{2m}, \quad D_{pp} = \eta k_B T_0, \quad D_{pq} = \frac{\eta \Omega_0 \hbar^2}{12\pi m k_B T_0}, \quad D_{qq} = \frac{\eta \hbar^2}{12m^2 k_B T_0}. \quad (2.2)$$

Además  $H$  es el hamiltoniano renormalizado del sistema,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_r(\cdot, t), \quad (2.3)$$

y los subíndices en (2.1) indican la variable sobre la que actúan. En la notación de (2.3),  $V_r$  denota el potencial renormalizado, que no es más que una perturbación de  $V$  causada por la vibración de los osciladores del baño (en el caso del oscilador armónico,  $V_r$  es otro oscilador armónico con frecuencia desplazada [21]. En [68] se pueden consultar más detalles sobre la normalización del potencial externo). En la ecuación (2.1), el primer sumando del segundo miembro responde a la evolución hamiltoniana, el término con coeficiente  $\lambda$  es disipativo y los demás son difusivos. Esta ecuación maestra surge como aproximación markoviana de la evolución (no markoviana) del sistema inmerso en el baño de osciladores, tras tomar traza parcial respecto de los grados de libertad del baño. Dicha aproximación se basa en una expansión asintótica de las funciones de correlación sistema–baño en términos del

parámetro  $\mu = \frac{\lambda\hbar}{k_B T_0}$  hasta orden  $O(\mu^2)$ , dando lugar así a una generalización de la ecuación maestra de Caldeira–Leggett, que se recupera obviando los términos con coeficientes  $D_{pq}$  y  $D_{qq}$ , ambos de orden  $O(\mu)$ . En [42] se prueba que esta aproximación es aplicable si la longitud de coherencia del estado del sistema es mayor que la longitud de onda de De Broglie  $\Lambda_{dB} = \hbar/\sqrt{4mk_B T_0}$ . Si además eliminamos el término de coeficiente  $\lambda$  obtenemos una aproximación de orden  $O(\mu)$  (límite de temperaturas muy altas) en la que se ignoran los efectos de disipación resultantes de la acción del entorno.

Tras la aproximación markoviana antes descrita, la interacción del sistema con el baño térmico queda determinada por tres parámetros positivos:  $\eta$  es la constante de acoplamiento sistema–baño y se puede interpretar como un coeficiente de viscosidad,  $T_0$  es la temperatura de equilibrio del baño y  $\Omega_0$  es la frecuencia máxima de los osciladores que lo componen. Este modelo, al igual que el de Caldeira–Leggett, tiene restricciones de aplicación y por tanto dichas constantes no son libres. Las hipótesis principales sobre los parámetros que garantizan la validez de (2.1) (véase [41] para una exposición más detallada) son:

- (i) Temperaturas medias y altas:  $\Omega_0 \lesssim \frac{k_B T_0}{\hbar}$ .
- (ii) La escala de tiempo característica del sistema es mucho mayor que  $\tau_C = \frac{1}{\Omega_0}$ , el tiempo de memoria del baño.
- (iii) Acoplamiento débil:  $\lambda \ll \Omega_0$ .

Bajo estas hipótesis, los coeficientes definidos en (2.2) satisfacen la relación

$$D_{pp}D_{qq} - D_{pq}^2 \geq \frac{\hbar^2 \lambda^2}{4}, \quad (2.4)$$

que implica que la ecuación (2.1) se puede escribir en la forma de Lindblad y por tanto conserva la positividad del operador de densidad (la demostración de este hecho puede consultarse en [11]). De esta manera, la incorporación del término difusivo de coeficiente  $D_{qq}$  a la ecuación puramente friccional permite describir las propiedades observables de la dinámica de Langevin mediante un operador de densidad que evoluciona en el tiempo conservando la positividad, por lo que consideraremos este modelo como el punto de partida de nuestro estudio. Para tratarlo utilizaremos la interpretación cinética de (2.1) que consiste en la denominada ecuación de Wigner–Fokker–Planck. Para llegar a ella se considera la transformada de Wigner [114] de un operador  $A$  con núcleo integral  $a$

$$\mathcal{W}[A](x, \xi) := \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} a\left(x + \frac{\hbar}{2m}\eta, x - \frac{\hbar}{2m}\eta\right) e^{-i\xi \cdot \eta} d\eta, \quad (2.5)$$

y se define la función de Wigner de nuestro sistema, cuyo dominio para todo  $t \geq 0$  es el espacio de fases  $\mathbb{R}_x^d \times \mathbb{R}_\xi^d$ , como  $W := \mathcal{W}[R]$ . Para obtener la evolución temporal de dicha función basta aplicar  $\mathcal{W}$  en (2.1) y realizar una serie de cálculos sencillos para obtener

$$\mathcal{W}[(H_x - H_y)\rho] = (\xi \cdot \nabla)W + \Theta_{\hbar}[V]W,$$

donde

$$\Theta_{\hbar}[V]W(x, \xi, t) = \frac{i}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \frac{1}{\hbar} \left[ V \left( x + \frac{\hbar}{2m} y, t \right) - V \left( x - \frac{\hbar}{2m} y, t \right) \right] \\ \times W(x, \xi', t) e^{-i(\xi - \xi') \cdot y} d\xi' dy$$

para los términos hamiltonianos y

$$\begin{aligned} -\lambda \mathcal{W}[(x - y) \cdot (\nabla_x - \nabla_y) \rho] &= 2\lambda \operatorname{div}_{\xi}(\xi W), \\ D_{qq} \mathcal{W}[(\nabla_x + \nabla_y)^2 \rho] &= D_{qq} \Delta W, \\ -\frac{D_{pp}}{\hbar^2} \mathcal{W}[|x - y|^2 \rho] &= \frac{D_{pp}}{m^2} \Delta_{\xi} W, \\ -\frac{2i}{\hbar} D_{pq} \mathcal{W}[(x - y) \cdot (\nabla_x + \nabla_y) \rho] &= \frac{2D_{pq}}{m} \operatorname{div}(\nabla_{\xi} W), \end{aligned}$$

para los disipativos y difusivos (puede consultarse en [10] la equivalencia entre la formulación en términos de operadores y de Wigner de los términos difusivos). Por tanto,  $W$  es solución de la ecuación de Wigner–Fokker–Planck

$$\partial_t W + (\xi \cdot \nabla) W + \Theta_{\hbar}[V]W = L_{WFP}[W], \quad (2.6)$$

donde  $L_{WFP}$  es el núcleo de interacción de Fokker–Planck cuántico

$$L_{WFP}[W] = \frac{D_{pp}}{m^2} \Delta_{\xi} W + 2\lambda \operatorname{div}_{\xi}(\xi W) + 2\frac{D_{pq}}{m} \operatorname{div}(\nabla_{\xi} W) + D_{qq} \Delta W, \quad (2.7)$$

$\Theta_{\hbar}$  definido anteriormente es un término pseudo-diferencial eventualmente no lineal (cuadrático en el caso de interacción de tipo Hartree, por ejemplo) y los términos de  $L_{WFP}$  aportan descripciones de los mecanismos de fricción ( $\lambda \operatorname{div}_{\xi}(\xi W)$ ) y difusión:  $D_{qq} \Delta W$  describe difusión en posición, mientras que  $\frac{D_{pp}}{m^2} \Delta_{\xi} W$  representa difusión en velocidad y  $\frac{2D_{pq}}{m} \operatorname{div}(\nabla_{\xi} W)$  es el responsable de la difusión cruzada o difusión anómala. Los coeficientes han sido definidos en (2.2) a partir de las constantes físicas que determinan la interacción. Además, en el límite semiclásico ( $\hbar \rightarrow 0$  en el sentido de los parámetros de escala), tanto  $D_{pq}$  como  $D_{qq}$  se anulan y WFP converge formalmente a la ecuación de Vlasov–Fokker–Planck (véase [27]), lo que convierte a WFP en una generalización cuántica de un modelo clásico bien conocido. Sin embargo la interpretación de  $W$  como función de probabilidad no está tan clara en el caso cuántico, ya que  $W$  puede tomar valores negativos en tiempos cortos como resultado de la interferencia entre distintos estados que conforman la función de Wigner. No obstante, la positividad del operador de densidad sí implica que la transformada de Husimi  $W^{\hbar}$  de  $R$  es positiva en todo  $\mathbb{R}^{2d}$  ([51], [79]), donde

$$W^{\hbar}(x, \xi) := W(x, \xi) * \Gamma_{\frac{\hbar}{m}}(x) * \Gamma_{\frac{\hbar}{m}}(\xi) \quad \forall (x, \xi) \in \mathbb{R}^{2d}$$

y  $\Gamma_{\sigma}$  denota la gaussiana con varianza  $\sigma$ .

Los tres primeros momentos en velocidad de la función de Wigner admiten una interpretación hidrodinámica precisa: la densidad local

$$n(t, x) = \int_{\mathbb{R}^d} W(x, \xi, t) d\xi, \quad (2.8)$$

la densidad de corriente

$$J(t, x) = \int_{\mathbb{R}^d} \xi W(x, \xi, t) d\xi \quad (2.9)$$

y el tensor de energía cinética

$$\mathbb{T}(t, x) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d} \xi \otimes \xi W(x, \xi, t) d\xi.$$

Bajo dicha interpretación, la masa total de un sistema cuántico gobernado por la ecuación de Wigner–Fokker–Planck está determinada por

$$\int_{\mathbb{R}^d} n(t, x) dx = \int_{\mathbb{R}^{2d}} W(x, \xi, t) d\xi dx,$$

cantidad que se conserva en el tiempo como consecuencia de la ecuación de continuidad de nuestro sistema. En efecto, integrando la ecuación de WFP respecto de  $\xi$  se deduce que la evolución de  $n$  está determinada por la siguiente ecuación de continuidad de tipo Fokker–Planck

$$\partial_t n + \operatorname{div}(J) = D_{qq} \Delta n, \quad (2.10)$$

de donde se deduce la conservación de masa total, tras integrar respecto de  $x$ . De la misma manera, si multiplicamos la ecuación de WFP por  $\xi$  e integramos respecto de  $\xi$ , se obtiene

$$\partial_t J + \operatorname{div} \mathbb{T} + \frac{1}{m} n \nabla V = -2\lambda J - \frac{2D_{pq}}{m} \nabla n + D_{qq} \Delta J, \quad (2.11)$$

que establece la evolución de la densidad de corriente  $J$ . Obsérvese que el sistema hidrodinámico formado por (2.10) y (2.11) no es cerrado, ya que esta segunda ecuación involucra el conocimiento de  $\mathbb{T}$ , un momento de orden superior. De hecho, el término de transporte en la ecuación de WFP hace que no podamos esperar que ningún sistema de momentos quede cerrado, por lo que el primer paso es imponer alguna relación de clausura apropiada para que el sistema (2.10)–(2.11) quede plenamente determinado. Con este propósito definimos la velocidad media (macroscópica) asociada a la función de Wigner como

$$u(t, x) := \frac{J(t, x)}{n(t, x)} \quad (2.12)$$

y vamos a estudiar la evolución temporal de  $u$ . Combinando (2.10), (2.11) y (2.12) y teniendo en cuenta que  $u \operatorname{div}(nu) = \operatorname{div}(nu \otimes u) - n(u \cdot \nabla)u$ , llegamos a la siguiente ecuación

$$\begin{aligned} \partial_t u + (u \cdot \nabla)u = & - \frac{1}{m} \nabla V - \frac{1}{n} \operatorname{div}(P_u) - 2\lambda u - \frac{2D_{pq}}{m} \frac{\nabla n}{n} \\ & + D_{qq} \left[ 2 \left( \frac{\nabla n}{n} \cdot \nabla \right) u + \Delta u \right], \end{aligned} \quad (2.13)$$

donde  $P_u = \mathbb{T} - nu \otimes u$  es el tensor de esfuerzos. Este sistema es análogo a la formulación hidrodinámica de De Broglie–Bohm para un estado puro [34, 18], que consiste en el siguiente sistema:

$$\begin{aligned}\partial_t n + \operatorname{div}(nu) &= 0, \\ \partial_t u + (u \cdot \nabla)u &= -\frac{1}{m}\nabla(V + Q),\end{aligned}$$

donde  $Q = Q(t, x)$  es el potencial cuántico de Bohm, definido por

$$Q := -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta\sqrt{n}}{\sqrt{n}} = -\frac{\hbar^2}{4m} \left( \frac{\Delta n}{n} - \frac{|\nabla n|^2}{2n^2} \right), \quad (2.14)$$

que describe efectos de autointeracción del sistema, de manera que  $\nabla Q$  representa una corriente de difusión causada por gradientes de densidad. Comparando este sistema con (2.10), (2.13) se desprende que  $\operatorname{div} P_u = \frac{1}{m} n \nabla Q$ , si bien en nuestro caso se han tenido en cuenta efectos de fricción y de viscosidad. A este nivel el efecto de la difusión en velocidad no ejerce influencia sobre los observables, lo que constituye una característica destacable de nuestro modelo.

Definimos a continuación la velocidad de difusión

$$v(t, x) := u(t, x) - u_o(t, x), \quad u_o(t, x) := D_{qq} \frac{\nabla n(t, x)}{n(t, x)}, \quad (2.15)$$

donde  $u_o$  es la llamada velocidad osmótica, que surge de acuerdo con la ley de Fick asociada a la difusión con coeficiente  $D_{qq}$ . Multiplicando la definición de  $v$  por  $n$  y tomando divergencias, obtenemos que

$$\operatorname{div}(nu) = \operatorname{div}(nv) + D_{qq}\Delta n,$$

que nos permite reescribir (2.10) en términos de  $v$  de la siguiente forma:

$$\partial_t n + \operatorname{div}(nv) = 0, \quad (2.16)$$

que es la ecuación de continuidad estándar en mecánica de fluidos. Se tiene entonces el siguiente resultado.

### Proposición 2.1.1

Sea  $W = W(x, \xi, t)$  una solución de WFP suficientemente regular y supongamos que la densidad local  $n$  definida en (2.8) no se anula en ningún punto. Entonces el sistema hidrodinámico asociado a  $W$ , que gobierna la evolución temporal de  $n$  y  $v$  (con  $v$  definido en (2.15)) viene dado por

$$\begin{aligned}\partial_t n + \operatorname{div}(nv) &= 0, \\ \partial_t v + (v \cdot \nabla)v &= -\frac{1}{m}\nabla V - \frac{1}{n}\operatorname{div}(P_v) - 2\lambda v - \frac{2D_{pq}}{m} \frac{\nabla n}{n} + D_{qq}^2 \frac{1}{n}\nabla(\Delta n) \\ &\quad + D_{qq} \frac{1}{n} \left[ \nabla \left( \operatorname{div}(nv) \right) + \Delta(nv) - 2\lambda \nabla n \right],\end{aligned}$$

donde  $P_v(t, x)$  es el tensor cuántico de esfuerzos, definido por

$$P_v = \int_{\mathbb{R}^d} \xi \otimes \xi W d\xi - nv \otimes v.$$

DEMOSTRACIÓN:

La ecuación de continuidad se obtiene partiendo del sistema para  $u$  y  $n$  y razonando como en (2.16). Para derivar la ecuación de evolución asociada a  $v$  partimos de su definición  $v = u - u_o$ , multiplicamos por  $n$  y derivamos con respecto del tiempo, obteniendo

$$n \partial_t v = \partial_t n (u - v) - D_{qq} \partial_t (\nabla n) + n \partial_t u. \quad (2.17)$$

Aprovechando la información contenida en (2.16), podemos reescribir los dos primeros sumandos del término de la derecha en función de  $v$  de la siguiente forma:

$$\partial_t n (u - v) = -D_{qq} \operatorname{div}(nv) \frac{\nabla n}{n}, \quad (2.18)$$

$$\partial_t (\nabla n) = -\nabla \left( \operatorname{div}(nv) \right). \quad (2.19)$$

Para el tercer sumando, sustituimos  $u$  por  $v + u_o$  en (2.17) y llegamos a

$$\begin{aligned} n \partial_t u &= -n(v \cdot \nabla)v - \frac{1}{m} n \nabla V - \operatorname{div} P_v - 2\lambda n v - \frac{2D_{pq}}{m} \nabla n + D_{qq} \left[ n \Delta v \right. \\ &\quad \left. - n(v \cdot \nabla) \frac{\nabla n}{n} - 2\lambda \nabla n + \operatorname{div} \left( v \otimes \nabla n + \nabla n \otimes v \right) + (\nabla n \cdot \nabla)v \right] \\ &\quad + D_{qq}^2 \left[ (\nabla n \cdot \nabla) \frac{\nabla n}{n} + \nabla \cdot \left( \nabla n \otimes \frac{\nabla n}{n} \right) + n \Delta \left( \frac{\nabla n}{n} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Finalmente, sumando las expresiones obtenidas en (2.18), (2.19) y (2.20) y simplificando de forma sencilla, llegamos a la ecuación para  $v$ .  $\square$

**OBSERVACIÓN 2.1.2 (Casos particulares destacados)** *El núcleo de interacción de Fokker–Planck (2.7) contiene como casos particulares algunos modelos bien conocidos en la literatura física*

(i) Si hacemos  $\lambda = D_{pq} = D_{qq} = 0$ , entonces WFP se reduce a

$$\partial_t W + (\xi \cdot \nabla)W + \Theta_h[V]W = \frac{D_{pp}}{m^2} \Delta_\xi W,$$

que es el modelo asintótico obtenido para temperaturas muy altas, el más simple de entre todos los que conservan la positividad del operador de densidad. Además, este modelo no tiene en cuenta efectos de fricción (véase [11, 83]). En este caso  $v = u = \frac{j}{n}$  y el sistema hidrodinámico establecido en la Proposición 2.1.1 se reduce al sistema de tipo Euler, usual en mecánica de fluidos

$$\begin{aligned} \partial_t n + \operatorname{div}(nv) &= 0, \\ \partial_t v + (v \cdot \nabla)v &= -\frac{1}{m} \nabla V - \frac{1}{n} \operatorname{div}(P_v). \end{aligned}$$

(ii) Si hacemos  $D_{pq} = D_{qq} = 0$  obtenemos la versión cinética del modelo de Caldeira–Leggett [21]

$$\partial_t W + (\xi \cdot \nabla)W + \Theta_{\hbar}[V]W = \frac{D_{pp}}{m^2} \Delta_{\xi} W + 2\lambda \operatorname{div}_{\xi}(\xi W),$$

que no tiene garantizada la preservación de la positividad del operador de densidad [2]. El sistema hidrodinámico asociado es

$$\begin{aligned} \partial_t n + \operatorname{div}(nv) &= 0, \\ \partial_t v + (v \cdot \nabla)v &= -\frac{1}{m} \nabla V - \frac{1}{n} \operatorname{div} P_v - 2\lambda v. \end{aligned}$$

(iii) Si consideramos tan solo  $D_{pq} = 0$ , entonces WFP se escribe de la siguiente manera

$$\partial_t W + (\xi \cdot \nabla)W + \Theta_{\hbar}[V]W = \frac{D_{pp}}{m^2} \Delta_{\xi} W + 2\lambda \operatorname{div}_{\xi}(\xi W) + D_{qq} \Delta W,$$

que es el modelo disipativo más sencillo que conserva la positividad del operador de densidad [11, 22]. En este caso, el sistema hidrodinámico asociado es

$$\begin{aligned} \partial_t n + \operatorname{div}(nv) &= 0, \\ \partial_t v + (v \cdot \nabla)v &= -\frac{1}{m} \nabla V - \frac{1}{n} \operatorname{div}(P_v) - 2\lambda v + D_{qq}^2 \frac{1}{n} \nabla(\Delta n) \\ &\quad + D_{qq} \frac{1}{n} \left[ \nabla(\operatorname{div}(nv)) + \Delta(nv) - 2\lambda \nabla n \right]. \end{aligned}$$

## 2.2. Análisis del tensor de esfuerzos y relaciones de clausura

Vamos a suponer que  $W$  está asociada a una mezcla de estados  $\{\psi_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ , por lo que la ecuación (2.5) con  $a(x, y) = \sum \lambda_k \psi_k(x) \overline{\psi_k}(y)$  implica que la función de Wigner de nuestro sistema se escribe como

$$W(x, \xi, t) = \frac{1}{(2\pi)^d} \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k \int_{\mathbb{R}^d} \psi_k\left(x + \frac{\hbar}{2m} y, t\right) \overline{\psi_k}\left(x - \frac{\hbar}{2m} y, t\right) e^{-iy \cdot \xi} dy, \quad (2.21)$$

donde  $\{\lambda_k\}_{k \in \mathbb{N}}$  son las probabilidades de ocupación y cumplen que

$$\lambda_k \geq 0 \quad \forall k \in \mathbb{N}, \quad \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k = 1.$$

El sistema obtenido en la Proposición 2.1.1 no es cerrado pues depende del tensor de esfuerzos  $P_v$ , que está relacionado con los momentos de segundo orden de  $W$ .

Para introducir relaciones apropiadas de clausura del sistema vamos a describir  $P_v$  en términos de la familia  $\{\psi_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ . Usando (2.21) se tiene que

$$\mathbb{T} = -\frac{\hbar^2}{2m^2} \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k \left[ \operatorname{Re} \left( \overline{\psi}_k (\nabla \otimes \nabla) \psi_k \right) - \operatorname{Re} \left( \nabla \overline{\psi}_k \otimes \nabla \psi_k \right) \right].$$

Además, podemos formular  $nv \otimes v$  en función de los distintos estados aprovechando que  $v = \frac{1}{n}(J - D_{qq} \nabla n)$ :

$$\begin{aligned} nv \otimes v &= \frac{1}{\sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k |\psi_k|^2} \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k \left[ \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left( \overline{\psi}_k \nabla \psi_k \right) - 2D_{qq} \operatorname{Re} \left( \overline{\psi}_k \nabla \psi_k \right) \right] \\ &\times \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k \left[ \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left( \overline{\psi}_k \nabla \psi_k \right) - 2D_{qq} \operatorname{Re} \left( \overline{\psi}_k \nabla \psi_k \right) \right]. \end{aligned}$$

Por tanto, podemos expresar  $P_v$  de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} P_v &= -\frac{\hbar^2}{2m^2} \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k \left[ \operatorname{Re} \left( \overline{\psi}_k \nabla \otimes \nabla \psi_k \right) - \operatorname{Re} \left( \nabla \overline{\psi}_k \otimes \nabla \psi_k \right) \right] \\ &- \frac{1}{\sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k |\psi_k|^2} \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k \left[ \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left( \overline{\psi}_k \nabla \psi_k \right) - 2D_{qq} \operatorname{Re} \left( \overline{\psi}_k \nabla \psi_k \right) \right] \quad (2.22) \\ &\otimes \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k \left[ \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left( \overline{\psi}_k \nabla \psi_k \right) - 2D_{qq} \operatorname{Re} \left( \overline{\psi}_k \nabla \psi_k \right) \right]. \end{aligned}$$

Si consideramos la descomposición módulo-argumento de cada uno de los  $\psi_k$  dada por

$$\psi_k(t, x) = \sqrt{n_k(t, x)} e^{\frac{i}{\alpha} S_k(t, x)}, \quad \alpha = 2mD_{qq}, \quad (2.23)$$

entonces se tienen las siguientes identidades de forma elemental:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \left( \overline{\psi}_k \nabla \psi_k \right) &= \sqrt{n_k} \nabla \sqrt{n_k}, \quad \operatorname{Im} \left( \overline{\psi}_k \nabla \psi_k \right) = \frac{1}{\alpha} n_k \nabla S_k, \\ \operatorname{Re} \left( \overline{\psi}_k \nabla \otimes \nabla \psi_k \right) &= \sqrt{n_k} \nabla \otimes \nabla \sqrt{n_k} - \frac{1}{\alpha^2} n_k \nabla S_k \otimes \nabla S_k, \\ \operatorname{Re} \left( \nabla \overline{\psi}_k \otimes \nabla \psi_k \right) &= \nabla \sqrt{n_k} \otimes \nabla \sqrt{n_k} + \frac{1}{\alpha^2} n_k \nabla S_k \otimes \nabla S_k. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Introduciendo estas expresiones en (2.22), haciendo los correspondientes cálculos y usando que  $\sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k |\psi_k|^2 = n$ , llegamos a la descomposición  $P_v = P_v^c + P_v^q$ , donde

$$P_v^c = \frac{\hbar^2}{m^2 \alpha^2} \left\{ \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k n_k \nabla S_k \otimes \nabla S_k - \frac{1}{n} \left( \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k n_k \nabla S_k \right) \otimes \left( \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k n_k \nabla S_k \right) \right\}$$

denota la parte clásica del tensor, en el sentido de que describe la presión estándar del fluido (ver fórmula (2.26)), y

$$\begin{aligned}
P_v^q &= \frac{\hbar}{m^2} \frac{1}{n} \left( \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k n_k \nabla S_k \right) \otimes \left( \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k \sqrt{n_k} \nabla \sqrt{n_k} \right) \\
&+ \frac{\hbar}{m^2} \frac{1}{n} \left( \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k \sqrt{n_k} \nabla \sqrt{n_k} \right) \otimes \left( \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k n_k \nabla S_k \right) \\
&+ \frac{\hbar^2}{2m^2} \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k \left( \nabla \sqrt{n_k} \otimes \nabla \sqrt{n_k} - \sqrt{n_k} \nabla \otimes \nabla \sqrt{n_k} \right) \\
&- 4D_{qq}^2 \frac{1}{n} \left( \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k \sqrt{n_k} \nabla \sqrt{n_k} \right) \otimes \left( \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k \sqrt{n_k} \nabla \sqrt{n_k} \right),
\end{aligned}$$

representa los efectos cuánticos del sistema a través de las potencias positivas de la constante de Planck, que se consideran despreciables cuando  $\hbar \rightarrow 0$  (límite semiclásico). Denominaremos a  $P_v^q$  parte cuántica del tensor de esfuerzos, toda vez que contiene términos de presión proporcionales a  $\Delta n$  en la diagonal y fuerzas de tensión extradiagonales que se expresan a través de la velocidad osmótica (2.15)(como se pone de manifiesto en [89]).

**OBSERVACIÓN 2.2.1** *Es importante destacar que la parte clásica del tensor de esfuerzos surge a raíz de la mezcla de estados cuánticos. De hecho, si suponemos que  $W$  describe un estado puro entonces  $P_v^c = 0$ . Además, la presencia de la constante de Planck en la expresión de  $P_v^c$  no hace incoherente la denominación “clásica” ya que  $\hbar$  y  $\alpha$  tienen las mismas unidades y  $\frac{\hbar}{\alpha}$  es, por tanto, un factor adimensional. Por otra parte, si  $D_{qq} = 0$  (lo que ocurre en los modelos (i) y (ii) descritos en la Observación 2.1.2), entonces la parte cuántica  $P_v$  se reduce a*

$$P_v^q = \frac{\hbar^2}{2m^2} \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k \left( \nabla \sqrt{n_k} \nabla \sqrt{n_k} - \sqrt{n_k} (\nabla \otimes \nabla) \sqrt{n_k} \right).$$

Si consideramos la velocidad  $v_k$  asociada al estado  $\psi_k$  y la descomposición (2.23) del mismo, es sencillo comprobar que  $v_k$  y  $S_k$  están relacionados a través de la fórmula

$$v_k = \frac{1}{m} \nabla S_k, \quad (2.25)$$

la cual nos permite interpretar la parte clásica del tensor como una matriz de covarianzas en velocidad:

$$P_v^c = \frac{\hbar^2}{\alpha^2} n \left( (v \otimes v)_M - v_M \otimes v_M \right), \quad (2.26)$$

donde hemos denotado

$$X_M = \frac{1}{n} \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k n_k X_k,$$

la función media ponderada de la familia de observables  $X_k = X(\psi_k)$  respecto de las funciones peso  $\lambda_k n_k$ . Obsérvese en la ecuación (2.26) que la influencia del momento de segundo orden se reduce a la presencia de  $(v \otimes v)_M$  en la parte clásica. Por tanto, si imponemos las relaciones de cierre [80, 86]

$$P_v^c = P_v^c(n), \quad \sqrt{n_k} = \sqrt{n} \quad \forall k \in \mathbb{N}, \quad (2.27)$$

estamos truncando la jerarquía de momentos asociada a la función de Wigner, generando una aproximación de la misma mediante un sistema cerrado, que se puede resolver de forma autoconsistente. La primera hipótesis, que es la que cierra el sistema, no constituye una restricción demasiado severa, ya que existen modelos hidrodinámicos cuánticos ampliamente aceptados que verifican dicha condición. En la última sección de este capítulo destacaremos algunos de ellos. En cuanto a la parte cuántica, es destacable que solo dependerá de  $n$  y  $v_M$ :

$$\begin{aligned} P_v^q &= \frac{\hbar}{m} (\sqrt{n} v_M \otimes \nabla \sqrt{n} + \sqrt{n} v_M \otimes \nabla \sqrt{n}) - 4D_{qq}^2 \nabla \sqrt{n} \otimes \nabla \sqrt{n} \\ &\quad + \frac{\hbar^2}{2m^2} (\nabla \sqrt{n} \otimes \nabla \sqrt{n} - \sqrt{n} (\nabla \otimes \nabla) \sqrt{n}) \\ &= \frac{\hbar}{2m} (v_M \otimes \nabla n + v_M \otimes \nabla n) - \frac{\hbar^2}{4m^2} n \nabla \otimes \left( \frac{\nabla n}{n} \right) - D_{qq}^2 \frac{1}{n} \nabla n \otimes \nabla n. \end{aligned} \quad (2.28)$$

**Proposición 2.2.2**

Sea  $W = W(x, \xi, t)$  una solución de WFP suficientemente regular y supongamos que la densidad local  $n$  definida en (2.8) no se anula en ningún punto y que se verifican las relaciones de clausura (2.27). Entonces las leyes de evolución temporal para la densidad local  $n$  y la velocidad media  $v_M$  vienen dadas por

$$\begin{aligned} \partial_t n + \frac{\hbar}{\alpha} \operatorname{div}(n v_M) &= D_{qq} \Delta n, \\ \partial_t v_M + \frac{\hbar}{\alpha} (v_M \cdot \nabla) v_M &= -\frac{\alpha}{\hbar} \left( \frac{1}{m} \nabla(V + Q) + \frac{\nabla P_v^c}{n} + \frac{2D_{pq}}{m} \frac{\nabla n}{n} \right) - 2\lambda v_M \\ &\quad + D_{qq} \left\{ 2 \left( \frac{\nabla n}{n} \cdot \nabla \right) v_M + \Delta v_M \right\}, \end{aligned} \quad (2.29)$$

donde  $P_v^c$  y  $P_v^q$  corresponden a (2.26) y (2.28),  $\alpha = 2mD_{qq}$  y donde  $Q$  denota el potencial cuántico de Bohm definido en (2.14).

DEMOSTRACIÓN:

Para estudiar la evolución de  $n$  basta usar (2.12), (2.21), (2.24) y (2.25) para deducir

$$u = \frac{J}{n} = \frac{\hbar}{m} \frac{1}{n} \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k \operatorname{Im}(\overline{\psi_k} \nabla \psi_k) = \frac{\hbar}{m\alpha} \frac{1}{n} \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k n_k \nabla S_k = \frac{\hbar}{\alpha} v_M, \quad (2.31)$$

luego las velocidades  $v$  y  $v_M$  están relacionadas por medio de

$$v = \frac{\hbar}{\alpha} v_M - D_{qq} \frac{\nabla n}{n}. \quad (2.32)$$

Esta propiedad, junto con la ecuación de continuidad obtenida en la Proposición 2.1.1, nos conduce a (2.29). Finalmente, usando la evolución de  $v$  deducida en dicha proposición, la identidad

$$\partial_t v_M = \frac{\alpha}{\hbar} \left\{ \partial_t v + D_{qq} \partial_t \left( \frac{\nabla n}{n} \right) \right\},$$

y la ecuación de continuidad recién derivada, obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{\alpha}{\hbar} \partial_t v &= -\frac{\hbar}{\alpha} (v_M \cdot \nabla) v_M - 2\lambda v_M - \frac{\alpha}{m\hbar} \left( \nabla(V+Q) + \frac{m}{n} \operatorname{div}(P_v^c) + 2D_{pq} \frac{\nabla n}{n} \right) \\ &+ D_{qq} \left\{ -\frac{1}{n} \Delta n v_M - \frac{\nabla n}{n} \operatorname{div}(v_M) - \frac{1}{n} (v_M \cdot \nabla) \nabla n \right. \\ &+ \left. \frac{1}{n} \operatorname{div}(n v_M) + \frac{1}{n} \Delta(n v_M) + (v_M \cdot \nabla) \frac{\nabla n}{n} \right\} \\ &+ \frac{\alpha}{\hbar} D_{qq}^2 \left\{ -\left( \frac{\nabla n}{n} \cdot \nabla \right) \frac{\nabla n}{n} - \frac{|\nabla n|^2}{n^3} \nabla n + \frac{\Delta n}{n^2} \nabla n \right. \\ &+ \left. \frac{1}{n^2} (\nabla n \cdot \nabla) \nabla n - \frac{1}{n} \nabla \Delta n \right\}, \end{aligned}$$

$$\frac{\alpha}{\hbar} \partial_t \left( \frac{\nabla n}{n} \right) = \frac{1}{n^2} \operatorname{div}(n v_M) \nabla n - \frac{1}{n} \nabla(\operatorname{div}(n v_M)) + \frac{\alpha}{\hbar} D_{qq}^2 \left( \frac{1}{n} \nabla \Delta n - \frac{1}{n^2} \Delta n \nabla n \right),$$

tras cálculos laboriosos pero sencillos. Simplificando de forma adecuada se deduce (2.30), lo que concluye la prueba.  $\square$

### 2.3. Construcción de una función de onda que reproduce el comportamiento de la función de Wigner: la ecuación de Schrödinger–Langevin difusiva

En esta sección vamos a construir una función de onda que describe la misma fenomenología física que el sistema (2.29)–(2.30), en el sentido de que las densidades local y de corriente asociadas a dicha función de onda coincidirán con  $n$  y  $J$  provenientes de la función de Wigner. Con este propósito razonamos como en (2.25), esto es, si una función compleja  $\psi$  admite una descomposición módulo–argumento [85]:

$$\psi = |\psi| e^{\frac{i}{\alpha} S}, \quad (2.33)$$

para cierta función  $S$ , entonces la velocidad asociada a  $\psi$  viene dada por  $\nabla S$ . Por tanto, si suponemos que el momento medio  $m v_M$  admite un potencial escalar  $S$ , entonces dicho potencial ha de verificar

$$\frac{J}{n} = \frac{\hbar}{m\alpha} \nabla S, \quad (2.34)$$

donde hemos usado (2.31), con lo que tendremos un candidato a argumento de aquella función de onda cuyos observables respetan la hidrodinámica de WFP. Además de (2.34), impondremos la existencia de campos escalares  $U$  y  $F$  tales que

$$\nabla U = \frac{1}{n} \operatorname{div}(P_v^c), \quad \nabla F = \left( \frac{\nabla n}{n} \cdot \nabla \right) \nabla S, \quad (2.35)$$

lo que nos permitirá establecer la dinámica de  $n$  y  $S$  (y *a posteriori* la ecuación de onda que buscamos) a partir de (2.29) y (2.30).

### Proposición 2.3.1

Sea  $W = W(x, \xi, t)$  una solución de WFP suficientemente regular tal que la densidad local  $n$  definida en (2.8) no se anula en ningún punto y se verifican las relaciones de clausura (2.27). Supongamos que existen un campo escalar  $S(t, x)$  satisfaciendo (2.34) y  $U(t, x)$ ,  $F(t, x)$  dos funciones de manera que se cumplen las relaciones (2.35). Entonces el sistema hidrodinámico de flujo potencial que describe la evolución temporal de  $n$  y  $S$  es el siguiente:

$$\partial_t n = -\frac{\hbar}{m\alpha} \operatorname{div}(n \nabla S) + D_{qq} \Delta n, \quad (2.36)$$

$$\begin{aligned} \partial_t S &= -\frac{\hbar}{2m\alpha} |\nabla S|^2 - \frac{\alpha}{\hbar} \left( V + mU + Q + 2D_{pq} \log(n) \right) \\ &\quad - 2\lambda S + D_{qq}(2F + \Delta S) + \Phi, \end{aligned} \quad (2.37)$$

donde  $Q$  es el potencial cuántico de Bohm definido en (2.14) y  $\Phi = \Phi_{n, S}(t)$  es independiente de  $x$ .

#### DEMOSTRACIÓN:

La ecuación de Fokker–Planck (2.36) es consecuencia directa de (2.29) teniendo en cuenta (2.34). Para obtener la ecuación de Hamilton–Jacobi (2.37) partimos de (2.30), sustituimos  $v_M$  usando de nuevo la hipótesis de irrotacionalidad y encontramos

$$\begin{aligned} \nabla(\partial_t S) &= -\frac{\hbar}{2m\alpha} \nabla |\nabla S|^2 - \frac{\alpha}{\hbar} \nabla(V + Q) - \frac{m\alpha}{\hbar} \frac{1}{n} \operatorname{div}(P_v^c) - 2\lambda \nabla S \\ &\quad - \frac{2\alpha D_{pq}}{\hbar} \nabla \log(n) + D_{qq} \left[ 2 \left( \frac{\nabla n}{n} \cdot \nabla \right) \nabla S + \nabla \Delta S \right] \\ &= -\frac{\alpha}{\hbar} \nabla \left( V + mU + Q + 2D_{pq} \log(n) - 2\lambda S + D_{qq}(2F + \Delta S) \right) \end{aligned} \quad (2.38)$$

tras utilizar las hipótesis (2.35). Esto concluye la prueba.  $\square$

Una vez conocido el sistema (2.36)–(2.37), nos inspiramos en (2.33) para construir la función compleja

$$\varphi(t, x) = \sqrt{n(t, x)} e^{\frac{i}{\alpha} S(t, x)}, \quad (2.39)$$

cuyas densidades local y de corriente coinciden con las magnitudes  $n$  y  $J$  asociadas a la función de Wigner. La evolución temporal de una función de onda así definida, va

a determinar una ecuación de Schrödinger–Langevin friccional con difusión (SLD) que emula el comportamiento observable de (2.36)–(2.37) y, en consecuencia, el de la ecuación de Wigner–Fokker–Planck bajo las condiciones desarrolladas a lo largo del capítulo.

### Teorema 2.3.2

Sea  $W = W(x, \xi, t)$  una solución de WFP suficientemente regular asociada a la mezcla de estados  $\{\psi_k\}_{k \in \mathbb{N}}$  (en particular se puede escribir como en (2.21)). Supongamos que la densidad local  $n$  definida en (2.8) no se anula en ningún punto y que se verifican las relaciones de clausura (2.27). Si existen  $S$  tal que (2.34) es válida para  $J$  (definida en (2.9)) y dos campos escalares  $F$  y  $U$  cumpliendo (2.35), entonces existe una función de onda  $\psi(t, x)$  que es solución de la siguiente ecuación de Schrödinger–Langevin logarítmica con difusión:

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\psi &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + \left(V + mU + \frac{\hbar\lambda}{mD_{qq}}S + 2D_{pq}\log(n)\right)\psi \\ &\quad + \frac{i\hbar D_{qq}}{2}\left(\frac{\Delta n}{n}\right)\psi - \frac{\hbar}{m}F\psi - mD_{qq}\operatorname{div}\left(\frac{J}{n}\right)\psi, \end{aligned} \quad (2.40)$$

y que describe la misma dinámica que  $W$  en el sentido de que

$$|\psi(t, x)|^2 = n(t, x), \quad \frac{\hbar}{m}\operatorname{Im}\left(\overline{\psi}(t, x)\nabla\psi(t, x)\right) = J(t, x).$$

#### DEMOSTRACIÓN:

Si definimos  $\varphi$  como en (2.39) y tomamos  $z = t, x_i$ ,  $1 \leq i \leq d$ , podemos expresar la derivada  $\partial_z\varphi$  en función de  $n$  y  $S$  del siguiente modo:

$$\partial_z\varphi = \left(\partial_z\sqrt{n} + \frac{i}{\alpha}\sqrt{n}\partial_zS\right)e^{\frac{i}{\alpha}S}. \quad (2.41)$$

Como  $n$  no se anula en ningún punto, podemos considerar  $z = t$ , dividir entre  $n$  y sacar factor común  $\varphi$ , obteniendo

$$\partial_t\varphi = \left(\frac{1}{2n}\partial_t n + \frac{i}{\alpha}\partial_t S\right)\varphi.$$

Multiplicando esta ecuación por  $i\hbar$  y valiéndonos de (2.36) y (2.37) deducimos que

$$i\hbar\partial_t\varphi = \left\{\frac{\hbar^2}{2m\alpha^2}|\nabla S|^2 + Q - \frac{\hbar}{\alpha}f + i\left[-\frac{\hbar^2}{2m\alpha}\frac{1}{n}\operatorname{div}(n\nabla S) + \hbar D_{qq}\frac{\Delta n}{2n}\right]\right\}\varphi, \quad (2.42)$$

donde hemos denotado

$$f(t, x) = -\frac{\alpha}{\hbar}\left(V + mU + 2D_{pq}\log(n)\right) - 2\lambda S + D_{qq}(2F + \Delta S) + \Phi.$$

Del mismo modo podemos tomar la divergencia en (2.41) y multiplicar por  $\frac{\hbar^2}{2m}$ , de donde

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi = \left\{-Q - \frac{\hbar^2}{2m\alpha^2}|\nabla S|^2 + i\frac{\hbar^2}{2m\alpha}\frac{1}{n}\operatorname{div}(n\nabla S)\right\}\varphi. \quad (2.43)$$

Sumando (2.42) con (2.43) y despejando la derivada temporal de  $\varphi$  se tiene

$$i\hbar\partial_t\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi + \hbar D_{qq}\frac{\Delta n}{2n}\varphi - \frac{\hbar}{\alpha}f\varphi. \quad (2.44)$$

Teniendo en cuenta la definición de  $f$  y usando (2.34) es claro que  $\varphi$  verifica SLD, salvo por el término  $-\frac{\hbar}{\alpha}\Phi\varphi$ . Para ver que podemos tomar  $\Phi$  idénticamente nula, basta seleccionar

$$\nu(t) = -\frac{1}{2mD_{qq}}\int_0^t\Phi(s)e^{-2\lambda(t-s)}ds,$$

cuya derivada viene dada por

$$\nu'(t) = -2\lambda\nu(t) - \frac{1}{2mD_{qq}}\Phi(t).$$

Es sencillo comprobar si  $\varphi$  es una solución de (2.44), entonces  $\psi = e^{i\nu}\varphi$  satisface (2.40). Además  $|\psi|^2 = |\varphi|^2 = n$  y usando (2.41) obtenemos que

$$\frac{\hbar}{m}\operatorname{Im}(\bar{\psi}\nabla\psi) = \frac{\hbar}{\alpha}nv_M = J,$$

donde hemos utilizado (2.34) y (2.31). Por consiguiente,  $\psi$  satisface el teorema y tenemos concluida la demostración.  $\square$

**OBSERVACIÓN 2.3.3** *La hipótesis de existencia de un argumento  $S$  globalmente definido verificando (2.34) evita ambigüedades en la definición de  $\psi$  y hace innecesaria, por tanto, cualquier condición de cuantización (véase [111]) para pasar de (2.36)–(2.37) (ó (2.29)–(2.30)) a la ecuación SLD. En el Capítulo 4 abordaremos el problema de la existencia de  $S$  para  $\psi$  conocida en dominios acotados por medio de la búsqueda de soluciones de (2.34).*

La ecuación SLD es un modelo fuertemente no lineal que aproxima la dinámica de Langevin en la formulación de onda incorporando efectos de fricción, modelados por  $\frac{\hbar\lambda}{mD_{qq}}S\psi$ , y de difusión, que quedan descritos por  $2D_{pq}\log(n)\psi$  para la difusión anómala y por

$$\frac{i\hbar D_{qq}}{2}\left(\frac{\Delta n}{n}\right)\psi - \frac{\hbar}{m}F\psi - mD_{qq}\operatorname{div}\left(\frac{J}{n}\right)\psi$$

para el caso de la difusión estandar. Es significativo, como comentamos anteriormente, que el término de difusión en velocidad (con coeficiente  $D_{pp}$ ) en WFP, responsable del proceso de decoherencia (véase [69]), no contribuye a la formulación de SLD. Esto se debe al hecho de que hemos establecido el cierre del sistema de momentos al nivel de la densidad de corriente y la influencia de la difusión en velocidad solo es plausible si tenemos en consideración más momentos de  $W$ , que en nuestro caso aportarían mayor información sobre  $P_v^c$  sin variar los sistemas hidrodinámicos ni la ecuación de Schrödinger que proponemos. En este sentido es

destacable que SLD no es sólo un modelo, sino una familia de modelos, donde el potencial  $U$  queda libre y depende de la interpretación (o de la ecuación de estado) que demos al sistema objeto de estudio. En la siguiente sección discutimos algunas de ellas, así como algunos casos particulares destacados de SLD.

## 2.4. Casos particulares y discusión acerca de las hipótesis

### 2.4.1. Casos particulares destacados de la ecuación de Schrödinger–Langevin con difusión

Al igual que ocurre con WFP, que es una generalización de otras ecuaciones disipativas conocidas en la formulación cinética, la ecuación SLD generaliza algunos modelos con fricción ya estudiados en la literatura, que es interesante comentar tanto al nivel de  $n$  y  $S$  como en la formulación de onda, que es la que nos interesa principalmente en este trabajo.

- (i) En primer lugar, si  $\lambda$ ,  $D_{pq}$  y  $D_{qq}$  se anulan, entonces a partir de las ecuaciones (2.29)–(2.30) se obtiene

$$\begin{aligned}\partial_t n &= -\frac{1}{m} \operatorname{div}(n \nabla S), \\ \partial_t S &= -\frac{1}{2m} |\nabla S|^2 - V - mU - Q,\end{aligned}$$

y tomando la forma polar de la función de onda  $\psi = \sqrt{n} e^{\frac{i}{\hbar} S}$  se deduce

$$i\hbar \partial_t \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + (V + mU)\psi.$$

En nuestro contexto esta ecuación se puede interpretar como una aproximación para temperaturas muy altas, que proviene de un modelo cinético con difusión en velocidad. En la interpretación de Schrödinger, sin embargo, surge también de forma fenomenológica en el estudio de gases cuánticos. Uno de los ejemplos más destacado se tiene para  $U = |\psi|^2$ , dando lugar a la ecuación de Gross–Pitaevskii ([57], [97]), que modeliza la formación de condensados de Bose–Einstein. En [86] se obtiene este modelo con  $P_v^c = \frac{2C}{5} n^{\frac{5}{3}} \mathbb{I}$ ,  $C \in \mathbb{R}$  para un gas unidimensional a temperatura cero, que implica una interpretación de  $U$  como potencial de autointeracción de tipo Slater:  $C|\psi|^{\frac{5}{3}}$ . Esta ecuación aparece también en el estudio de dispositivos semiconductores en presencia de potenciales de tipo Hartree (atractivo o repulsivo), dando lugar a los modelos de Schrödinger–Poisson– $X^\alpha$  (véase, por ejemplo [87, 84, 19, 101]).

- (ii) Si hacemos  $D_{pq} = D_{qq} = 0$ , que a nivel del operador de densidad corresponde

al modelo de Caldeira–Legget [21]), entonces

$$\begin{aligned}\partial_t n &= -\frac{1}{m} \operatorname{div}(n \nabla S), \\ \partial_t S &= -\frac{1}{2m} |\nabla S|^2 - V - Q - mU - 2\lambda S,\end{aligned}$$

sistema hidrodinámico cuántico con fricción que surge en el estudio de semiconductores ([71]) e implica, para la función de onda  $\psi$  construida como en el caso anterior, la siguiente ecuación friccional

$$i\hbar \partial_t \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + (V + mU + 2\lambda S) \psi,$$

que generaliza la ecuación de Schrödinger–Langevin introducida por Kostin ([73]) incorporando el término  $mU\psi$ . Dedicaremos la segunda parte del Capítulo 6 a estudiar el buen planteamiento de esta ecuación en dominios acotados bajo una interpretación adecuada del potencial de autointeracción.

- (iii) Por último, si tomamos solo  $D_{pq} = 0$ , entonces tenemos el sistema de flujo potencial

$$\begin{aligned}\partial_t n &= -\frac{\hbar}{m\alpha} \operatorname{div}(n \nabla S) + D_{qq} \Delta n, \\ \partial_t S &= -\frac{\hbar}{2m\alpha} |\nabla S|^2 - \frac{\alpha}{\hbar} (V + mU + Q) - 2\lambda S + D_{qq} (2F + \Delta S),\end{aligned}$$

y la correspondiente ecuación de Schrödinger para  $\psi$  es idéntica a SLD, salvo por el término logarítmico:

$$\begin{aligned}i\hbar \partial_t \psi &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + \left( V + mU + \frac{\hbar\lambda}{mD_{qq}} S \right) \psi \\ &+ \frac{i\hbar D_{qq}}{2} \left( \frac{\Delta n}{n} \right) \psi - \frac{\hbar}{m} F \psi - mD_{qq} \operatorname{div} \left( \frac{J}{n} \right) \psi.\end{aligned}$$

Teniendo en cuenta la condición (2.4), este es el modelo más sencillo que generaliza al de Caldeira–Leggett al nivel del operador de densidad. Los términos difusivos de la ecuación anterior pertenecen a la familia de términos no lineales de Doebner–Goldin [43].

### 2.4.2. Discusión sobre la consistencia de $P_v^c$ y $F$

Este último apartado está dedicado a discutir la plausibilidad de las condiciones (2.35) que han sido necesarias para la obtención del modelo. Una característica importante de los sistemas cuánticos abiertos es que pueden perder información, en el sentido de que un estado cuántico determinado por una única función de onda puede evolucionar temporalmente hacia una mezcla de estados, de manera que el ambiente genera incertidumbre acerca del sistema objeto de estudio. Esta circunstancia impide que cualquier aproximación basada en una ecuación de ondas (lineal

o no lineal) describa el sistema de manera “exacta”. La ecuación SLD describe WFP de la mejor forma posible, ya que el conocimiento de  $n$  y  $J$  permite construir (vía (2.34)) una función de onda que respeta dichos momentos, pero teniendo en cuenta los efectos eventuales de una mezcla de estados sobre dichos observables. Esta influencia queda reflejada por el potencial de autointeracción  $U$ , que surge como un potencial escalar de la divergencia del tensor  $P_v^c$  y en principio no tiene por qué existir. En este sentido es destacable que bajo la relación de cierre establecida en (2.27), la hipótesis  $\frac{1}{n} \operatorname{div}(P_v^c) = \nabla U$  es equivalente a asumir  $\operatorname{div}(P_v^c) = \nabla \tilde{U}$ , ya que en este último caso podemos definir

$$U = \int_0^n \frac{1}{n'} \partial_{n'} \tilde{U} dn' \quad \text{que implica} \quad \nabla U = \frac{1}{n} \partial_n \tilde{U} \nabla n = \frac{1}{n} \nabla \tilde{U},$$

de donde se deduce la primera igualdad de (2.35). Por tanto, podemos discutir acerca de las condiciones que garantizan la existencia de potenciales escalares de  $\operatorname{div}(P_v^c)$ . Por ejemplo, es suficiente postular un tensor diagonal

$$P_v^c(t, x) = p(t, x) \mathbb{I},$$

donde  $\mathbb{I}$  denota el tensor identidad de orden 2 en dimensión  $d$ , para el cual  $\operatorname{div}(P_v^c) = \nabla p$ . Esta no es más que la condición de fluido perfecto en hidrodinámica, que implica que los efectos de tensiones laterales internas son irrelevantes en la descripción de la evolución del fluido. Destacan, en particular, los perfiles de tipo  $p = T_0 n^\beta$  (donde  $T_0$  es la temperatura del sistema) que engloban a los modelos hidrodinámicos isoterma [37, 58, 72] para  $\beta = 1$  e isentrópico para  $\beta > 1$  (puede consultarse [70] para una discusión sobre las clausuras en los distintos sistemas hidrodinámicos asociados a un estado mixto general). En este marco teórico y bajo nuestras hipótesis, el potencial  $U$  tiene una interpretación termodinámica bien definida:  $U = h(n)$  es la entalpía del sistema [71], que viene dada por

$$r h'(r) = p'(r), \quad h(1) = 0.$$

Bajo este punto de vista, todos los perfiles conducen a un término no lineal de tipo  $X^\alpha$  en la formulación de Schrödinger

$$U = \frac{\beta}{\beta - 1} n^{\beta-1},$$

análogos a los que hemos comentado anteriormente. Obsérvese, por último, que esta interpretación es consistente con la hidrodinámica cuántica a temperatura cero, que bajo nuestra aproximación implica  $U = 0$  y permite describir el sistema hidrodinámico mediante una única función de onda.

Respecto a la existencia del potencial  $F$  verificando

$$\left( \frac{\nabla n}{n} \cdot \nabla \right) \nabla S = \nabla F, \quad (2.45)$$

es destacable señalar que esta condición surge inevitablemente como consecuencia de la difusión en posición (con coeficiente  $D_{qq}$ , aunque no figura explícitamente en la ecuación) y representa efectos de autointeracción (convección) entre las

velocidades media ( $u = \frac{J}{n}$ ) y osmótica ( $u_0 = D_{qq} \frac{\nabla n}{n}$ ). Su aparición en SLD resulta poco operativa, por lo que es interesante discutir algunas hipótesis adicionales que permitan trabajar con él de forma más sencilla. Obsérvese, para ello, que en el caso tridimensional la condición (2.45) puede entenderse, usando (2.34), como equivalente a la irrotacionalidad del campo vectorial

$$G := \frac{m\alpha}{\hbar} \left( \frac{\nabla n}{n} \cdot \nabla \right) u. \quad (2.46)$$

Haciendo los cálculos, obtenemos que

$$\text{rot} \left[ \left( \frac{\nabla n}{n} \cdot \nabla \right) u \right] = \frac{1}{n} \text{rot}[(\nabla n \cdot \nabla)u] - \frac{1}{n^2} \nabla n \times (\nabla n \cdot \nabla)u,$$

que se anula si y solo si las matrices jacobianas de  $u$  y  $u_0$  conmutan. Desde el punto de vista matemático, existe un sistema de coordenadas que diagonaliza simultáneamente tanto a  $u$  como a  $u_0$ . Esta condición se satisface obviamente si  $u$  y  $\nabla n$  son colineales, hipótesis que implica

$$u(t, x) = C(t, x) \nabla n(t, x),$$

$\nabla \otimes u = \nabla C \otimes \nabla n + C(\nabla \otimes \nabla)n$  y, de acuerdo con (2.46), permite reescribir el campo vectorial  $G$  como

$$G = \frac{m\alpha}{2\hbar} \frac{1}{n} \left[ 2(\nabla C \cdot \nabla n) \nabla n + C \nabla |\nabla n|^2 \right].$$

Para interpretar  $G$  como un gradiente, podemos considerar el perfil

$$C(t, x) = \frac{K(t)}{n(t, x)},$$

por lo que  $\nabla C = -\frac{K}{n^2} \nabla n$ , luego

$$G = \frac{m\alpha}{2\hbar} \frac{K}{n^3} \left[ n \nabla |\nabla n|^2 - 2 |\nabla n|^2 \nabla n \right] = \frac{m\alpha}{2\hbar} K \nabla \left( \frac{|\nabla n|^2}{n^2} \right).$$

De este modo existe  $F$  tal que  $\nabla F = G$  y el término que aparece en la correspondiente ecuación de Schrödinger pertenece (salvo una función del tiempo multiplicativa) a la familia de términos no lineales de Doebner–Goldin [43],

$$F = \frac{m\alpha}{2\hbar} K \frac{|\nabla n|^2}{n^2}.$$

En este caso se dispone de la identidad  $J = K \nabla n$  y en particular, para  $K(t) \equiv D_{qq}$ , obtenemos

$$J = D_{qq} \nabla n. \quad (2.47)$$

Como consecuencia se verifica  $u = u_o$  y la relación de conmutación entre  $\nabla \otimes u$  y  $\nabla \otimes u_o$  es entonces obviamente cierta. En esta situación (2.47) implica

$$S = \frac{m\alpha D_{qq}}{\hbar} \log(n) + \nu(t),$$

y por tanto el término de fricción en SLD pasa a ser de tipo logarítmico. En [61] se deriva un modelo de Schrödinger disipativo con las mismas características, partiendo también de la ecuación de WFP y aplicándole ideas de propias mecánica nelsoniana [93]. Dedicaremos, además, el Capítulo 5 a estudiar el buen planteamiento de dicho modelo aprovechando su equivalencia con la ecuación de Schrödinger puramente logarítmica.

De la escritura anterior de  $S$  y de (2.34) se deduce que

$$\operatorname{div} \left( \frac{J}{n} \right) \psi = -\frac{4mD_{qq}}{\hbar^2} Q \psi = D_{qq} \left( \frac{\Delta n}{n} - \frac{|\nabla n|^2}{n^2} \right) \psi,$$

lo que nos conduce a la siguiente versión simplificada de la ecuación SLD:

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\psi &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi - D_{qq} \left( mD_{qq} - \frac{i\hbar}{2} \right) \frac{\Delta n}{n} \psi \\ &+ \left( V + mU + (2D_{pq} + \eta D_{qq})\log(n) \right) \psi. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Cabe destacar, por último, que la igualdad  $u = u_o$  que hemos obtenido en este caso particular implica que la velocidad osmótica compensa los efectos de la velocidad media y localmente (a escalas microscópicas) la velocidad del sistema se anula, lo que conduce a la ecuación de continuidad más sencilla  $\partial_t n = 0$ , esto es, el régimen determinado por estas condiciones genera una dinámica estacionaria.

Por otra parte, si asumimos que se satisface la ley de Fick, es decir, si  $J = -D_{qq}\nabla n$ , entonces la ecuación de Schrödinger asociada es ahora

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\psi &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + D_{qq} \left( mD_{qq} + \frac{i\hbar}{2} \right) \frac{\Delta n}{n} \psi \\ &+ \left( V + mU + (2D_{pq} - \eta D_{qq})\log(n) \right) \psi. \end{aligned} \quad (2.49)$$

En este caso el signo del término logarítmico podría ser negativo, circunstancia que ocurre cuando  $\Omega_0 < \pi\lambda$ . Sin embargo, bajo las hipótesis de validez del modelo de WFP (y por tanto de SLD)  $\lambda \ll \Omega$ , lo que implica una perturbación pequeña en la práctica.

Siguiendo esta dirección, también podemos considerar el caso en el que la corriente macroscópica se anula,  $J \equiv 0$ . De aquí se deduce fácilmente  $S(t, x) = \nu(t)$  y, por tanto, la ecuación de Schrödinger que surge en este caso es

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + \frac{i\hbar D_{qq}}{2} \left( \frac{\Delta n}{n} \right) \psi + \left( V + mU + 2D_{pq}\log(n) \right) \psi. \quad (2.50)$$

En particular, la ecuación de continuidad asociada es la ecuación del calor determinada por la difusión en posición de WFP, esto es,  $\partial_t n = D_{qq} \Delta n$ , por lo que se trata de una dinámica que solo manifiesta difusión.

Para terminar, podemos considerar otro tipo de hipótesis sobre la viscosidad del sistema (visto como un fluido) que evita el término  $F$  en SLD. En efecto, si  $P_v^c = p(n)\mathbb{I}$ , podemos reescribir la ecuación para  $\partial_t S$  de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \nabla(\partial_t S) + \frac{\hbar}{2m\alpha} \nabla |\nabla S|^2 &= -\frac{\alpha}{\hbar} \nabla(V + \tilde{p}) \\ &+ 2D_{qq} \left[ \left( \frac{\nabla n}{n} \cdot \nabla \right) \nabla S + \nabla \Delta S \right] + \Pi \end{aligned}$$

(donde  $\nabla \tilde{p} = \frac{1}{n} \nabla p$ ), que representa la formulación de flujo potencial de una corrección de la ecuación de Navier–Stokes para un fluido barotrópico e irrotacional con coeficiente de viscosidad dinámica proporcional a la densidad,  $\mu(t, x) = D_{qq} n(t, x)$ , y donde

$$\Pi = -\frac{\alpha}{\hbar} \nabla \left( Q + 2D_{pq} \log(n) \right) - 2\lambda \nabla S - D_{qq} \nabla \Delta S.$$

Por tanto, si elegimos la relación constitutiva

$$P_v^c = p\mathbb{I} + 2D_{qq} n \nabla \otimes u$$

en lugar de la primera relación de cierre en (2.27), los efectos debidos al término de convección se cancelan y se deduce la siguiente ecuación de Schrödinger logarítmica

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \psi &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi - \frac{i\hbar D_{qq}}{2} \left( \frac{\Delta n}{n} \right) \psi \\ &+ \left( V + m\tilde{p} + \frac{\hbar\lambda}{mD_{qq}} S + 2D_{pq} \log(n) \right) \psi + mD_{qq} \operatorname{div} \left( \frac{J}{n} \right) \psi, \end{aligned}$$

con  $\nabla \tilde{p} = \frac{1}{n} \nabla p$ , como razonamos al principio de la sección. Obsérvese que en este caso la hipótesis (2.35) ya no es necesaria.



# Validación numérica de la ecuación de Schrödinger–Langevin con difusión

---

Este capítulo está dedicado a la exploración numérica del modelo SLD, con el objetivo de conocer la dinámica que describe y estudiar el grado de aproximación que representa respecto de la fenomenología física de WFP. En primer lugar analizaremos las hipótesis establecidas en el capítulo anterior, que hacen más tratable el modelo y permiten calcular familias de soluciones particulares para dichos casos simplificados, basándonos en la formulación rotacionalmente simétrica cuando sea posible.

Dedicaremos la segunda sección del capítulo a establecer la solución exacta de la ecuación de Wigner–Fokker–Planck para la partícula libre y el oscilador armónico y aprovechar los observables asociados a dicha solución, así como la hidrodinámica del modelo, para calcular el valor exacto del potencial de autointeracción  $U$  y obtener así una ecuación lineal que mejora SLD, aproximando con bastante precisión la física determinada por WFP al nivel de las densidades locales. Todos los cálculos realizados en este capítulo se harán en un sistema de unidades adecuado a la observación de la dinámica del sistema, que estableceremos a continuación.

## 3.1. Soluciones particulares

El primer paso a dar para conocer la dinámica asociada al modelo SLD es intentar conocer propiedades que se obtengan de forma sencilla. Con esta intención analizaremos el comportamiento de algunas soluciones de nuestra ecuación asociadas a acciones externas y autointeracciones nulas ( $V = U = 0$ ) para los regímenes  $J = \pm D_{qq} \nabla n$  y  $J \equiv 0$ , aprovechando las reescrituras simplificadas de SLD que hemos derivado en el Capítulo 2. Con el objeto de poder observar en una escala

apropiada la dinámica del sistema (los efectos cuánticos son observables en tiempos cortos y distancias pequeñas) trabajaremos en unidades en las que  $\hbar = m = k_B = 1$ , con lo que alteramos los patrones de tiempo y de longitud:

$$1\tilde{s} = 7,63771 \text{ ps} \quad \text{y} \quad 1\tilde{m} = 0,0297349 \mu\text{m}. \quad (3.1)$$

En este nuevo sistema de unidades los coeficientes que determinan el modelo (definidos en (2.2)) adquieren la siguiente forma normalizada:

$$\lambda = \frac{\eta}{2}, \quad D_{pp} = \eta T_0, \quad D_{pq} = \frac{\eta \Omega_0}{12\pi T_0}, \quad D_{qq} = \frac{\eta}{12T_0}.$$

Utilizaremos este mismo reescalado en todos los cálculos numéricos que serán llevados a cabo, así como en las figuras que presentamos.

### 3.1.1. $J = D_{qq} \nabla n$

En este caso, la ecuación de Schrödinger que rige el comportamiento del sistema viene dada por (2.48). En particular la densidad local es independiente del tiempo, lo que nos permite descomponer la función de onda en forma polar del siguiente modo

$$\psi(t, x) = z e^{i\sigma(t, x)}, \quad (3.2)$$

donde  $z = z(x)$  no depende del tiempo, lo que implica de forma sencilla que  $J = n \nabla \sigma$  y, en consecuencia,

$$\sigma(t, x) = D_{qq} \log(n(x)) + \nu,$$

donde  $\nu$  es una función que depende solo del tiempo. Este cálculo nos proporciona perfiles de la forma

$$\psi(t, x) = z(x) \exp \left\{ i D_{qq} \log(z(x)^2) + i \nu(t) \right\}$$

como candidatos a soluciones de (2.48). Sustituyendo en la ecuación y teniendo en cuenta que  $n = z^2$ , obtenemos

$$\begin{aligned} -\nu'(t)\psi &= -\left(\frac{1}{2} + i D_{qq}\right) \left(2i D_{qq} \frac{|\nabla z|^2}{z^2} + \frac{\Delta z}{z}\right) \psi + D_{qq}(-2D_{qq} + i) \left(\frac{|\nabla z|^2}{z^2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\Delta z}{z}\right) \psi + (2D_{pq} + \eta D_{qq}) \log(z^2) \psi. \end{aligned}$$

Multiplicando ahora por el factor  $e^{-i D_{qq} \log(z(x)^2) - i \nu(t)}$  y reordenando términos, deducimos que

$$-\nu'(t)z = -\frac{1}{2}(1 + 4D_{qq}^2)\Delta z + (2D_{pq} + \eta D_{qq})\log(z^2)z. \quad (3.3)$$

Obsérvese que el segundo miembro no varía con el tiempo, por lo que  $\nu'' = 0$ , luego  $\nu(t) = -\omega t + k$  ( $\omega, k \in \mathbb{R}$ ) y (3.3) adopta la siguiente forma

$$\omega z = -\frac{1}{2}(1 + 4D_{qq}^2)\Delta z + (2D_{pq} + \eta D_{qq})\log(z^2)z, \quad (3.4)$$

ecuación cuyas soluciones son todas reales ya que  $\omega \in \mathbb{R}$ . En particular

$$z \equiv \exp \left\{ \frac{\omega}{2(2D_{pq} + \eta D_{qq})} \right\} \quad (3.5)$$

es una solución constante. Por tanto, la familia uniparamétrica de funciones de onda

$$\psi_\omega(t, x) = \exp \left\{ \frac{(1 + 2iD_{qq})\omega}{2(2D_{pq} + \eta D_{qq})} - i\omega t \right\}$$

son soluciones estacionarias de (2.48) con densidad constante.

En este punto es destacable señalar la ausencia de soluciones con perfil gaussiano (o gaussianes, véase [17]). De hecho, la búsqueda de perfiles de la forma (3.2) con módulo de tipo exponencial

$$z(x) = e^{A|x|^2+B}, \quad A, B \in \mathbb{R},$$

como soluciones de esta ecuación, implica irremediamente que  $\text{Re}(A) > 0$ . De hecho, tenemos

$$\Delta z = (2dA + 4A^2|x|^2)e^{A|x|^2+B},$$

que nos permite reescribir la ecuación (3.4) de la siguiente forma

$$\omega + dA(1 + 4D_{qq}^2) - 2(2D_{pq} + \eta D_{qq})B = 2A(2D_{pq} + \eta D_{qq} - A(1 + 4D_{qq}^2))|x|^2,$$

de donde se concluye que

$$A = \frac{2D_{pq} + \eta D_{qq}}{1 + 4D_{qq}^2}, \quad B = \frac{d}{2} + \frac{\omega}{2(2D_{pq} + \eta D_{qq})},$$

luego

$$\psi(t, x) = \exp \{ \Lambda(x) + i(2D_{qq}\Lambda(x) - \omega t) \}$$

es el perfil solitónico buscado, donde hemos denotado

$$\Lambda(x) = \frac{2D_{pq} + \eta D_{qq}}{1 + 4D_{qq}^2} |x|^2 + \frac{\omega}{2(2D_{pq} + \eta D_{qq})} + \frac{d}{2}. \quad (3.6)$$

Es posible, además, encontrar soluciones no triviales de (3.4) que sean funciones del polinomio simétrico de primer orden  $s = x_1 + \dots + x_N$ . De hecho, considerando

$$z(x) = y(s), \quad s = \sum_{j=1}^N x_j,$$

y basándonos de nuevo en (3.4), es sencillo observar que  $y$  satisface

$$\omega y = -\frac{d}{2}(1 + 4D_{qq}^2)y'' + (2D_{pq} + \eta D_{qq})y \log(y^2). \quad (3.7)$$

Tomando entonces  $y(s) = Cs^\beta + D$  con  $C, D, \beta \in \mathbb{R}$ , se deduce necesariamente que

$$\beta = 2, \quad C = \frac{2D_{pq} + \eta D_{qq}}{d(1 + 4D_{qq}^2)}, \quad D = \frac{1}{2} + \frac{\omega}{2(2D_{pq} + \eta D_{qq})},$$

lo cual da lugar a la siguiente familia de soluciones de (2.48)

$$\psi(x_1, \dots, x_N, t) = \exp \left\{ \Theta \left( \sum_{i=1}^N x_i \right) + i \left( 2D_{qq} \Theta \left( \sum_{i=1}^N x_i \right) - \omega t \right) \right\},$$

donde  $\Theta(x) = \Lambda(x/\sqrt{d}) + (1-d)/2$  con  $\Lambda$  dada por (3.6).

Además, para encontrar una relación entre  $y$  y su derivada, basta con multiplicar (3.7) por  $y'$  e integrar respecto de  $s$ , obteniendo

$$(y')^2 - \frac{2(2D_{pq} + \eta D_{qq})}{d(1 + 4D_{qq}^2)} y^2 \log(y^2) + \frac{2(2D_{pq} + \eta D_{qq} + \omega)}{d(1 + 4D_{qq}^2)} y^2 = k \in \mathbb{R}.$$

Esta ecuación tiene dos puntos de silla en  $(\pm y_0, 0)$ , donde  $y_0$  es la solución constante de (3.4) que nos proporciona (3.5). Podemos eliminar el parámetro  $\omega$  de esta última igualdad usando el cambio de escala  $y = y_0 Y$ . La ecuación para  $Y$  es

$$(Y')^2 - \frac{2(2D_{pq} + \eta D_{qq})}{d(1 + 4D_{qq}^2)} Y^2 (\log(Y^2) - 1) = K \in \mathbb{R}. \quad (3.8)$$

Obsérvese que mediante este reescalado hemos normalizado la ecuación, de modo que los puntos de silla de (3.8) son ahora  $(\pm 1, 0)$ . En la Figura 3.1 mostramos el diagrama de fases asociado a la versión tridimensional de (3.8), que reproduce para todas las dimensiones la misma dinámica que en el caso unidimensional (pueden consultarse detalles sobre el comportamiento unidimensional en [80]).

### Soluciones radiales

Buscamos ahora soluciones radiales (rotacionalmente simétricas) de (3.4). Partiendo de la condición

$$z(x) = \varphi(r), \quad r = |x|,$$

tenemos

$$\Delta z = \frac{d-1}{r} \varphi'(r) + \varphi''(r),$$

y (3.4) adopta la siguiente forma

$$\frac{1 + 4D_{qq}^2}{2} \left( \varphi'' + \frac{d-1}{r} \varphi' \right) - (2D_{pq} + \eta D_{qq}) \varphi \log(\varphi^2) + \omega \varphi = 0.$$

Normalizando mediante el mismo reescalado de antes,

$$\varphi(r) = \exp \left\{ \frac{\omega}{2(2D_{pq} + \eta D_{qq})} \right\} \phi(r),$$

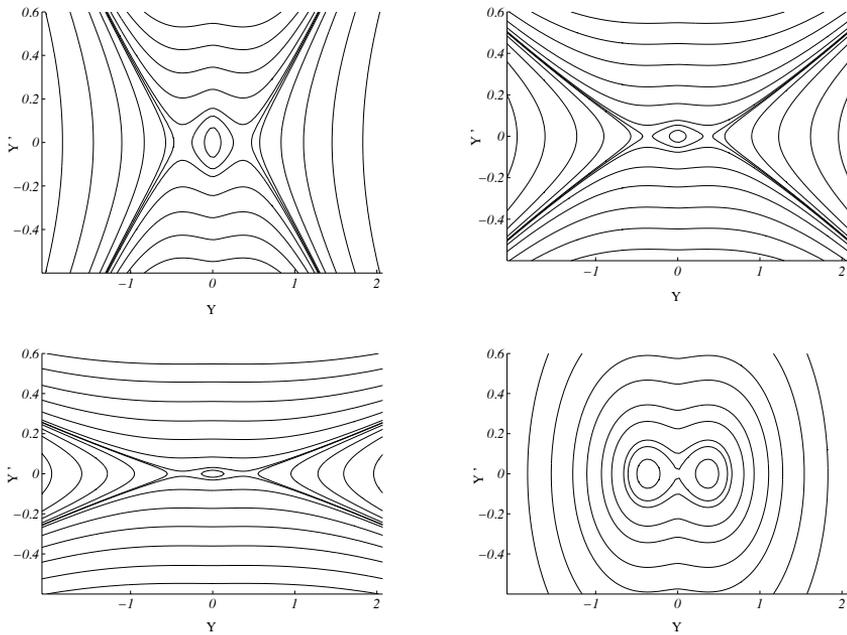


Figura 3.1: De arriba abajo y de izquierda a derecha: los tres primeros dibujos muestran los diagramas de fases asociados a (3.8) para  $d = 3$  y valores típicos de los coeficientes del modelo en la fenomenología de Dekker (véase [40]) para el régimen de altas temperaturas [98]:  $T_0 = 2$ ,  $\Omega_0 = 1$  y  $\lambda = 0,5$ ,  $0,15$  y  $0,05$  respectivamente, en el sistema de unidades definido en (3.1). El último gráfico describe el mismo diagrama asociado a (3.8) pero con signo contrario delante del término logarítmico, idénticos valores de  $T_0$  y  $\Omega_0$  y constante de acoplamiento  $\lambda = 0,5$ .

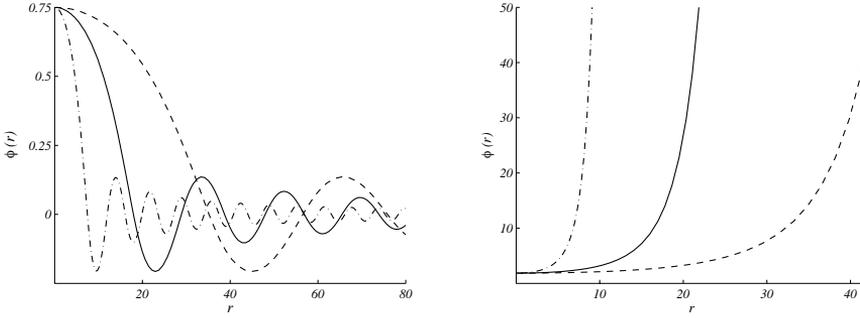


Figura 3.2: Soluciones numéricas de la ecuación (3.9) para el caso tridimensional ( $d=3$ ) en un régimen de temperaturas altas:  $T_0 = 2$ ,  $\Omega_0 = 1$  y acoplamiento débil y creciente:  $\lambda = 0,5$  (línea de puntos y rayas),  $\lambda = 0,15$  (línea continua) y  $\lambda = 0,05$  (línea de rayas), en el sistema de unidades definido en (3.1). De izquierda a derecha: dato inicial  $\phi(0) = 0,75$ ,  $\phi'(0) = 0$  y  $\phi(0) = 1,85$ ,  $\phi'(0) = 0$  respectivamente.

obtenemos la ecuación que satisfacen todas las soluciones radiales de (3.4):

$$\frac{1 + 4D_{qq}^2}{2} \left( \phi'' + \frac{d-1}{r} \phi' \right) - (2D_{pq} + \eta D_{qq}) \phi \log(\phi^2) = 0. \quad (3.9)$$

La presencia del factor  $(d-1)/r$  hace que la ecuación (3.9) sea singular en el origen, lo que genera una dinámica esencialmente diferente a la unidimensional (donde ese factor no aparece, ya que es consecuencia de la escritura del laplaciano en función de  $r$ ). Esto implica, en particular, que los diagramas de fases mostrados en la Figura 3.1 no describen el comportamiento de las soluciones radiales. Para evitar dicha singularidad en los cálculos debemos imponer  $\phi'(0) = 0$ , condición que nos permite resolver numéricamente (3.9) encontrando (i) soluciones de crecimiento exponencial para  $|\phi(0)| > 1$  o (ii) perfiles oscilatorios que decaen a cero en infinito, en el caso de que  $|\phi(0)| < 1$ . En esta última familia están contempladas las únicas soluciones estacionarias (con densidad independiente del tiempo) de SLD que son matemáticamente consistentes (en el sentido de  $L^p(\mathbb{R}^d)$ ). Mostramos estas dos clases de soluciones en la Figura 3.2 para diferentes niveles de acoplamiento.

### 3.1.2. Densidad de corriente nula ( $J = 0$ )

Analizamos ahora el régimen  $J = 0$ , que implica  $\nabla S = 0$  y en consecuencia  $S = 2D_{qq}\sigma(t)$ . Por simplicidad, y al igual que antes, vamos a suponer  $V = 0$  y estado puro ( $U = 0$ ), que dan lugar (vía (2.50)) a la siguiente ecuación de Schrödinger

$$i\partial_t \psi = -\frac{1}{2} \Delta \psi + \frac{iD_{qq}}{2} \left( \frac{\Delta n}{n} \right) \psi + 2D_{pq} \log(n) \psi. \quad (3.10)$$

En este caso la ecuación de continuidad de Fokker–Planck se reduce a una ecuación del calor con difusión gobernada por el coeficiente  $D_{qq}$ ,  $\partial_t n = D_{qq} \Delta n$ , cuyas soluciones (para el caso  $d = 3$ ) son conocidas y vienen dadas por

$$n(t, x) = (n_0 * K(\cdot, t))(x) = \frac{1}{(4\pi D_{qq} t)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} n_0(y) \exp\left(-\frac{|x-y|^2}{4D_{qq} t}\right) dy, \quad (3.11)$$

donde  $n_0(x) = |\psi_0(x)|^2$  es la densidad local inicial y  $K$  es el núcleo de la ecuación del calor tridimensional. Esto hace que la ecuación (3.10) sea, en la práctica, lineal. De hecho, si buscamos soluciones de la forma

$$\psi(t, x) = \sqrt{n(t, x)} e^{i\sigma(t)}, \quad (3.12)$$

deducimos que

$$\sigma'(t) = \frac{1}{4D_{qq}} \frac{\partial_t n}{n} - \frac{1}{8} \frac{|\nabla n|^2}{n^2} - 2D_{pq} \log(n).$$

Integrando ahora esta última ecuación en el intervalo  $[0, t]$ , encontramos una expresión explícita de  $\sigma$  que nos conduce a soluciones de (3.10) con el siguiente perfil:

$$\psi = \sqrt{n} \exp\left\{ \frac{i}{4D_{qq}} \log\left(\frac{n}{n_0}\right) - i \int_0^t \left( \frac{1}{8} \frac{|\nabla n(s)|^2}{n(s)^2} + 2D_{pq} \log(n(s)) \right) ds \right\},$$

donde  $n(t, x)$  viene dada por (3.11) para  $t > 0$  y  $n(0) = n_0$ . En la Figura 3.3 mostramos ejemplos de la evolución de dicho perfil con dato inicial rotacionalmente simétrico (que implica comportamiento radial para todo tiempo), donde la característica más destacada es la lentitud de la difusión (obsérvese que el valor de  $D_{qq}$  es pequeño para valores admisibles de las constantes).

### 3.1.3. $J = -D_{qq} \nabla n$

Estudiamos a continuación el caso en que la corriente del sistema sigue la ley de Fick  $J = -D_{qq} \nabla n$ . Este régimen no constituye un estado estacionario, aunque si fijamos (al igual que en los casos anteriores)  $V = U = 0$ , podemos obtener algunas soluciones exactas de la ecuación de Schrödinger resultante

$$i\partial_t \psi = -\frac{1}{2} \Delta \psi + D_{qq} \left( D_{qq} + \frac{i}{2} \right) \frac{\Delta n}{n} \psi + (2D_{pq} - \eta D_{qq}) \log(n) \psi. \quad (3.13)$$

La evolución temporal de  $n$  queda de nuevo descrita por una ecuación del calor con coeficiente de difusión  $2D_{qq}$ , cuyas soluciones se pueden expresar como convolución de la densidad local inicial con el núcleo del calor. Para encontrar una función de onda que resuelva (3.13) comenzamos, al igual que antes, suponiendo que

$$\psi(t, x) = \sqrt{n(t, x)} e^{i\sigma(t, x)}.$$

Es sencillo deducir de esta expresión y del conocimiento que tenemos de la densidad de corriente que

$$\sigma(t, x) = -D_{qq} \log(n(x)) + \nu(t).$$

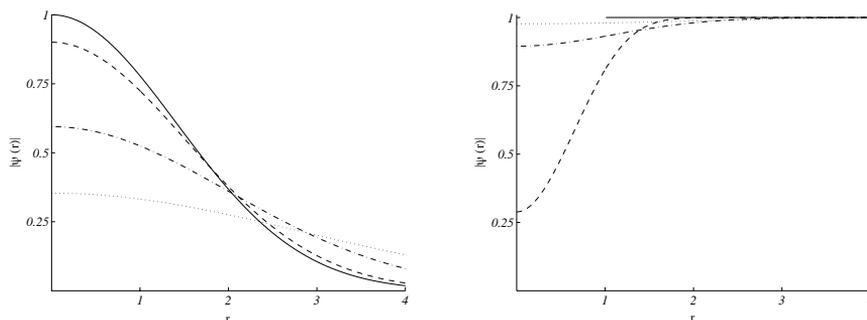


Figura 3.3: Evolución temporal de los perfiles radiales tridimensionales gobernados por la ecuación (3.10) con  $T_0 = 2$ ,  $\Omega_0 = 1$  y  $\lambda = 0,15$  en el sistema de unidades definido en (3.1). De izquierda a derecha: condición inicial con densidad local gaussiana  $|\psi_0(x)|^2 = \exp(-|x|^2/2)$  y  $\psi_0(x) = \chi_{\mathbb{R}^3 \setminus B_1}$  respectivamente, donde  $\chi$  denota la función característica de un conjunto y  $B_1$  es la bola unidad centrada en el origen. Ambas evoluciones están representadas en los mismos tiempos:  $t = 0$  (línea continua),  $t = 6$  (línea rayada),  $t = 40$  (línea de puntos y rayas) y  $t = 120$  (línea de puntos).

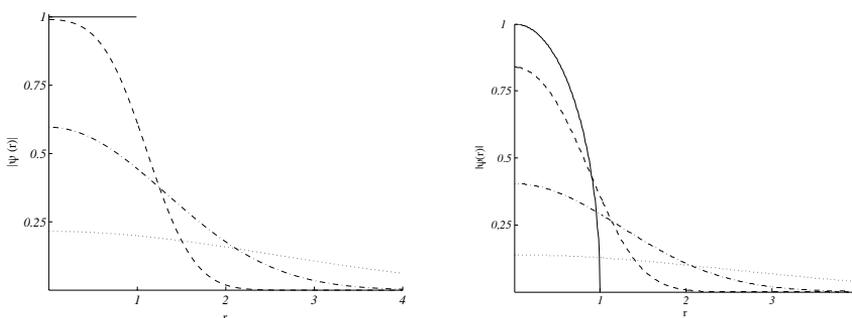


Figura 3.4: Evolución temporal de los perfiles radiales tridimensionales gobernados por la ecuación (3.13) en el mismo régimen que la Figura 3.3 y en el sistema de unidades fijado en (3.1). De izquierda a derecha: dato inicial  $\psi_0(x) = \chi_{B_1}$  y  $\psi_0(x) = \sqrt{1 - |x|^2}$  respectivamente, ambos representados en los tiempos  $t = 0$  (línea continua),  $t = 2$  (línea rayada),  $t = 12$  (línea de puntos y rayas) y  $t = 60$  (línea de puntos).

Usando (3.10) y haciendo cálculos rutinarios se deduce la siguiente ecuación diferencial para  $\nu$ :

$$\nu'(t) = \left( \frac{D_{qq}}{2} + \frac{1}{8D_{qq}} \right) \frac{\partial_t n}{n} - \left( \frac{1}{8} + \frac{D_{qq}^2}{2} \right) \frac{|\nabla n|^2}{n^2} - (2D_{pq} - \eta D_{qq}) \log(n).$$

Finalmente, integrando respecto del tiempo obtenemos  $\nu$  y de ahí la siguiente solución de (3.13) para el dato inicial  $\psi_0$ :

$$\begin{aligned} \psi &= \sqrt{n} \exp \left\{ - \left( \frac{D_{qq}}{2} + \frac{1}{8D_{qq}} \right) \log \left( \frac{n}{n_0} \right) \right. \\ &\quad \left. - \int_0^t \left( \frac{1 + 4D_{qq}^2 |\nabla n(s)|^2}{8 n(s)^2} + (2D_{pq} - \eta D_{qq}) \log(n) \right) ds \right\}, \end{aligned}$$

donde

$$n_0(x) = |\psi_0(x)|^2, \quad n(t, x) = \frac{1}{(8\pi D_{qq} t)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} n_0(y) \exp \left( - \frac{|x - y|^2}{8D_{qq} t} \right) dy.$$

La dinámica asociada a la ecuación (3.13) es bastante similar a la difusión estándar (véase la Figura 3.4). Es destacable el hecho de que, a pesar de que el signo del término logarítmico podría cambiar (cuando  $\lambda > 1/\pi$ ), este hecho no alteraría el comportamiento observable (al nivel de la densidad local  $n$ ), ya que en la práctica solo perturbaría la fase de las soluciones.

## 3.2. Comparativa con Wigner–Fokker–Planck vía potenciales linealizados

En esta sección investigaremos la dinámica unidimensional asociada a la ecuación SLD y compararemos los resultados obtenidos con aquellos que provienen de resolver de forma exacta la ecuación de Wigner–Fokker–Planck en casos en los que esto es posible. En una primera aproximación vamos a considerar la evolución de la partícula libre ( $V = 0$ ) y del oscilador armónico ( $V(x) = \frac{1}{2}\omega_0^2 x^2$ , donde  $\omega_0$  denota la frecuencia de dicho oscilador) con niveles de acoplamiento del sistema que lo hacen sobreamortiguado e infraamortiguado, y aprovecharemos la solución exacta de WFP y el sistema hidrodinámico derivado en el capítulo anterior para obtener la forma funcional concreta de los términos no lineales y, en particular, del potencial  $U$  en SLD. De esta manera podremos establecer una comparativa entre la solución exacta de la ecuación de Wigner y el resultado numérico de una linealización de nuestro modelo de Schrödinger que proporcionan estas soluciones. Efectuaremos todos los cálculos en el sistema de unidades establecido en la sección anterior.

### 3.2.1. Soluciones exactas de la ecuación de Wigner–Fokker–Planck: partícula libre y oscilador armónico

Como la ecuación de Wigner–Fokker–Planck es lineal, es posible resolverla de forma teórica para potenciales externos sencillos, ya que podemos aplicar la transformada de Fourier y obtener la solución fundamental  $W_0$  de esta ecuación. Es sencillo entonces obtener una expresión general de la solución del problema de valores iniciales asociado a WFP para una condición inicial arbitraria  $W_I$  en términos de  $W_0$  y  $W_I$ . Valiéndonos de esta fórmula, calcularemos las densidades local y de corriente que describen de manera exacta la hidrodinámica de WFP con dato inicial maxwelliano, que serán de utilidad para linealizar SLD. Lo primero que haremos será construir las soluciones explícitas de la ecuación de WFP para la partícula libre y el oscilador armónico sin mostrar cálculos detallados, que pueden consultarse en el apéndice B.

#### La partícula libre

El ejemplo más sencillo de interacción disipativa sistema–baño térmico es la que no se ve sometida a la acción de ningún potencial externo. En este caso el término pseudo–diferencial en WFP desaparece y obtenemos

$$\partial_t W + \xi \partial_x W = D_{pp} \partial_{\xi\xi}^2 W + 2\lambda \partial_{\xi}(\xi W) + 2D_{pq} \partial_{x,\xi}^2 W + D_{qq} \partial_{x,x}^2 W. \quad (3.14)$$

En nuestro sistema de unidades (y poniendo  $\lambda$  en lugar de  $\eta$  como parámetro básico) los coeficientes vienen dados por

$$D_{pp} = 2\lambda T_0, \quad D_{pq} = \frac{\lambda \Omega_0}{6\pi T_0}, \quad D_{qq} = \frac{\lambda}{6T_0}.$$

Tras aplicarle transformada de Fourier, calcular las características, resolver la ecuación resultante e invertir las operaciones mencionadas, podemos escribir el propagador asociado a esta ecuación de la siguiente manera:

$$W_0(x, \xi, t) = (4\pi^2 d(t))^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{c(t)}{d(t)} x^2 + \frac{b(t)}{d(t)} x \xi - \frac{a(t)}{d(t)} \xi^2 \right\}, \quad (3.15)$$

donde

$$\begin{aligned} a(t) &= \frac{1}{4\lambda^2} \left\{ D_{pp} + 4\lambda^2 D_{qq} + 4\lambda D_{pq} + (1 - e^{-2\lambda t}) \left( \frac{D_{pp}}{4\lambda} (e^{-2\lambda t} - 3) - 2D_{pq} \right) \right\} \\ b(t) &= \frac{1}{4\lambda^2} (1 - e^{-2\lambda t}) (4\lambda D_{pq} + D_{pp} (1 - e^{-2\lambda t})), \\ c(t) &= \frac{D_{pp}}{4\lambda} (1 - e^{-4\lambda t}), \end{aligned} \quad (3.16)$$

y

$$d(t) = 4a(t)c(t) - b(t)^2 > 0 \quad \forall t > 0.$$

De aquí se deduce que la única solución de (3.14) con condición inicial  $W_I(x, \xi)$  viene dada por

$$W(x, \xi, t) = \int_{\mathbb{R}^2} W_0 \left( x - z - \left( \frac{1 - e^{-2\lambda t}}{2\lambda} \right) v, \xi - e^{-2\lambda t} v, t \right) W_I(z, v) dz dv. \quad (3.17)$$

Por tanto, si elegimos el perfil maxwelliano

$$W_I(x, \xi) = \frac{1}{\pi} e^{-x^2 - \xi^2} \quad (3.18)$$

como condición inicial, es sencillo calcular los dos primeros momentos (respecto de  $\xi$ ) obteniendo de esta manera la densidad local y la densidad de corriente asociadas a estas soluciones:

$$n(t, x) = \sqrt{\frac{e(t)}{\pi}} \exp\{-e(t)x^2\}, \quad J(t, x) = f(t) x \exp\{-e(t)x^2\}, \quad (3.19)$$

con

$$e(t) = \frac{4\lambda^2}{4\lambda^2(4a(t) + 1) + (1 - e^{-2\lambda t})^2}, \quad f(t) = \frac{4\lambda b(t) + e^{-2\lambda t}(1 - e^{-2\lambda t})}{2\sqrt{\pi}\lambda} e(t)^{\frac{3}{2}}.$$

### El oscilador armónico

El hamiltoniano asociado a la evolución del oscilador armónico cuántico viene dado por  $H = -\frac{1}{2}(\partial_{xx}^2 - \omega_0^2 x^2)$ . Este modelo se puede resolver exactamente en la formulación de Wigner incluso si tenemos en cuenta los términos del núcleo de Fokker-Planck, proporcionando así una formulación del oscilador armónico cuántico amortiguado (véase por ejemplo [55, 56, 65, 99, 116]). Podemos calcular, por tanto, el propagador de la ecuación de WFP con término pseudo-diferencial  $\Theta_{\hbar} = -\omega_0^2(x \cdot \nabla_{\xi})W$ , obteniendo idéntica forma funcional para la solución fundamental (fórmula (3.15)) donde los coeficientes vienen dados ahora por

$$\begin{aligned} a(t) &= \frac{1}{(\lambda_+ - \lambda_-)^2} \left\{ \hat{a}(t)(\lambda_+ e^{\lambda_+ t} - \lambda_- e^{\lambda_- t})^2 + \hat{c}(t)(e^{\lambda_+ t} - e^{\lambda_- t})^2 \right. \\ &\quad \left. + \hat{b}(t)(\lambda_+ e^{2\lambda_+ t} + \lambda_- e^{2\lambda_- t} - 2\lambda e^{2\lambda t}) \right\} e^{-4\lambda t}, \\ b(t) &= -\frac{1}{(\lambda_+ - \lambda_-)^2} \left\{ \omega_0^2 \hat{a}(t)(\lambda_+ e^{2\lambda_+ t} + \lambda_- e^{2\lambda_- t} - 2\lambda e^{2\lambda t}) \right. \\ &\quad \left. + \hat{c}(t)(\lambda_- e^{2\lambda_+ t} + \lambda_+ e^{2\lambda_- t} - 2\lambda e^{2\lambda t}) \right. \\ &\quad \left. + \hat{b}(t) \left( 2\omega_0^2 (e^{2\lambda_+ t} + e^{2\lambda_- t}) + (\lambda_+ + \lambda_-)^2 e^{2\lambda t} \right) \right\} e^{-4\lambda t}, \\ c(t) &= \frac{1}{(\lambda_+ - \lambda_-)^2} \left\{ \hat{a}(t)(e^{\lambda_+ t} - e^{\lambda_- t})^2 + \hat{c}(t)(\lambda_+ e^{\lambda_- t} - \lambda_- e^{\lambda_+ t})^2 \right. \\ &\quad \left. + \omega_0^2 \hat{b}(t)(\lambda_+ e^{2\lambda_- t} + \lambda_- e^{2\lambda_+ t} - 2\lambda e^{2\lambda t}) \right\} e^{-4\lambda t}, \end{aligned} \quad (3.20)$$

y

$$d(t) = 4a(t)c(t) - b(t)^2 > 0 \quad \forall t > 0.$$

En estas expresiones hemos denotado  $\lambda_{\pm} = \lambda \pm \sqrt{\lambda^2 - \omega_0^2}$  y

$$\begin{aligned} \hat{a}(t) &= \frac{\lambda_+^2}{2\lambda_-} \left[ D_{qq} + \frac{\lambda_-}{\omega_0^2} \left( \frac{\lambda_-}{\omega_0^2} D_{pp} + 2D_{pq} \right) \right] (e^{2\lambda_-t} - 1) \\ &\quad + \frac{\lambda_-^2}{2\lambda_+} \left[ D_{qq} + \frac{\lambda_+}{\omega_0^2} \left( \frac{\lambda_+}{\omega_0^2} D_{pp} + 2D_{pq} \right) \right] (e^{2\lambda_+t} - 1) \\ &\quad - \frac{1}{\lambda} (2\omega_0^2 D_{qq} + D_{pp} + 4\lambda D_{pq}) (e^{2\lambda t} - 1), \\ \hat{b}(t) &= \frac{1}{\lambda} (2\omega_0^2 D_{qq} + D_{pp} + 4\lambda D_{pq}) (e^{2\lambda t} - 1) \\ &\quad - \left( \frac{\omega_0^2}{\lambda_+} D_{qq} + \frac{\lambda_+}{\omega_0^2} D_{pp} + 2D_{pq} \right) (e^{2\lambda_+t} - 1) \\ &\quad - \left( \frac{\omega_0^2}{\lambda_-} D_{qq} + \frac{\lambda_-}{\omega_0^2} D_{pp} + 2D_{pq} \right) (e^{2\lambda_-t} - 1), \\ \hat{c}(t) &= \frac{\omega_0^2}{2} \left\{ \left( \frac{\omega_0^2}{\lambda_+} D_{qq} + \frac{\lambda_+}{\omega} D_{pp} + 2D_{pq} \right) (e^{2\lambda_+t} - 1) \right. \\ &\quad + \left( \frac{\omega_0^2}{\lambda_-} D_{qq} + \frac{\lambda_-}{\omega_0^2} D_{pp} + 2D_{pq} \right) (e^{2\lambda_-t} - 1) \\ &\quad \left. - \frac{1}{\lambda} (2\omega_0^2 D_{qq} + D_{pp} + 4\lambda D_{pq}) (e^{2\lambda t} - 1) \right\}. \end{aligned}$$

Nótese que en el caso infraamortiguado se tiene que  $\lambda^2 - \omega_0^2 < 0$ , por lo que debemos entender la raíz cuadrada en el sentido de los números complejos (como número imaginario puro) de manera que los cálculos son siempre válidos teniendo presente este convenio. Así, podemos calcular la única solución de

$$\partial_t W + \xi \partial_x W - \omega_0^2 x \partial_\xi W = D_{pp} \partial^2_{\xi\xi} W + 2\lambda \partial_\xi (\xi W) + 2D_{pq} \partial^2_{x\xi} W + D_{qq} \partial^2_{xx} W,$$

que viene dada por

$$W(x, \xi, t) = \int_{\mathbb{R}^2} W_0(x - A_z z - A_v v, \xi - B_z z - B_v v, t) W_I(z, v) dz dv, \quad (3.21)$$

donde las traslaciones en posición y velocidad de la solución fundamental quedan ahora determinadas por

$$\begin{aligned} A_z(t) &= \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} (\lambda_+ e^{-\lambda_- t} - \lambda_- e^{-\lambda_+ t}), \\ A_v(t) &= \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} (e^{-\lambda_- t} - e^{-\lambda_+ t}), \\ B_z(t) &= \frac{\omega_0^2}{\lambda_+ - \lambda_-} (e^{-\lambda_+ t} - e^{-\lambda_- t}), \\ B_v(t) &= \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} (\lambda_+ e^{-\lambda_+ t} - \lambda_- e^{-\lambda_- t}). \end{aligned}$$

Como consecuencia, es sencillo comprobar que las densidades local y de corriente asociadas a un dato inicial maxwelliano  $W_I(x, \xi) = \frac{1}{\pi} e^{-x^2 - \xi^2}$  vienen dadas respectivamente por

$$\begin{aligned} n(t, x) &= \sqrt{\frac{e(t)}{\pi}} \exp \{-e(t) x^2\}, \\ J(t, x) &= \sqrt{\frac{e(t)}{\pi}} \left( e(t) g(t) + \frac{b(t)}{2a(t)} \right) x \exp \{-e(t) x^2\}, \end{aligned} \quad (3.22)$$

donde

$$\begin{aligned} e(t) &= \frac{1}{4a(t) + A_z(t)^2 + A_v(t)^2}, \\ g(t) &= A_z(t)B_z(t) + A_v(t)B_v(t) - \frac{b(t)}{2a(t)} (A_z(t)^2 + A_v(t)^2). \end{aligned}$$

### 3.2.2. Linealización de SLD y resultados numéricos

Como ya discutimos en el Capítulo 2, la interacción que describe la ecuación de WFP puede causar que una función de onda  $\psi_I$  evolucione con el tiempo hacia un estado mixto debido a la acción del entorno sobre el sistema. Esta influencia queda descrita en la familia de ecuaciones SLD por el potencial efectivo de autointeracción  $U$ , que a su vez está determinado de forma teórica por la varianza de las velocidades entre los distintos estados que conforman la función de Wigner del sistema, y en última instancia se puede escribir en términos de los tres primeros momentos en velocidad de  $W$ . En los casos  $V = 0$  y  $V(x) = -\frac{1}{2}\omega_0^2 x^2$  con condición inicial gaussiana

$$\psi_I(x) = \pi^{-1/4} e^{-x^2/2}, \quad (3.23)$$

(función de onda tal que  $\mathcal{W}[\rho_I] = W_I$ , donde  $\rho_I(x, y) = \psi_I(x)\overline{\psi_I(y)}$  y  $W_I$  es el dato inicial de las soluciones de WFP calculadas en el apartado anterior), podríamos aprovechar esta relación para establecer  $U$  de forma “exacta” y testar el caso más fiable del modelo SLD. El cálculo del tensor  $\mathbb{T}$  es sin embargo bastante arduo y resulta poco operativo obtener el potencial de autointeracción de esta manera. No obstante, bajo las hipótesis del modelo y usando las ecuaciones (2.36)–(2.37), dicho término debe verificar la relación

$$\partial_t S + \frac{1}{2D_{qq}} (\partial_x S)^2 = -2D_{qq} (U + Q + 2D_{pq} \log(n)) - 2\lambda S + 2D_{qq} F + D_{qq} \partial^2_{xx} S, \quad (3.24)$$

donde recordamos que  $Q$  es el potencial de Bohm definido en (2.14) en el sistema de unidades establecido al principio de la sección. Como conocemos  $n$  y  $J$  dados respectivamente por (3.19) y (3.22), podemos aprovechar que estamos en el caso unidimensional para definir

$$S(t, x) = 2D_{qq} \int_0^x \frac{J(t, y)}{n(t, y)} dy,$$

que satisface (2.34) y nos permite conocer todos los términos de (3.24) y, en consecuencia, calcular  $U$  en función de las densidades local y de corriente:

$$U = Q + 2D_{pq} \log(n) + \frac{1}{2D_{qq}} \left( \frac{J}{n} \right)^2 + \int \left\{ \partial_t \left( \frac{J}{n} \right) - 2\lambda \frac{J}{n} - \frac{\partial_x n}{n} \partial_x \left( \frac{J}{n} \right) \right\} + \partial_x \left( \frac{J}{n} \right).$$

Insertando dicha  $U$  y sustituyendo en SLD cada uno de los términos no lineales por sus valores en función de  $n$  y  $J$ :

$$S = 2D_{qq} \int \frac{J}{n} dy, \quad \log(n), \quad \frac{\partial^2_{xx} n}{n}, \quad F = \int \frac{\partial_x n}{n} \partial^2_{xx} S dx \quad \text{y} \quad \partial_x \left( \frac{J}{n} \right),$$

podemos resolver numéricamente la ecuación “linealizada”

$$i\partial_t \psi = -\frac{1}{2} \partial^2_{xx} \psi + p(t, x) \psi, \quad (3.25)$$

donde  $p(t, x)$  es un polinomio complejo de grado 2 en  $x$ .

En el caso  $V = 0$ ,  $p(t, x)$  está determinado por

$$\begin{aligned} p(t, x) &= D_{pq} \left( \log(e(t)) - \log(\pi) \right) - D_{qq} \left( \sqrt{\frac{\pi}{e(t)}} f(t) + ie(t) \right) \\ &+ \left\{ \lambda \sqrt{\frac{\pi}{e(t)}} f(t) - 2D_{pq} e(t) + 2D_{qq} e(t) \left( \sqrt{\frac{\pi}{e(t)}} f(t) + ie(t) \right) \right\} x^2 \\ &+ \left( \frac{e(t)}{\pi} \right)^{1/3} e^{\{-\frac{2}{3} e(t) x^2\}}. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Elijiendo el dato inicial  $\psi_I$  de (3.23) y condiciones de Dirichlet homogéneas en la frontera

$$\psi(-15, t) = \psi(15, t) = 0, \quad (3.27)$$

podemos resolver numéricamente (3.25) y comparar los resultados obtenidos con los observables asociados a la ecuación de Wigner. En las Figuras 3.5 y 3.6 mostramos la comparativa entre las densidades locales de ambas para los siguientes regímenes de acoplamiento débil:  $(T_0 = 2, \Omega_0 = 1, \lambda = 0,15)$  y  $(T_0 = 2, \Omega_0 = 1, \lambda = 0,05)$ . Dichos conjuntos de valores satisfacen la condición de Lindblad (2.4), que puede reescribirse (en nuestro sistema de unidades) en términos de las constantes originales de interacción como

$$\frac{\Omega_0}{T_0} \leq \sqrt{3}\pi$$

o bien  $\eta = 0$  (el caso trivial, sin acoplamiento). Esta relación se satisface para temperaturas medias y altas.

Para el oscilador armónico podemos actuar de idéntica forma a la descrita arriba y obtenemos el potencial complejo

$$\begin{aligned} q(t, x) &= D_{pq} \left( \log(e(t)) - \log(\pi) \right) - D_{qq} e(t) (h(t) + i) + \left( \frac{e(t)}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} e^{\{-\frac{2}{3} e(t) x^2\}} \\ &+ e(t)^2 \left\{ \frac{\lambda h(t) - 2D_{pq}}{e(t)} - 2D_{qq} (h(t) - i) + \frac{\omega_0^2}{2} \right\} x^2, \end{aligned} \quad (3.28)$$

donde

$$h(t) = A_z(t)B_z(t) + A_v(t)B_v(t) + 2b(t).$$

Podemos resolver entonces la ecuación de Schrödinger lineal correspondiente

$$i\partial_t\psi = -\frac{1}{2}\psi_{xx} + q(t, x)\psi \quad (3.29)$$

con el mismo dato inicial que antes y condiciones de Dirichlet homogéneas en la frontera (cf. (3.23) y (3.27)).

$$\psi(-15, t) = \psi(15, t) = 0. \quad (3.30)$$

En este caso hemos considerado  $\omega_0^2 = 0,01$ , que responde al caso sobreamortiguado con  $\lambda = 0,15$  (Figura 3.7) y el oscilador infraamortiguado para  $\lambda = 0,05$  (Figura 3.8).

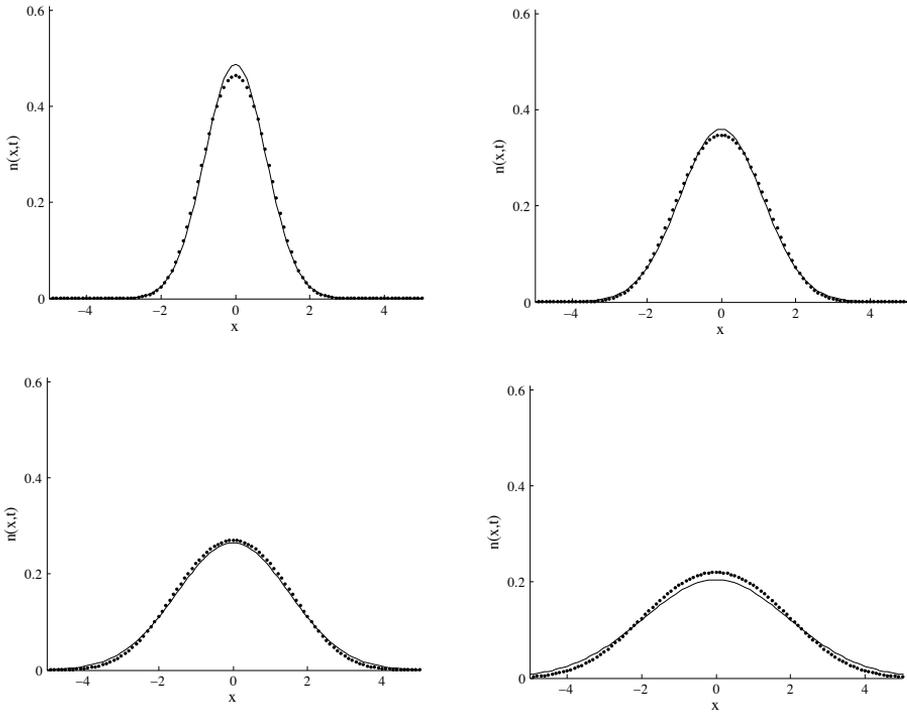


Figura 3.5: De arriba abajo y de izquierda a derecha: representaciones de la densidad local para la solución exacta de WFP en el caso de la partícula libre (línea continua) y para la solución numérica de (3.25)–(3.27) (línea de puntos) con datos iniciales dados por (3.18) y (3.23) respectivamente, y constantes de interacción  $\lambda = 0,15$ ,  $\Omega_0 = 1$  y  $T_0 = 2$ , en los tiempos  $t = 0,5$ ,  $t = 1$ ,  $t = 1,5$  y  $t = 2$ .

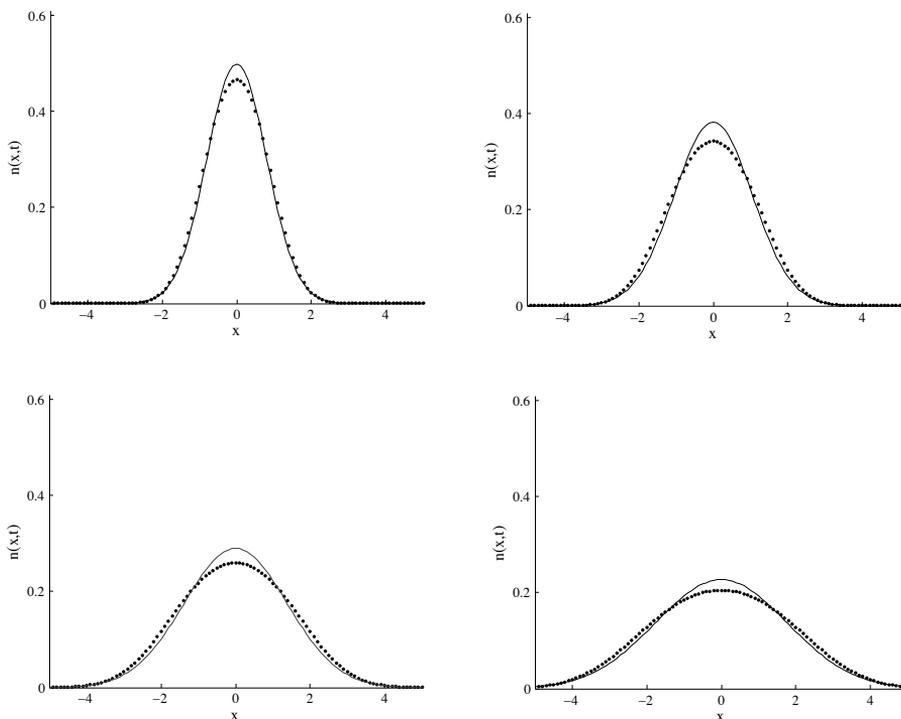


Figura 3.6: De arriba abajo y de izquierda a derecha: representaciones de la densidad local para la solución exacta de WFP en el caso de la partícula libre (línea continua) y para la solución numérica de (3.25)–(3.27) (línea de puntos) con datos iniciales dados por (3.18) y (3.23) respectivamente y constantes de interacción  $\lambda = 0,05$ ,  $\Omega_0 = 1$  y  $T_0 = 2$ , en los instantes de tiempo  $t = 0,5$ ,  $t = 1$ ,  $t = 1,5$  y  $t = 2$ .

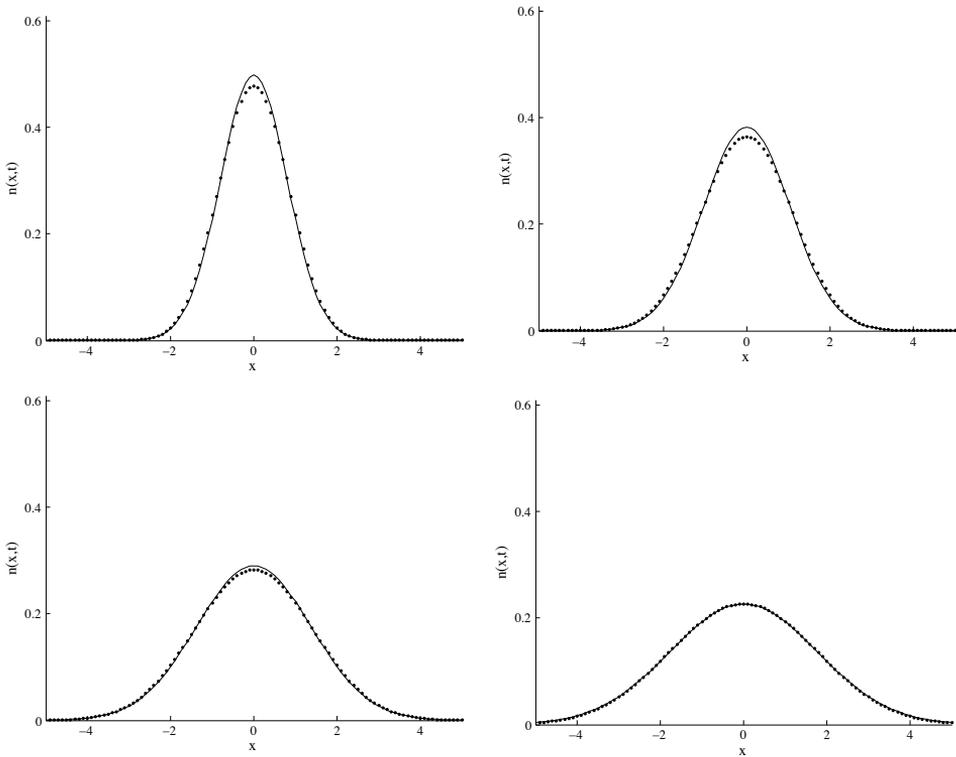


Figura 3.7: De arriba abajo y de izquierda a derecha: representación de las densidades locales para la solución exacta de la ecuación de WFP en el caso del oscilador armónico sobreamortiguado (línea continua) y para la solución numérica de (3.28)–(3.30) (línea de puntos) con datos iniciales dados por (3.18) y (3.23) respectivamente y constantes de interacción  $\lambda = 0,15$ ,  $\Omega_0 = 1$  and  $T_0 = 2$ , en los instantes de tiempo  $t = 0,5$ ,  $t = 1$ ,  $t = 1,5$  y  $t = 2$ .

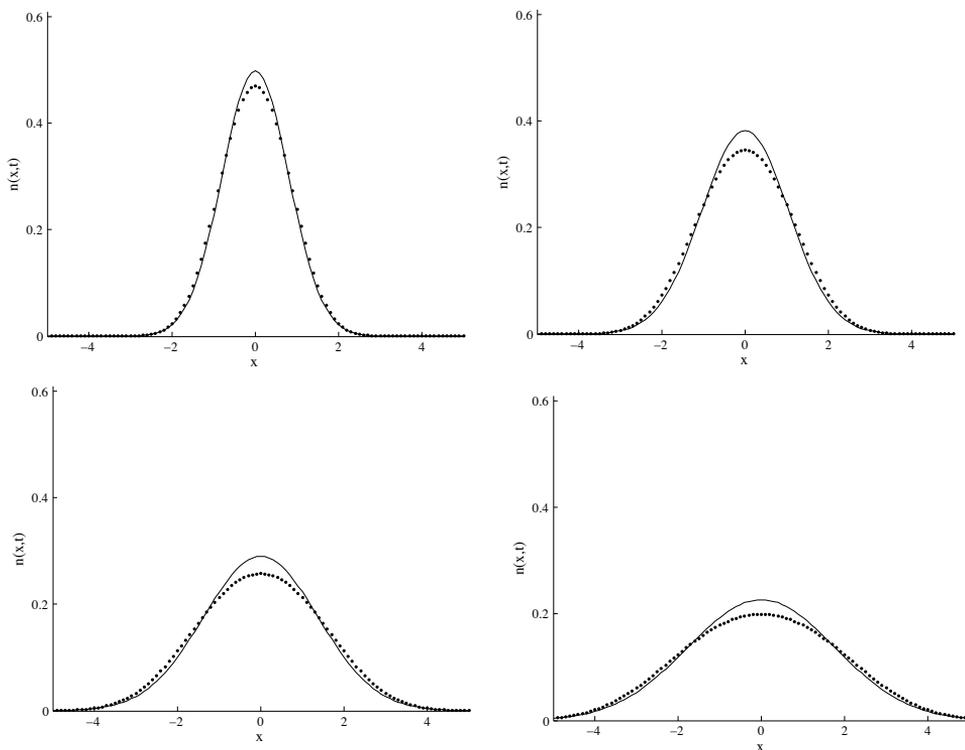


Figura 3.8: De arriba abajo y de izquierda a derecha: representación de las densidades locales de la solución exacta de la ecuación de WFP en el caso del oscilador armónico infraamortiguado (línea continua) y para la solución numérica de (3.28)–(3.30) (línea de puntos) con datos iniciales dados por (3.18) y (3.23) respectivamente, y constantes de interacción  $\lambda = 0,05$ ,  $\Omega_0 = 1$  y  $T_0 = 2$ , en los instantes de tiempo  $t = 0,5$ ,  $t = 1$ ,  $t = 1,5$  y  $t = 2$ .

# Existencia de argumento de una función de onda

---

El objetivo de este capítulo es analizar con detalle las dificultades matemáticas más importantes que surgen a la hora de encontrar la descomposición módulo-argumento de una función compleja y establecer rigurosamente una definición precisa y unívoca (salvo una familia numerable de constantes aditivas) del argumento de una función de onda. En la primera sección discutiremos sobre el planteamiento adecuado, las hipótesis necesarias sobre la geometría del dominio y las herramientas utilizadas para resolver este problema en dominios acotados tridimensionales. En la segunda sección probaremos la existencia de una función argumento para un estado cuántico independiente del tiempo, basándonos en la existencia de un potencial escalar del campo de velocidades asociado a dicho estado. Finalmente, dedicaremos la última sección a obtener la familia de argumentos asociada a la solución de una ecuación de Schrödinger general, lo cual permitirá establecer una conexión rigurosa entre las formulaciones hidrodinámica y de onda de la mecánica cuántica y será de gran utilidad, además, para el desarrollo de los próximos capítulos, donde estudiaremos distintos modelos asociados a fenómenos cuánticos disipativos.

## 4.1. Sobre el problema del argumento

La definición adecuada y la regularidad del argumento de una función de onda compleja  $\psi$  constituye un problema de gran interés en mecánica cuántica, que cobra especial relevancia cuando se pretende relacionar la ecuación de Schrödinger con la descripción hidrodinámica que proporcionan las leyes de evolución para la densidad local  $n = |\psi|^2$  y la fase  $S$  asociadas a la función de onda. La llave de esta conexión es la descomposición módulo-argumento (forma de Madelung [85] o perfil WKB) de  $\psi$

$$\psi(t, x) = |\psi(t, x)| \exp \left\{ \frac{i}{\alpha} S(t, x) \right\}, \quad (4.1)$$

donde  $\alpha > 0$  es la unidad de acción del sistema, habitualmente la constante de Planck  $\hbar$  aunque puede tratarse de alguna modificación relacionada con la física del sistema (como sucede en los Capítulos 2 y 5, o en [86]), o de un reescalado de la propia  $\hbar$  [70]. Dicha descomposición no se puede materializar en general, ya que (4.1) pierde sentido cuando  $\psi = 0$  e implica formalmente

$$S(t, x) = \frac{1}{2i\alpha} \log \left( \frac{\psi(t, x)}{\overline{\psi}(t, x)} \right),$$

expresión que está mal definida debido a que el logaritmo neperiano es una función multivaluada en el plano complejo. Nuestro objetivo en este capítulo es ofrecer un tratamiento analítico adecuado que permita escribir de forma rigurosa la forma de Madelung de una función de onda  $\psi$  dependiente del tiempo. El primer paso en esta dirección consiste en llevar a cabo una lectura matemática adecuada de (4.1) que nos permita obtener de manera precisa alguna función  $S$  verificando dicha relación. No podemos esperar que esta  $S$  sea única, ya que la exponencial compleja es  $2\pi i$ -periódica, aunque sí sería deseable encontrar una familia numerable formada por todos los argumentos de  $\psi$ . Por último, dado que nuestro análisis está orientado al tratamiento y resolución de ecuaciones en derivadas parciales, nos interesa también estudiar la regularidad de  $S$ , problema que estará relacionado con la dependencia continua de  $S$  respecto de  $\psi$ .

A nuestro entender, no existen en la literatura unanimidad en torno a cuál es la interpretación óptima de (4.1), aunque algunos autores proponen trabajar con sistemas hidrodinámicos cuánticos disipativos aprovechando la equivalencia formal de estos con la siguiente ecuación de Schrödinger

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(x)\psi + h(n)\psi + S\psi, \quad (4.2)$$

que contiene el término no lineal  $S\psi$  introducido por Kostin para representar la dinámica de Langevin en la formulación de onda [73]. En esta formulación  $h(n)$  representa la entalpía del sistema y depende tan solo de la densidad local  $n$  a través de la presión. Nótese, sin embargo, que (4.2) es una ecuación mal definida (y por tanto mal planteada) si  $S$  no está determinado de forma precisa. No obstante, para estudiar el sistema determinado por las densidades local y de corriente no es necesario calcular  $S$  explícitamente. En [7], por ejemplo, se demuestra la existencia de soluciones débiles con energía finita para el siguiente sistema hidrodinámico cuántico acoplado con el potencial de Poisson  $V$  en todo el espacio  $\mathbb{R}^3$ :

$$\begin{aligned} \partial_t n + \operatorname{div}(J) &= 0 \\ \partial_t J + \operatorname{div} \left( \frac{J \otimes J}{n} \right) + J + \nabla p(n) &= -n \nabla(V + mQ) \end{aligned}$$

( $p$  es la presión -escalar-) usando una técnica de paso fraccionario que permite obtener las magnitudes  $n$  y  $J$  resolviendo (4.2) sin el término de Kostin y pasando al límite de forma adecuada, eludiendo de esta forma el cálculo explícito de  $S$ . En [76] se estudia el buen planteamiento y límite semiclásico de un sistema

de Schrödinger–Poisson similar a (4.2) en dimensión arbitraria y en todo el espacio tomando gradientes en la ecuación de Schrödinger, evitando de este modo la definición precisa del término de fricción. Estos dos esquemas consiguen obtener información sobre la física del sistema pero sin afrontar de forma directa el problema del argumento, por lo que ninguno de ellos resulta satisfactorio para nuestros propósitos. En [71], sin embargo, los autores analizan el problema de tipo mixto asociado a un sistema de flujo potencial con fricción y acoplado con la ecuación de Poisson en un dominio acotado  $\Omega$ , que resuelven aprovechando la equivalencia de dicho sistema con la ecuación de Schrödinger no lineal (4.2), y dan una interpretación bien definida y unívoca del término de fricción:  $S$  consiste en la única solución del problema de contorno de tipo Dirichlet asociado a la siguiente ecuación elíptica

$$\Delta S = \hbar \operatorname{Im} \left( \operatorname{div} \frac{\nabla \psi}{\psi} \right) = \hbar \frac{n \operatorname{Im}(\bar{\psi} \Delta \psi) - 2 \operatorname{Re}(\bar{\psi} \nabla \psi) \operatorname{Im}(\bar{\psi} \nabla \psi)}{|\psi|^4}, \quad (4.3)$$

que se obtiene de suponer que el dato inicial está descompuesto en módulo y argumento. La ecuación (4.3) es singular en las zonas de vacío (donde  $\psi = 0$ ), lo que exige trabajar en espacios funcionales separados de cero (como los  $H_\delta$  presentados en el Capítulo 1). Bajo este punto de vista se obtiene una función  $S$  con regularidad apropiada, pero dependiente de las condiciones de contorno impuestas sobre  $S$ , lo que provoca que la física asociada al sistema hidrodinámico dependa de una elección concreta del argumento de la condición inicial, circunstancia poco deseable porque el comportamiento observable de un sistema debe ser invariante ante cambios en una variable dinámica no observable como es  $S$  (en el Capítulo 6 discutimos esta situación con más detalle en el contexto del buen planteamiento de una generalización de la ecuación de Schrödinger–Langevin (4.2)). Este problema puede solventarse respetando (4.3) e imponiendo condiciones de tipo Neumann en  $\partial\Omega$ , que son más adecuadas ya que  $\psi$  determina completamente  $\nabla S$  en términos de sus densidades local y de corriente asociadas. No vamos a seguir este camino, no obstante, porque conlleva otras dificultades relativas al conocimiento de  $\nabla \psi$  en la frontera del dominio. Sin embargo, sí podemos expresar la idea en el interior de  $\Omega$ . Concretamente, si asumimos que una función compleja  $\psi$  se puede descomponer en la forma de Madelung (4.1), entonces basta con derivar para comprobar que se satisface la siguiente relación

$$\nabla S = \alpha \operatorname{Im} \left( \frac{\nabla \psi}{\psi} \right) = m \frac{J}{n}, \quad (4.4)$$

donde las magnitudes  $n$  y  $J$  representan las densidades local y de corriente asociadas a la función de onda  $\psi$ , y están definidas como

$$n = |\psi|^2 \quad \text{y} \quad J = \frac{\alpha}{m} \operatorname{Im}(\bar{\psi} \nabla \psi). \quad (4.5)$$

Tomaremos la igualdad (4.4), que en particular implica (4.3) (basta con seleccionar  $\alpha = \hbar$  y tomar divergencias) y no depende de información adicional sobre  $S$ , como ecuación básica para obtener el argumento de la función de onda y encontrar así la

conexión entre las descripciones hidrodinámica y de Schrödinger de la mecánica cuántica.

Bajo este punto de vista reducimos el problema del argumento al cálculo de un potencial escalar asociado al campo vectorial  $J/n$ . Dedicaremos la segunda sección del capítulo a resolver dicha cuestión en dominios acotados  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ , asumiendo conexión simple de  $\Omega$  y aplicando un resultado general de existencia de potenciales escalares desarrollado en [3]. Este teorema requiere obviamente la irrotacionalidad del campo, propiedad que se deduce fácilmente de la segunda igualdad en (4.4) y del lema de Schwarz. Obtendremos como resultado una única (salvo constante aditiva) solución de (4.4) para cualquier  $\psi \in H^2_\delta(\Omega)$  dada, que permitirá construir una familia  $\{S^l\}_{l \in \mathbb{Z}} \subset H^2(\Omega)$  tal que

$$\psi(x) = \sqrt{n(x)} \exp \left\{ \frac{i}{\alpha} S^l(x) \right\}, \quad \text{c.t. } x \in \Omega \quad \text{y} \quad (4.6)$$

$$S^l - S^m = 2\pi\alpha(l - m). \quad (4.7)$$

La hipótesis de conexión simple que imponemos sobre el dominio es de importancia crucial para nuestros propósitos, ya que sin ella existen funciones regulares y separadas de cero que no admiten argumentos continuos. Para ilustrar este hecho consideramos el cilindro (hueco) con base un anillo de radios  $0 < r < 1$  y 1 y altura la unidad:

$$\Omega = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : 0 < r^2 < x^2 + y^2 < 1, 0 < z < 1\}$$

y la función compleja  $\psi : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$  definida por  $\psi(x, y, z) = x + iy$ . Es claro que  $\psi \in C^\infty(\Omega) \cap L^2(\Omega)$  y  $|\psi| = \sqrt{x^2 + y^2} > r > 0$  para cualquier  $(x, y, z) \in \Omega$  y, sin embargo, no existe ningún argumento continuo de  $\psi$  en  $\Omega$ . En efecto, si existiera dicho argumento  $S : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ , podríamos considerar  $\mathcal{R}(0; r^2, 1) \subset \mathbb{C}$  el anillo centrado en cero de radios  $r^2$  y 1 y la inclusión  $\iota : \mathcal{R}(0; r^2, 1) \rightarrow \Omega$  definida por  $\iota(w) = (\text{Re}(w), \text{Im}(w), 0)$  de manera que  $S \circ \iota$  constituiría un argumento continuo de la identidad  $\psi \circ \iota : \mathcal{R}(0; r^2, 1) \rightarrow \mathcal{R}(0; r^2, 1)$  en un dominio del plano complejo con un agujero, algo que es imposible en virtud de los resultados clásicos del análisis de variable compleja (consúltese, por ejemplo, el Teorema 13.18 en [100]). Este ejemplo pone de manifiesto la importancia de la geometría de  $\Omega$  en el problema de la existencia de  $S$ . Se pueden obtener, sin embargo, argumentos con cierta utilidad matemática si admitimos que de  $S$  contenga saltos de longitud apropiada o trabajamos en espacios funcionales cociente (para eliminar el efecto de dichos saltos). El análisis en esta línea conlleva múltiples dificultades técnicas, por lo que mantendremos la hipótesis de conexión simple del dominio, que además es poco restrictiva en los casos aplicables (en dispositivos semiconductores, por ejemplo).

Nótese, por otra parte, que la segunda igualdad en (4.4) implica que  $S$  se puede determinar, salvo constante aditiva, en términos de las magnitudes observables  $n$  y  $J$  asociadas a la función de onda. Demostraremos como consecuencia que un estado cuántico está, bajo hipótesis razonables, totalmente determinado por estos dos observables, aunque obviamente la función de onda no puede estarlo (el Corolario 4.2.5 contiene la formulación precisa de dicha propiedad). Expondremos

el resto del capítulo en términos de dichos observables para poner de manifiesto este hecho.

Finalmente, es importante señalar que para obtener dependencia continua de  $S$  respecto de  $\psi$  es necesaria una condición de normalización, que surge utilizando los resultados desarrollados en [4]. En efecto, la única  $S$  solución de (4.4) con valor medio nulo en  $\Omega$  se puede acotar (en norma) por  $J/n$  y, por tanto, para cualquier  $\mu \in \mathbb{R}$  la aplicación  $\psi \mapsto S(\psi)$  será continua de  $H_\delta^2(\Omega)$  en el conjunto

$$\left\{ S \in H^2(\Omega) : \int_{\Omega} S \, dx = \mu \right\}.$$

Esta propiedad será útil a la hora de encontrar el argumento de una función de onda  $\psi(t, x)$  dependiente del tiempo. Sin embargo no será suficiente, ya que para conseguir regularidad temporal de  $S$  trabajaremos con funciones complejas que sean solución de una ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. En la última sección del capítulo encontraremos una función argumento  $S \in X^T$  para cualquier  $\psi \in X_\delta^T$  con estas características (véanse las definiciones de  $X^T$  y  $X_\delta^T$  en el capítulo 1), que además verificará, junto con la densidad  $n$ , el sistema hidrodinámico cuántico correspondiente.

## 4.2. Argumento de una función compleja independiente del tiempo

En esta sección encontraremos la familia de argumentos de una función compleja separada de cero. Como hemos comentado en la sección anterior, dicha familia quedará prácticamente determinada por las densidades local y de corriente, por lo que es necesario establecer las propiedades de regularidad de dichos observables en el espacio  $H_\delta^2(\Omega)$  que recogemos en el siguiente lema.

### Lema 4.2.1

Sean  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  un dominio acotado con frontera de clase  $C^1$ ,  $\delta > 0$  y  $\psi \in H_\delta^2(\Omega)$ . Entonces, para  $n = |\psi|^2$  y  $J = \frac{\alpha}{m} \text{Im}(\bar{\psi} \nabla \psi)$  se verifica la siguiente identidad:

$$\bar{\psi} \nabla \psi = \frac{1}{2} \nabla n + \frac{m}{\alpha} i J. \quad (4.8)$$

Como consecuencia

(i)  $\sqrt{n} \in H_\delta^2(\Omega)$ ,  $n \in H_{\delta^2}^2(\Omega)$ ,  $J, \nabla n/n, J/n \in H^1(\Omega)$ , y las aplicaciones

$$\psi \mapsto \sqrt{n}, n, J, \frac{\nabla n}{n}, \frac{J}{n}$$

son localmente lipschitzianas (y en particular continuas) de  $H_\delta^2(\Omega)$  en el correspondiente espacio funcional en cada caso.

(ii)  $\Delta\psi \in L^2(\Omega)$  se puede escribir de la siguiente manera:

$$\Delta\psi = \left\{ -\frac{2m}{\hbar^2} Q - \frac{m}{\alpha} \left( \frac{m}{\alpha} \frac{|J|^2}{n^2} - i \frac{\operatorname{div}(J)}{n} \right) \right\} \psi,$$

donde  $Q$  es el potencial cuántico de Bohm definido como

$$Q(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta\sqrt{n}}{\sqrt{n}}.$$

DEMOSTRACIÓN:

La identidad (4.8) es una consecuencia directa de la definición de  $J$  y el hecho de que  $\nabla n = 2\operatorname{Re}(\bar{\psi}\nabla\psi)$ . Para comprobar (i) observamos primero que la regularidad y dependencia continua de  $\sqrt{n}$  respecto de  $\psi$  son obvias teniendo en cuenta que  $\sqrt{n} = |\psi|$ . Además, la inmersión de Sobolev  $H^2(\Omega) \hookrightarrow L^\infty(\Omega)$  nos permite considerar  $\psi \in L^\infty(\Omega)$ . Entonces  $\bar{\psi}\nabla\psi \in L^2(\Omega)$  y

$$\nabla \otimes (\bar{\psi}\nabla\psi) = \nabla\bar{\psi} \otimes \nabla\psi + \bar{\psi}(\nabla \otimes \nabla)\psi \in L^2(\Omega),$$

ya que  $\nabla\psi \in H^1(\Omega) \subset L^4(\Omega)$ . Por tanto  $\nabla\bar{\psi} \otimes \nabla\psi \in L^2(\Omega)$  y como consecuencia  $\bar{\psi}\nabla\psi \in H^1(\Omega)$ . Tomando partes reales en (4.8) tenemos que  $\nabla n \in H^1(\Omega)$ , luego  $n \in H^2(\Omega)$ . Además, la hipótesis de separación de cero  $|\psi| > \delta$  implica que  $n \in H^2_\delta(\Omega)$ . Tomando ahora partes imaginarias, se deduce de forma sencilla que  $J \in H^1(\Omega)$ . De nuevo, el hecho de que  $|\psi| > \delta$  nos permite garantizar que  $\nabla n/n, J/n \in H^1(\Omega)$ . Para verificar la lipschitzianidad local de las aplicaciones definidas en (i) es suficiente comprobar que para cualesquiera  $\psi, \phi \in H^2_\delta(\Omega)$  se tiene que

$$\begin{aligned} \|n_\psi - n_\phi\|_{L^2} &\leq C\|n_\psi - n_\phi\|_{L^\infty} \leq C\left\{ \|\psi(\bar{\psi} - \bar{\phi})\|_{L^\infty} + \|\bar{\phi}(\phi - \psi)\|_{L^\infty} \right\} \\ &\leq C\left( \|\psi\|_{H^2} + \|\phi\|_{H^2} \right) \|\psi - \phi\|_{H^2}, \end{aligned} \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned} \|\bar{\psi}\nabla\psi - \bar{\phi}\nabla\phi\|_{L^2} &\leq \|\bar{\psi}(\nabla\psi - \nabla\phi)\|_{L^2} + \|\nabla\phi(\bar{\psi} - \bar{\phi})\|_{L^2} \\ &\leq \|\psi\|_{L^\infty} \|\nabla\psi - \nabla\phi\|_{L^2} + \|\nabla\phi\|_{L^2} \|\psi - \phi\|_{L^\infty} \\ &\leq C\left( \|\psi\|_{H^2} + \|\phi\|_{H^2} \right) \|\psi - \phi\|_{H^2}, \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} \|\nabla \otimes (\bar{\psi}\nabla\psi - \bar{\phi}\nabla\phi)\|_{L^2} &\leq \|\nabla\bar{\psi} \otimes (\nabla\psi - \nabla\phi)\|_{L^2} + \|\nabla\phi \otimes (\nabla\bar{\psi} - \nabla\bar{\phi})\|_{L^2} \\ &\quad + \|\bar{\psi}\nabla \otimes \nabla(\psi - \phi)\|_{L^2} + \|(\bar{\psi} - \bar{\phi})\nabla \otimes \nabla\phi\|_{L^2} \\ &\leq C\left( \|\psi\|_{H^2} + \|\phi\|_{H^2} \right) \|\psi - \phi\|_{H^2}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

donde  $C$  denota varias constantes positivas que dependen solo de  $\Omega$ . Además la aplicación  $\psi \in H^2_\delta(\Omega) \mapsto \bar{\psi}\nabla\psi \in H^1(\Omega)$  es continua, luego  $\psi \mapsto \nabla n$  y  $\psi \mapsto J$  también lo son. Esto junto con (4.9) implican la propiedad de Lipschitz local de

$H_\delta^2(\Omega) \ni \psi \mapsto n \in H_{\delta^2}^2(\Omega)$ . En este punto la continuidad de  $\psi \mapsto \nabla\psi/\psi$  de  $H_\delta^2(\Omega)$  en  $L^2(\Omega)$  es una consecuencia sencilla de la positividad estricta de  $|\psi|$ . Además, basta con derivar para obtener que

$$\left\| \nabla \otimes \left( \frac{\nabla\psi}{\psi} - \frac{\nabla\phi}{\phi} \right) \right\|_{L^2} \leq \left\| \frac{\nabla \otimes \nabla\psi}{\psi} - \frac{\nabla \otimes \nabla\phi}{\phi} \right\|_{L^2} + \left\| \frac{\nabla\psi}{\psi} \otimes \frac{\nabla\psi}{\psi} - \frac{\nabla\phi}{\phi} \otimes \frac{\nabla\phi}{\phi} \right\|_{L^2}$$

se verifica para cualesquiera  $\psi, \phi \in H_\delta^2(\Omega)$ . El primer término del segundo miembro se puede acotar razonando como en (4.11)

$$\begin{aligned} \left\| \frac{\nabla \otimes \nabla\psi}{\psi} - \frac{\nabla \otimes \nabla\phi}{\phi} \right\|_{L^2} &\leq \frac{1}{\delta^2} \|\phi \nabla \otimes \nabla\psi - \psi \nabla \otimes \nabla\phi\|_{L^2} \\ &\leq \frac{1}{\delta^2} \left( \|\phi\|_{L^\infty} \|\psi - \phi\|_{H^2} + \|\phi\|_{H^2} \|\psi - \phi\|_{L^\infty} \right) \\ &\leq \frac{C}{\delta^2} \|\phi\|_{H^2} \|\psi - \phi\|_{H^2}, \end{aligned} \quad (4.12)$$

mientras que el segundo está mayorado por

$$\begin{aligned} \left\| \frac{\nabla\psi}{\psi} \otimes \frac{\nabla\psi}{\psi} - \frac{\nabla\phi}{\phi} \otimes \frac{\nabla\phi}{\phi} \right\|_{L^2} &\leq \frac{1}{\delta^4} \|\phi^2 \nabla\psi \otimes \nabla\psi - \psi^2 \nabla\phi \otimes \nabla\phi\|_{L^2} \\ &\leq \frac{C}{\delta^4} \left\{ \|\phi\|_{L^\infty}^2 (\|\nabla\phi\|_{L^4} + \|\nabla\psi\|_{L^4}) \|\nabla\psi - \nabla\phi\|_{L^4} \right. \\ &\quad \left. + \|\nabla\phi\|_{L^4}^2 \|\psi + \phi\|_{L^\infty} \|\psi - \phi\|_{L^\infty} \right\} \\ &\leq \frac{C}{\delta^4} \|\phi\|_{H^2}^2 (\|\phi\|_{H^2} + \|\psi\|_{H^2}) \|\psi - \phi\|_{H^2}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Como consecuencia, tenemos que  $H_\delta^2(\Omega) \ni \psi \mapsto \nabla\psi/\psi \in H^1(\Omega)$  es localmente lipschitziana. Finalmente, tomando partes reales e imaginarias en (4.8) observamos que tanto  $\psi \mapsto \nabla n/n$  como  $\psi \mapsto J/n$  verifican la condición de Lipschitz localmente respecto de las normas  $H_\delta^2(\Omega)$  (para  $\psi$ ) y  $H^1(\Omega)$  (para los cocientes). Esto concluye la prueba de la primera afirmación del lema.

Para demostrar (ii) usamos que

$$\nabla\psi = \left( \frac{\nabla n}{2n} + i \frac{m J}{\alpha n} \right) \psi \in H^1(\Omega), \quad (4.14)$$

la cual es una consecuencia directa de la fórmula (4.8). Tomando divergencias y simplificando de forma adecuada obtenemos fácilmente la escritura de  $\Delta\psi$  enunciada en (ii).  $\square$

Una vez hemos establecido la regularidad de los observables, estamos en condiciones de resolver la ecuación (4.4) para así obtener un argumento de la función de onda  $\psi$  con la misma regularidad que la propia  $\psi$ . Para ello utilizaremos las ideas desarrolladas en [3] para la existencia y en [4] para la regularidad y dependencia continua (Teoremas 1.2.9 y 1.2.10 en el Capítulo 1, respectivamente).

**Teorema 4.2.2**

Sean  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  un dominio acotado, simplemente conexo y con frontera lipschitziana y  $k \geq 0$  un entero. Entonces se verifican las siguientes afirmaciones:

- (i) Para toda función compleja  $\psi \in H^k(\Omega)$  tal que  $\frac{J}{n} \in H^{k-1}(\Omega)$  (donde  $n$  y  $J$  están definidas en (4.5)), existe  $S \in H^k(\Omega)$  solución de (4.4) y única salvo constante aditiva. Además, dado  $\mu \in \mathbb{R}$  existe una única  $S_\mu \in H^k(\Omega)$  solución de (4.4) tal que  $\int_\Omega S_\mu(x) dx = \mu$ , y un único número real  $\beta_\mu \in [0, 2\pi\alpha)$  tal que la familia

$$S^l := S_\mu + \beta_\mu + 2\pi l\alpha, \quad l \in \mathbb{Z}, \quad (4.15)$$

verifica (4.6)–(4.7).

- (ii) Bajo las hipótesis de (i), existe  $C = C(\Omega, k) > 0$  tal que

$$\|S_\psi - S_\phi\|_{H^k} \leq C \left\| \frac{J_\psi}{n_\psi} - \frac{J_\phi}{n_\phi} \right\|_{H^{k-1}}$$

para cualesquiera  $S_\psi, S_\phi$  soluciones de (4.4) (asociadas a  $\psi$  y  $\phi$ , respectivamente) y tales que  $\int_\Omega S_\psi(x) dx = \int_\Omega S_\phi(x) dx$ .

**DEMOSTRACIÓN:**

Sea  $\psi \in H^k(\Omega)$  una función compleja verificando la hipótesis del apartado (i). Usando la relación

$$\nabla \otimes \left\{ \operatorname{Im} \left( \frac{\nabla \psi}{\psi} \right) \right\} = \operatorname{Im} \left( \frac{(\nabla \otimes \nabla) \psi}{\psi} - \frac{\nabla \psi}{\psi} \otimes \frac{\nabla \psi}{\psi} \right),$$

se deduce que  $\operatorname{rot}(\operatorname{Im}(\nabla \psi / \psi)) = 0$ , luego  $J/n$  es un campo irrotacional (en virtud de (4.8)). Aplicando entonces el Teorema 1.2.9 ((iv)  $\Rightarrow$  (iii)) deducimos la existencia de  $S \in \mathcal{D}'(\Omega)$ , única salvo constante aditiva, tal que  $\nabla S = m(J/n)$ , luego  $S$  es una solución distribucional de (4.4). Usando ahora la hipótesis tenemos que  $J/n \in H^{k-1}(\Omega)$ , luego aplicando el Teorema 1.2.10 (i), encontramos que  $S \in H^k(\Omega)$ . Además, para  $\mu \in \mathbb{R}$  dado y  $S \in H^k(\Omega)$  una solución de (4.4) se tiene que  $S_\mu$ , definida por

$$S_\mu(x) := S(x) + \frac{1}{|\Omega|} \left( \mu - \int_\Omega S(x) dx \right) \quad \text{c.t. } x \in \Omega,$$

es la única solución de (4.4) que satisface  $\int_\Omega S_\mu(x) dx = \mu$ . Finalmente, si definimos

$$\psi^S(x) := |\psi(x)| \exp \left\{ \frac{i}{\alpha} S_\mu(x) \right\} \quad \text{c.t. } x \in \Omega,$$

es claro que  $\psi^S \in H^k(\Omega)$ , ya que

$$\nabla \psi^S = \left\{ \operatorname{Re} \left( \frac{\nabla \psi}{\psi} \right) + i \operatorname{Im} \left( \frac{\nabla \psi}{\psi} \right) \right\} \psi^S.$$

Además esta relación implica  $\psi \nabla \psi^S = \psi^S \nabla \psi$  y como consecuencia  $\nabla(\psi/\psi^S) = 0$ , luego existe un factor unitario  $z \in \mathbb{C}$  tal que  $\psi/\psi^S \equiv z$ . Por tanto, existe  $\beta \in \mathbb{R}$  tal que  $\psi = e^{i\beta/\alpha} \psi^S$ . En particular,

$$\psi(x) = |\psi(x)| \exp \left\{ \frac{i}{\alpha} (S_\mu(x) + \beta) \right\} \quad \text{c.t. } x \in \Omega. \quad (4.16)$$

Por supuesto dicho  $\beta$  no es único, pero es claro que  $\beta_1, \beta_2 \in \mathbb{R}$  verifican (4.16) si y solo si  $\beta_1 - \beta_2 = 2\pi\alpha l$  para cierto  $l \in \mathbb{Z}$ . Entonces es suficiente tomar  $\beta_\mu$  como el único valor en el intervalo  $[0, 2\pi\alpha)$  que cumple (4.16), lo que concluye la prueba del apartado (i).

Para demostrar la segunda afirmación usamos el Teorema 1.2.10 (ii), que nos proporciona una constante positiva  $C = C(\Omega, k) > 0$  tal que

$$\|S\|_{H^k} \leq C \|\nabla S\|_{H^{k-1}}$$

para toda  $S \in H^k(\Omega)$  con valor medio nulo en  $\Omega$ . Además, si  $S_\psi, S_\phi$  son dos soluciones de (4.4) asociadas a las funciones  $\psi$  y  $\phi$  respectivamente, entonces es claro que  $S_\psi - S_\phi \in H^k(\Omega)$  y que

$$\int_{\Omega} (S_\psi(x) - S_\phi(x)) dx = 0.$$

Finalmente, podemos aplicar el Teorema 1.2.10 (ii) a dicha diferencia y obtener

$$\|S_\psi - S_\phi\|_{H^k} \leq C \|\nabla(S_\psi - S_\phi)\|_{H^{k-1}}.$$

Esto culmina la demostración.  $\square$

**OBSERVACIÓN 4.2.3** Hemos enunciado el Teorema 4.2.2 en términos de los observables  $n$  y  $J$ , si bien usando la segunda igualdad en (4.4) se puede reemplazar la hipótesis del apartado (i) por  $\frac{\nabla \psi}{\psi} \in H^{k-1}(\Omega)$  y la desigualdad del apartado (ii) por

$$\|S_\psi - S_\phi\|_{H^k} \leq C \left\| \operatorname{Im} \left( \frac{\nabla \psi}{\psi} \right) - \operatorname{Im} \left( \frac{\nabla \phi}{\phi} \right) \right\|_{H^{k-1}},$$

obteniendo así una reescritura dependiente tan solo de la función de onda. En este contexto el Lema 4.2.1 implica que la aplicación  $\psi \mapsto S_\psi$  es localmente lipschitziana siempre que se mantenga fijo el valor de la integral de  $S_\psi$  en  $\Omega$ . Por otra parte, es claro que en el conjunto  $H^2_S(\Omega)$  se verifican las hipótesis de este teorema, por lo que en particular cualquier función de onda en dicho espacio posee un argumento con regularidad  $H^2$ .

**OBSERVACIÓN 4.2.4** El Teorema 4.2.2 se puede generalizar a dimensión  $d$  arbitraria, sin más que concretar el sentido que se le debe dar a la igualdad  $\operatorname{rot}(f) = 0$  para un campo vectorial  $f$  en el caso  $d \neq 3$ . En dimensión  $d = 1$  esta hipótesis es

innecesaria gracias al Teorema Fundamental del Cálculo y en cualquier otro caso (incluido el tridimensional) la condición

$$\partial_{x_j} f_k = \partial_{x_k} f_j, \quad \forall j \neq k$$

implica la existencia de un potencial escalar para  $f = (f_1, \dots, f_d)$  en dominios simplemente conexos. Obsérvese, además, que el campo vectorial  $\nabla\psi/\psi$  verifica esta condición independientemente de la dimensión.

En mecánica cuántica se considera que  $\psi \in L^2(\Omega)$  y  $e^{i\nu}\psi$  representan el mismo estado para cualquier  $\nu \in \mathbb{R}$ , por lo que el Teorema 4.2.2 implica que los observables  $n$  y  $J$  asociados a una función de onda determinan de forma unívoca el estado cuántico, hecho que ponemos de manifiesto en el último resultado de esta sección.

#### Corolario 4.2.5

Sea  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  un dominio acotado, simplemente conexo y con frontera lipschitziana y supongamos que existen  $\psi, \phi \in H_\delta^2(\Omega)$  tales que  $n_\psi = n_\phi$  y  $J_\psi = J_\phi$  en  $\Omega$ . Entonces existe  $\nu \in \mathbb{R}$  tal que  $\psi = e^{i\nu}\phi$ . Como consecuencia, las densidades local y de corriente determinan un estado cuántico de forma unívoca.

DEMOSTRACIÓN:

Aplicando el apartado (i) del Teorema 4.2.2 con  $\mu = 0$  a ambas funciones, obtenemos  $S_0(\psi), S_0(\phi) \in H^2(\Omega)$  tales que

$$\frac{\psi}{\phi} = \exp \left\{ \frac{i}{\alpha} \left( S_0(\psi) - S_0(\phi) + \beta_\mu(\psi) - \beta_\mu(\phi) \right) \right\}, \quad (4.17)$$

donde hemos aprovechado que las densidades locales son idénticas. Si derivamos el argumento de la exponencial obtenemos

$$\nabla S_0(\psi) - \nabla S_0(\phi) = \frac{J_\psi}{n_\psi} - \frac{J_\phi}{n_\phi} = 0.$$

Por tanto, definiendo  $\nu := S_0(\psi) - S_0(\phi) + \beta_\mu(\psi) - \beta_\mu(\phi) \in \mathbb{R}$  y usando (4.17) obtenemos  $\psi = e^{i\nu}\phi$ , lo que concluye la prueba.  $\square$

### 4.3. Argumento de la solución de una ecuación de Schrödinger

El problema de calcular el argumento de una función de onda  $\psi$ , dependiente del tiempo, que en principio parece previo a la equivalencia rigurosa entre las formulaciones de Schrödinger e hidrodinámica de la mecánica cuántica, resulta *a posteriori* equivalente, lo que obliga a imponer una ley de evolución temporal sobre  $\psi$  para resolver ambos. Dedicaremos esta sección a ello suponiendo que la función de onda resuelve una ecuación de Schrödinger de carácter general. El primer paso en esta dirección es establecer, basándonos en dicha ecuación, la evolución temporal de los observables únicamente en términos de  $\psi$ . Trabajaremos en los espacios  $X^T$  y  $X_\delta^T$  definidos en el Capítulo 1.

**Lema 4.3.1**

Sean  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  un dominio acotado,  $\delta > 0$ ,  $T > 0$ , y sea  $\psi \in X_\delta^T$  una solución de la siguiente ecuación de Schrödinger

$$i\partial_t\psi = -\frac{\alpha}{2m}\Delta\psi + \Theta[n, J]\psi, \quad (4.18)$$

donde  $\Theta : H_{\delta^2}^2(\Omega) \times H^1(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$  es un operador (no lineal) complejo y continuo. Entonces

$$n \in X_{\delta^2}^T, \quad \frac{\nabla n}{n}, J, \frac{J}{n} \in C([0, T], H^1(\Omega)) \cap C^1([0, T], H^{-1}(\Omega)),$$

y las siguientes identidades

$$(i) \quad \partial_t n + \operatorname{div}(J) = 2\operatorname{Im}(\Theta[n, J])n,$$

$$(ii) \quad \partial_t J = \frac{\alpha^2}{2m^2} \operatorname{Re} \left( \psi^2 \nabla \left( \frac{\Delta \bar{\psi}}{\psi} \right) \right) - \frac{\alpha}{m} \operatorname{Re} \left( \psi^2 \nabla \left( \frac{\overline{\Theta[n, J]\psi}}{\psi} \right) \right),$$

$$(iii) \quad \partial_t \left( \frac{J}{n} \right) = -\nabla \left( \frac{\alpha^2}{\hbar^2 m} Q + \frac{|J|^2}{2n} + \frac{\alpha}{m} \operatorname{Re} \Theta[n, J] \right),$$

son satisfechas en el sentido de los espacios funcionales correspondientes.

**DEMOSTRACIÓN:**

La regularidad de las funciones  $n, J, \nabla n/n$  y  $J/n$  se deducen del Lema 4.2.1 y del hecho de que  $t \mapsto \psi(t)$  es una aplicación continua en  $H^2(\Omega)$ . (i) se obtiene tras multiplicar la ecuación de Schrödinger por  $-2i\bar{\psi}$  y tomar partes reales. Como  $t \mapsto \Theta[n, J](t)n(t)$  y  $t \mapsto \operatorname{div}(J(t))$  son continuas de  $[0, T]$  en  $L^2(\Omega)$ , se tiene que  $n \in C^1([0, T], L^2(\Omega))$ .

Probamos a continuación el apartado (ii). Es una tarea simple comprobar que  $\partial_t J = \frac{\alpha}{m} \operatorname{Im}(\partial_t \bar{\psi} \nabla \psi + \bar{\psi} \partial_t \nabla \psi)$  en el sentido de las distribuciones. Usando (4.18) podemos reescribir esta identidad de la siguiente manera:

$$\partial_t J = \frac{\alpha^2}{2m^2} \operatorname{Re} \left( \bar{\psi} \nabla \Delta \psi - \nabla \psi \Delta \bar{\psi} \right) + \frac{\alpha}{m} \operatorname{Re} \left( \nabla \psi \overline{\Theta[n, J]\psi} - \bar{\psi} \nabla (\Theta[n, J]\psi) \right),$$

que se puede simplificar fácilmente para adoptar la forma establecida en (ii). Nótese que la regularidad de  $\psi$  y  $\Theta[n, J]$  permite dar a dicha igualdad (y por tanto a  $\partial_t J$ ) sentido en  $H^{-1}(\Omega)$ . De acuerdo con las leyes de evolución conocidas para  $n$  y  $J$ , tenemos

$$\begin{aligned} \partial_t \left( \frac{J}{n} \right) &= \frac{\alpha}{m} \left\{ \frac{\alpha}{2m} \operatorname{Re} \left( \frac{\psi}{\psi} \nabla \left( \frac{\Delta \bar{\psi}}{\psi} \right) \right) - \operatorname{Re} \left( \frac{\psi}{\psi} \nabla \left( \frac{\overline{\Theta[n, J]\psi}}{\psi} \right) \right) \right\} \\ &\quad + \frac{J}{n} \left\{ \frac{\operatorname{div}(J)}{n} - 2\operatorname{Im}(\Theta[n, J]) \right\}. \end{aligned}$$

Calculando  $\frac{\psi}{\bar{\psi}} \nabla \left( \frac{\Delta \bar{\psi}}{\bar{\psi}} \right)$  mediante el Lema 4.2.1 (ii) y desarrollando  $\frac{\psi}{\bar{\psi}} \nabla \left( \frac{\Theta[n, J] \bar{\psi}}{\bar{\psi}} \right)$  se deduce que

$$\begin{aligned} \frac{\psi}{\bar{\psi}} \nabla \left( \frac{\Delta \bar{\psi}}{\bar{\psi}} \right) &= \nabla \left( \frac{\Delta n}{2n} - \frac{|\nabla n|^2}{4n^2} \right) - \frac{m}{\alpha} \left\{ \frac{m}{\alpha} \nabla \left( \frac{|J|^2}{n^2} \right) + i \nabla \left( \frac{\operatorname{div}(J)}{n} \right) \right\} \\ &\quad - \frac{2i}{n^2} \operatorname{Im}(\bar{\psi} \nabla \psi) \left\{ \frac{\Delta n}{2} - \frac{|\nabla n|^2}{4n} - \frac{m^2 |J|^2}{\alpha^2 n} - \frac{mi}{\alpha} \operatorname{div}(J) \right\}, \\ \frac{\psi}{\bar{\psi}} \nabla \left( \frac{\Theta[n, J] \bar{\psi}}{\bar{\psi}} \right) &= \nabla(\Theta[n, J]) + \Theta[n, J] \left( \frac{\nabla \bar{\psi}}{\bar{\psi}} - \frac{\nabla \psi}{\psi} \right). \end{aligned}$$

Tomando partes reales y simplificando de forma adecuada obtenemos que  $J/n$  satisface (iii). Además, las propiedades de regularidad de  $\psi$  y  $\Theta[n, J]$  implican de forma sencilla que

$$\frac{J}{n}, \frac{\nabla n}{n} \in C^1([0, T], H^{-1}(\Omega)),$$

con lo que queda demostrado el teorema.  $\square$

Ya estamos en condiciones de establecer rigurosamente la descomposición de Madelung para una función de onda que satisface una ecuación de Schrödinger general. Con este objeto utilizaremos la tercera igualdad del Lema 4.3.1 para definir una función  $S$  regular respecto del tiempo que sea solución de (4.4) en todos los instantes. Esta  $S$  nos permite definir la familia de argumentos de dicha función de onda y establecer así el sistema hidrodinámico cuántico de forma rigurosa.

### Teorema 4.3.2

Sea  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  un dominio acotado, simplemente conexo y con frontera de clase  $C^1$ . Sean además  $\delta > 0$ ,  $T > 0$ , y  $\psi \in X_\delta^T$  bajo las hipótesis del Lema 4.3.1. Entonces existe una familia numerable  $\mathbf{S}(\psi) = \{S^l\}_{l \in \mathbb{Z}} \subset X^T$  tal que, para cualquier  $S \in \mathbf{S}(\psi)$ , se verifican las siguientes afirmaciones:

(i)  $\nabla S(t) = m \frac{J}{n}(t)$  para cualquier  $t \in [0, T]$  y

$$\psi(0, x) = \sqrt{n(0, x)} \exp \left\{ \frac{i}{\alpha} S(0, x) \right\} \quad \text{c.t. } x \in \Omega. \quad (4.19)$$

(ii)  $S$  satisface la siguiente ley de evolución

$$\partial_t S = -\frac{\alpha^2}{\hbar^2} Q - \frac{m}{2} \frac{|J|^2}{n^2} - \alpha \operatorname{Re}(\Theta[n, J]) \quad (4.20)$$

en el sentido de  $X^T$ .

Como consecuencia, para todo  $S \in \mathbf{S}(\psi)$  se verifica la descomposición de Madelung

$$\psi(t, x) = \sqrt{n(t, x)} \exp \left\{ \frac{i}{\alpha} S(t, x) \right\} \quad \forall t \in [0, T], \quad \text{c.t. } x \in \Omega. \quad (4.21)$$

Además  $\mathbf{S}(\psi)$  es única, en el sentido de que si  $S \in X^T$  cumple (4.21), entonces  $S \in \mathbf{S}(\psi)$ .

DEMOSTRACIÓN:

Consideramos  $K : H_{\delta^2}^2(\Omega) \times H^1(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$  definido por

$$K[n, J] := \frac{\alpha^2}{\hbar^2} Q + \frac{m}{2} \frac{|J|^2}{n^2} + \alpha \operatorname{Re}(\Theta[n, J]).$$

Como  $|\psi|$  está separado de cero podemos usar el Lema 4.2.1 para deducir que la aplicación  $t \mapsto K[n_\psi, J_\psi](t)$  es continua de  $[0, T]$  en  $L^2(\Omega)$ . Por otra parte  $\psi(0) \in H_{\delta}^2(\Omega)$ , luego tomando  $\mu = 0$  en el apartado (i) del Teorema 4.2.2, tenemos  $S_{\psi(0)} \in H^2(\Omega)$  y  $\beta_0 \in [0, 2\pi\alpha)$  tales que

$$\psi(0, x) = \sqrt{n(0, x)} \exp \left\{ \frac{i}{\alpha} S_I(x) \right\} \quad \text{c.t. } x \in \Omega, \quad (4.22)$$

donde hemos denotado  $S_I = S_{\psi(0)} + \beta_0$ . A continuación podemos definir, para cada  $l \in \mathbb{Z}$ ,

$$S^l(t, x) := S_I(x) - \int_0^t K[n, J](s, x) ds + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \int_0^t K[n, J](s, y) ds dy + 2\pi\alpha l \quad (4.23)$$

para todo  $t \in [0, T]$  y  $\mathbf{S}(\psi) := \{S^l\}_{l \in \mathbb{Z}}$ . Veamos que esta familia satisface la tesis del teorema. Para ello tomamos  $S \in \mathbf{S}(\psi)$  arbitrario. Las igualdades (4.23) (evaluada en  $t = 0$ ) y (4.22) implican (4.19). Además, la continuidad de  $t \mapsto K[n_\psi, J_\psi](t)$  en  $L^2(\Omega)$  nos permite establecer que  $S \in C^1((0, T), L^2(\Omega))$ , por lo que combinando (4.23) con (4.22) se deduce que  $\nabla S(0) = m \frac{J(0)}{n(0)}$ . Para ver que se cumple (4.4) en todos los tiempos, fijamos primero  $t \in [0, T]$ . Si  $t > 0$ , podemos derivar  $S$  para obtener

$$\nabla S(t) = \nabla S_I(t) - \nabla \left( \int_0^t K[n, J](s, x) ds \right).$$

Intercambiando el orden de las derivadas y aplicando el Lema 4.3.1 (iii) llegamos a

$$\nabla S(t) = \nabla S_I(t) - m \int_0^t \partial_t \left( \frac{J}{n} \right) (s) ds,$$

luego  $\nabla S(t) = m(J/n)(t)$  luego  $\nabla S \in C([0, T], H^1(\Omega))$  en virtud del Lema 4.3.1. De aquí se desprende que  $S \in C((0, T], H^2(\Omega))$ . Como  $\int_{\Omega} S(x) dx = \int_{\Omega} S_I(x) dx$  para todo  $t \in [0, T]$ , el Teorema 4.2.2 (ii) garantiza que  $S \in C([0, T], H^2(\Omega))$  y satisface (4.4) para cualquier  $t \in [0, T]$ . Un ejercicio sencillo haciendo uso de  $\partial_t S \in C((0, T], L^2(\Omega))$  y la continuidad de  $S$  en  $t = 0$  permite deducir que  $S \in X^T$ . Además es fácil ver, usando la definición y regularidad de  $K$ , que  $S$  satisface (4.20) en el sentido de dicho espacio. Como consecuencia,  $\mathbf{S}(\psi) \subset X^T$  y cualquier  $S$  de dicha familia verifica las propiedades (i) y (ii).

Para probar que  $S$  también satisface la ecuación (4.21) definimos

$$\psi^S(t, x) = \sqrt{n(t, x)} \exp \left\{ \frac{i}{\alpha} S(t, x) \right\} \quad \forall t \in [0, T], \text{ c.t. } x \in \Omega.$$

Claramente  $\psi \in X_\delta^T$  usando la regularidad de  $S$ , luego el cálculo de  $\nabla(\psi/\psi^S)$  nos lleva a la relación  $\psi(t, x) = z(t)\psi^S(t, x)$  para cierta  $z \in C^1([0, T], L^2(\Omega))$ , que a su vez verifica

$$z' = \frac{1}{(\psi^S)^2}(\psi^S \partial_t \psi - \psi \partial_t \psi^S). \quad (4.24)$$

Para comprobar que dicha cantidad se anula idénticamente usamos la ecuación de Schrödinger (4.18), que implica  $\partial_t \psi = \frac{i\alpha}{2m} \Delta \psi - i\Theta[n, J]\psi$ . En virtud del Lema 4.2.1 (ii) podemos escribir esta igualdad de la siguiente forma:

$$\partial_t \psi = \left( -\frac{i\alpha}{\hbar^2} Q - \frac{mi}{2\alpha} \frac{|J|^2}{n^2} - \frac{\operatorname{div}(J)}{2n} - i\Theta[n, J] \right) \psi.$$

Por otra parte,  $\partial_t \psi^S = \left( \frac{1}{2n} \partial_t n + \frac{i}{\alpha} \partial_t S_\psi \right) \psi^S$ , y aplicando los Lemas 4.2.1 (i) y 4.3.1 (iii) se tiene que

$$\begin{aligned} \partial_t \psi^S &= \left\{ -\frac{\operatorname{div}(J)}{2n} + \operatorname{Im}(\Theta[n, J]) + \frac{i}{\alpha} \left( -\frac{\alpha^2}{\hbar^2} Q - \frac{m}{2} \frac{|J|^2}{n^2} - \alpha \operatorname{Re}(\Theta[n, J]) \right) \right\} \psi^S \\ &= \left\{ -\frac{i\alpha}{\hbar^2} Q - \frac{mi}{2\alpha} \frac{|J|^2}{n^2} - \frac{\operatorname{div}(J)}{2n} - i\Theta[n, J] \right\} \psi^S, \end{aligned}$$

que implica  $z' = 0$ , como queríamos comprobar. Por tanto  $z \equiv z_0 \in \mathbb{C}$ , lo que nos permite escribir

$$\psi(t, x) = z_0 \sqrt{n(t, x)} \exp \left\{ \frac{i}{\alpha} S(t, x) \right\} \quad \forall t \in [0, T], \text{ c.t. } x \in \Omega.$$

En particular, tomando  $t = 0$  y usando (4.22) tenemos que  $z_0 = 1$ , lo que implica que  $S \in \mathbf{S}(\psi)$  arbitrario satisface la descomposición de Madelung (4.21).

Para concluir la demostración, supongamos que  $S \in X^T$  verifica (4.21). En particular es solución de (4.4), luego  $\nabla S = \nabla S^l$  para cualquier  $l \in \mathbb{Z}$ . Si fijamos  $l \in \mathbb{Z}$  podemos escribir  $S(t, x) = S^l(t, x) + \nu_l(t)$  para cierta  $\nu_l \in C^1([0, T])$ . Derivando ahora respecto del tiempo y observando que tanto  $S$  como  $S^l$  son soluciones de (ii) se deduce que  $S(t, x) = S^l(t, x) + \nu_l^0$  con  $\nu_l^0 \in \mathbb{R}$ . De hecho, usando (4.19) tenemos que  $\nu_l^0 \in 2\pi\alpha \mathbb{Z}$ , de manera que  $S - S^l \in 2\pi\alpha \mathbb{Z}$ . La arbitrariedad de  $l \in \mathbb{Z}$  y la definición de  $\mathbf{S}(\psi)$  nos permite concluir que  $S$  pertenece a dicha familia. Esto completa la prueba.  $\square$

**OBSERVACIÓN 4.3.3** *Nótese que la condición de normalización global*

$$\int_{\Omega} S(x) dx = \mu, \quad \mu \in \mathbb{R}$$

*es la que nos permite concretar la definición de la familia de argumentos  $\mathbf{S}(\psi)$ , lo que a posteriori implica que el valor de la integral de  $S$  se conserva a lo largo de la evolución temporal gobernada por la ecuación de Schrödinger general (4.18).*

El Teorema 4.3.2 nos permite establecer soluciones del sistema hidrodinámico cuántico asociado a (4.18) de forma directa, lo que culmina la conexión entre las formulaciones de onda e hidrodinámica bajo nuestras hipótesis.

**Corolario 4.3.4**

Sea  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  un dominio acotado, simplemente conexo y con frontera de clase  $C^1$ . Sean además  $\delta > 0$ ,  $T > 0$ , y  $\psi \in X_\delta^T$  bajo las hipótesis del Lema 4.3.1. Entonces el sistema hidrodinámico asociado a (4.18)

$$\begin{aligned} \partial_t n + \frac{1}{m} \operatorname{div}(n \nabla S) &= 2\operatorname{Im}(\Theta[n, J]), \\ \partial_t S + \frac{1}{2m} |\nabla S|^2 &= -\frac{\alpha^2}{\hbar^2} Q - \alpha \operatorname{Re}(\Theta[n, J]), \end{aligned}$$

admite solución  $(n, S)$  en  $[0, T]$ , donde  $n \in X_{\delta^2}^T$  y  $S \in X^T$ .

DEMOSTRACIÓN:

Consideramos  $n = |\psi|^2$  y  $S \in \mathbf{S}(\psi) \subset X^T$  arbitraria, donde  $\mathbf{S}(\psi)$  es la familia de argumentos obtenida en el teorema anterior. Teniendo en cuenta (4.4) en el apartado (i) del Lema (4.3.1) obtenemos la ecuación de continuidad (y la regularidad de  $n$ ), mientras que la ley de evolución para  $S$  se obtiene usando nuevamente (4.4) esta vez en (4.20). Por tanto el par  $(n, S)$  es una solución del sistema hidrodinámico cuántico.  $\square$

**OBSERVACIÓN 4.3.5** *La dependencia de  $\Theta$  respecto de  $n$  y  $J$  en las hipótesis de los resultados de esta sección (ecuación (4.18)) debe entenderse en sentido amplio, ya que dichos resultados siguen siendo válidos admitiendo dependencia de las derivadas de los observables o interacciones de tipo Hartree, por ejemplo. La propiedad que permite definir  $S$  explícitamente es que  $\Theta$  sea invariante ante cambios de fase constantes y globales. Podríamos, por tanto, sustituir la condición*

$$\Theta : H_{\delta^2}^2(\Omega) \times H^1(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$$

por esta otra, que de entrada es más general:

$$\Theta : H_\delta^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega), \quad \Theta(\psi) = \Theta(e^{i\nu} \psi) \quad \forall \nu \in \mathbb{R},$$

pero que resulta equivalente (véase el Corolario 4.2.5). Obsérvese que esta propiedad no es satisfecha, por ejemplo, en la ecuación de Kostin (4.2), lo que supone una carencia seria de dicho modelo. En el Capítulo 6 damos una reinterpretación de (4.2) que describe la misma física y evita esta propiedad indeseable.



# Buen planteamiento de una ecuación de Schrödinger disipativa con difusión en dominios acotados

---

En este capítulo demostramos el buen planteamiento matemático del problema de tipo mixto asociado a un modelo cuántico disipativo en la formulación de onda que representa, al igual que SLD, la hidrodinámica asociada a la ecuación de Wigner–Fokker–Planck. Dicho modelo, al que denominaremos en adelante SLC, consiste en una ecuación de Schrödinger no lineal de tipo logarítmico con términos difusivos similares a los SLD pero técnicamente más tratable, toda vez que su estudio se puede reducir al de la ecuación de Schrödinger puramente logarítmica mediante una transformación Gauge no lineal. Esta reducción se puede materializar de forma rigurosa a nivel hidrodinámico aplicando los resultados del Capítulo 4 y bajo las hipótesis que allí quedaron establecidas. Así, dedicaremos la primera sección a plantear el problema con precisión y establecer las hipótesis que necesitaremos para su tratamiento. El propósito de la segunda sección es derivar el modelo a partir de WFP. Más adelante definimos la transformación que reduce el problema al análisis de la ecuación logarítmica y precisamos la equivalencia entre esta y SLC. Dedicaremos la cuarta sección a estudiar la ecuación logarítmica en el contexto establecido previamente, lo que nos permitirá, por último, probar la existencia y unicidad local de solución para nuestro problema en dominios acotados y en el caso de dimensiones menores o iguales que 3, lo cual constituye el resultado principal de este capítulo.

## 5.1. Planteamiento e hipótesis del problema

Consideramos la siguiente ecuación de Schrödinger no lineal, de tipo logarítmico y con efectos de difusión (que denominaremos SLC) que gobierna la evolución

temporal de un sistema cuántico sometido a la acción de un potencial externo  $V$  e interactuando con un baño térmico de osciladores en equilibrio térmico:

$$i\alpha\partial_t\psi = -\frac{\alpha^2}{2m}\Delta\psi + \frac{\alpha^2}{\hbar^2}Q\psi + \Lambda\log(n)\psi + \frac{\alpha}{2m}\left(\frac{i\alpha}{2}\frac{\Delta n}{n} + m\operatorname{div}\left(\frac{J}{n}\right)\right)\psi. \quad (5.1)$$

Aquí  $\psi = \psi(t, x)$  es la función de onda que describe el estado del sistema,  $m$  es la masa efectiva del mismo y

$$\alpha = 2mD_{qq}, \quad \Lambda = 2D_{pq} + \eta D_{qq},$$

son números reales positivos que dependen de las constantes de interacción con el baño. Este modelo surge bajo una interpretación estocástica del sistema de momentos asociado a la ecuación de WFP [62, 80], a raíz de las ideas que se emplean para derivar la mecánica cuántica a partir de la newtoniana [92] y de manera que, bajo ciertas hipótesis, las densidades local  $n$  y de corriente  $J$  asociadas a la función de Wigner del sistema (definidas en la fórmula (5.12) más adelante) coinciden respectivamente con los observables asociados a  $\psi$  con la misma interpretación

$$n = |\psi|^2, \quad J = \frac{\alpha}{m}\operatorname{Im}(\bar{\psi}\nabla\psi). \quad (5.2)$$

Las constantes que determinan el modelo SLC dependen, por tanto, de aquellas que aparecen originalmente en la ecuación de Wigner–Fokker–Planck. Puede consultarse en el Capítulo 2 la definición de ambas (véase 2.2) y su interpretación física.

Es destacable la presencia del potencial cuántico de Bohm

$$Q(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\Delta\sqrt{n}}{\sqrt{n}}\right) \quad (5.3)$$

en la ecuación SLC, que da lugar a un término no lineal de tipo modular  $\kappa Q\psi$  en la formulación de Schrödinger [12, 49]. La aparición de esta no linealidad se puede interpretar para  $0 < \kappa < 1$  como un efecto de relajación de los efectos cuánticos, dando lugar al caso “totalmente cuántico” si  $\kappa = 0$  y a dinámica clásica si  $\kappa = 1$ . En nuestro caso  $\kappa = \alpha^2/\hbar^2$ , lo que implica que la difusión en posición en la ecuación de Wigner–Fokker–Planck (cf. (2.6)–(2.7)) confiere comportamiento clásico al sistema que describe. Sin embargo, las hipótesis de acoplamiento débil y temperaturas moderadas o altas que hacen aplicable la ecuación de WFP conducen a que  $\alpha \ll \hbar$  (véase el Capítulo 2), lo que conduce a pensar que los efectos de comportamiento clásico sean poco relevantes. Por otra parte, la presencia del término logarítmico en SLC está relacionada con la difusión cruzada en la formulación de Wigner y se puede interpretar como un efecto dispersivo relacionado con la interacción del sistema con el baño [14, 62, 80, 92]. Es destacable, además, el hecho de que SLC contiene un potencial no lineal complejo de tipo Ginzburg–Landau que describe difusión en posición.

Estamos interesados en el problema de tipo mixto asociado a SLC en un dominio acotado  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  ( $1 \leq d \leq 3$ ) con frontera suave (precisaremos más adelante la

regularidad necesaria) y condiciones iniciales y de contorno dadas por

$$\psi(0) = \psi_I, \quad \psi(t)|_{\partial\Omega} = \psi_B. \quad (5.4)$$

Para demostrar las propiedades de existencia y unicidad local de solución de este problema vamos a sacar partido de que SLC puede interpretarse (salvo por el término logarítmico) como un elemento de la familia de Doebner–Goldin [43], que es la clase más general de ecuaciones de Schrödinger no lineales que admiten una ecuación de continuidad de Fokker–Planck para la densidad local:

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\psi &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + \frac{i\hbar D}{2}\left(\frac{\Delta n}{n}\right)\psi + V\psi + mD'\mu_1\left(\frac{\operatorname{div}(J)}{n}\right)\psi \\ &+ \frac{m^2}{\hbar}D'\mu_3\left(\frac{|J|}{n}\right)^2\psi + mD'\mu_4\left(\frac{J\cdot\nabla n}{n^2}\right)\psi + \hbar D'\left(\mu_2\frac{\Delta n}{n} + \mu_5\frac{|\nabla n|^2}{n^2}\right)\psi, \end{aligned}$$

Para ello es suficiente considerar  $\alpha$  en lugar de  $\hbar$  como unidad de acción y tomar

$$D = D_{qq}, \quad \mu_3 = 0, \quad D'\mu_1 = D_{qq} = -D'\mu_4, \quad D'\mu_2 = -\frac{D_{qq}}{2} = -2D'\mu_5. \quad (5.5)$$

Se puede demostrar (véanse [44, 54]) que bajo la condición

$$\frac{4mD'}{\hbar}\mu_2 < 1 - \frac{4m^2D^2}{\hbar^2}, \quad (5.6)$$

el conjunto de ecuaciones de la familia de Doebner–Goldin caracterizada por las relaciones

$$D'\mu_1 = D = -D'\mu_4, \quad \mu_2 + 2\mu_5 = 0, \quad \mu_3 = 0 \quad (5.7)$$

es linealizable utilizando un cambio de fase no lineal apropiado. En nuestro caso, esta última condición es exactamente (5.5) y, usando la definición de  $D_{qq}$  en (2.2), es fácil verificar (5.6), por lo que (5.1) puede reducirse a la ecuación de Schrödinger puramente logarítmica. En particular, si consideramos la forma de Madelung de la función de onda  $\psi$

$$\psi(t, x) = \sqrt{n_\psi(t, x)} \exp\left\{\frac{i}{\alpha}S_\psi(t, x)\right\}, \quad (5.8)$$

entonces el cambio de fase no lineal  $\psi \mapsto \phi = \mathcal{G}(\psi)$  definido por

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\psi)(t, x) &= \sqrt{n_\psi(t, x)} \exp\left\{-i\log\left(\sqrt{n_\psi(t, x)}\right) + \frac{1}{\alpha}S_\psi(t, x)\right\} \\ &= \psi(t, x) \exp\left\{-\frac{i}{2}\log(n_\psi(t, x))\right\} \end{aligned} \quad (5.9)$$

es una correspondencia biyectiva (de entrada formal) entre soluciones de SLC y soluciones de la siguiente ecuación de Schrödinger logarítmica

$$i\alpha\partial_t\phi = -\frac{\alpha^2}{2m}\Delta\phi + \Lambda\log(n)\phi. \quad (5.10)$$

La transformación  $\mathcal{G}$  definida en (5.9) pertenece a una clase general de aplicaciones denominadas *transformaciones Gauge*, que preservan algunos aspectos fundamentales de la mecánica cuántica como la densidad local  $n$ . Nuestro objetivo es reducir (vía  $\mathcal{G}$ ) el buen planteamiento del problema (5.1), (5.4) al estudio de (5.10) con las siguientes condiciones iniciales y de contorno

$$\phi(0) = \phi_I, \quad \phi(t)|_{\partial\Omega} = \phi_B, \quad (5.11)$$

que también estarán relacionadas con  $\psi_I$  y  $\psi_B$  mediante  $\mathcal{G}$ . Estrategias similares han sido desarrolladas recientemente [30, 94] en relación al estudio de ecuaciones de Schrödinger con derivadas.

Como hemos comentado anteriormente, la aplicación  $\mathcal{G}$  no es más que un cambio de fase. Por tanto, si para cierta función de onda  $\psi$  existe  $S_\psi$  verificando (5.8), entonces  $S_\psi - \alpha \log(\sqrt{n_\psi})$  es un argumento de  $\phi = \mathcal{G}(\psi)$ . Esto implica que la relación entre  $\psi$  y  $\phi$  a nivel hidrodinámico es sencilla. En consecuencia, si trabajamos bajo las hipótesis establecidas en el Capítulo 4 podremos operar de manera fácil con la transformación utilizando los sistemas hidrodinámicos de forma rigurosa. Esto nos conduce a considerar las siguientes hipótesis, que mantendremos a lo largo de todo nuestro análisis:

- (H1)  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  es simplemente conexo, acotado y con frontera de clase  $C^2$ .
- (H2)  $\psi_I \in H^2(\Omega)$ ,  $\psi_B \in H^{3/2}(\partial\Omega)$  y  $\psi_I|_{\partial\Omega} = \psi_B$ .
- (H3) Existe  $\delta > 0$  tal que
 
$$\inf\text{-es}\{|\psi_I(x)| : x \in \Omega\} > \delta, \quad \inf\text{-es}\{|\psi_B(x)| : x \in \partial\Omega\} > \delta.$$

Bajo estas condiciones, nuestra estrategia consiste en desarrollar un argumento de punto fijo en el conjunto  $H_\delta^2(\Omega)$  (definido en el Capítulo 1) para obtener la solución de (5.10)–(5.11) y de ahí obtener mediante  $\mathcal{G}$  (definido en (5.9)) la única solución de (5.1), (5.4).

## 5.2. Sobre la derivación del modelo

En esta sección llevamos a cabo la derivación multidimensional de SLC, que puede consultarse con detalle en [62]. El punto de partida es la ecuación de Wigner–Fokker–Planck (cf. (2.6)–(2.7)). Si razonamos como en el Capítulo 2 obtenemos que el sistema hidrodinámico asociado a los observables  $n$  y  $u = J/n$ , con

$$n(t, x) = \int_{\mathbb{R}^d} W(x, \xi, t) d\xi, \quad J(t, x) = \int_{\mathbb{R}^d} \xi W(x, \xi, t) d\xi, \quad (5.12)$$

viene dado por

$$\partial_t n + \operatorname{div}(nu) = D_{qq} \Delta n, \quad (5.13)$$

$$\begin{aligned} \partial_t u + (u \cdot \nabla) u &= -\frac{1}{m} \nabla V - \frac{1}{n} \operatorname{div} P_u - 2\lambda u - \frac{2D_{pq}}{m} \frac{\nabla n}{n} \\ &+ D_{qq} \left[ 2 \left( \frac{\nabla n}{n} \cdot \nabla \right) u + \Delta u \right], \end{aligned} \quad (5.14)$$

donde

$$P_u(t, x) = \int_{\mathbb{R}^d} \xi \otimes \xi W(x, \xi, t) d\xi - n(t, x)u(t, x) \otimes u(t, x)$$

es el tensor de esfuerzos asociado a  $W$ . La idea principal de esta derivación consiste en admitir una interpretación clásica de la ecuación de continuidad (5.13), haciendo una lectura de las difusiones cuánticas como producto de movimiento browniano a nivel microscópico [92]. Este planteamiento fue iniciado en 1.952 por I. Fényes [45] con el objetivo de describir la mecánica cuántica en términos de densidades de probabilidad clásicas. En este contexto, la evolución de una partícula sujeta a movimiento browniano se demuestra equivalente (en el sentido de las densidades local y de corriente) a la ecuación de Schrödinger [92]. En nuestro caso, los efectos de interacción con el entorno causan a nivel macroscópico una corriente de difusión observable con coeficiente  $D_{qq}$ . La idea de la derivación se basa en considerar que esa difusión es un efecto del movimiento browniano a nivel microscópico. Por tanto, el sistema queda sujeto a la acción de un campo de velocidad de avance  $u_+$  y retroceso  $u_- = u_+ - 2u_o$ . De esta manera (5.13) da lugar a dos ecuaciones de continuidad

$$\partial_t n + \operatorname{div}(nu_{\pm}) = \pm D_{qq} \Delta n, \quad (5.15)$$

donde  $u_o$  denota la velocidad osmótica (cf. (2.15)), que en cierta medida controla el grado de aleatoriedad del proceso. Si sumamos entonces las dos igualdades de (5.15) e introducimos la velocidad media de la corriente

$$v := \frac{1}{2}(u_+ + u_-) = u_+ - u_o,$$

es fácil comprobar que se recupera la ecuación de continuidad estándar de la mecánica cuántica,  $\partial_t n + \operatorname{div}(nv) = 0$ . Definiendo la derivada retrasada media de la velocidad de avance como

$$\mathcal{D}_- u_+ := \partial_t u_+ + (u_- \cdot \nabla)u_+ - D_{qq} \Delta u_+,$$

podemos reescribir (5.14) de la siguiente manera

$$\mathcal{D}_- u_+ = -\frac{1}{m} \nabla V - \frac{1}{n} \operatorname{div}(P_{u_+}) - 2\lambda u_+ - \frac{2D_{pq}}{m} \frac{\nabla n}{n}. \quad (5.16)$$

En [59] se prueba que haciendo una inversión temporal se siguen las siguientes reglas:

$$t \mapsto -t, \quad \partial_t \mapsto -\partial_t, \quad u_{\pm} \mapsto -u_{\mp}, \quad \mathcal{D}_{\pm} \mapsto -\mathcal{D}_{\mp}.$$

Utilizando dichas propiedades, la inversión respecto del tiempo de (5.16) proporciona

$$\mathcal{D}_+ u_- = -\frac{1}{m} \nabla V - \frac{1}{n} \operatorname{div}(P_{u_-}) + 2\lambda u_- - \frac{2D_{pq}}{m} \frac{\nabla n}{n}, \quad (5.17)$$

donde  $\mathcal{D}_+ u_- := \partial_t u_- + (u_+ \cdot \nabla)u_- + D_{qq} \Delta u_-$  es la derivada adelantada media de la velocidad retrasada. Sumando (5.16) y (5.17) llegamos a la siguiente generalización de la ley de Newton:

$$\partial_t v + (v \cdot \nabla)v = -\frac{1}{m} \nabla(V + \lambda \log(n)) - D_{qq}^2 \left[ \left( \frac{\nabla n}{n} \cdot \nabla \right) \frac{\nabla n}{n} - \nabla \left( \frac{\Delta n}{n} \right) \right] \quad (5.18)$$

que es análoga a la obtenida por Nelson en [92] y además le incorpora efectos disipativos. Combinando las ecuaciones (5.15) y (5.18) con la identidad  $v = u_+ - u_0$  podemos recuperar la ecuación de evolución satisfecha por  $u_+$ :

$$\begin{aligned} \partial_t u_+ + (u_+ \cdot \nabla) u_+ = & - \frac{1}{m} \nabla V - \frac{\Lambda}{m} \nabla \log(n) - \frac{2\alpha^2}{m\hbar^2} \nabla Q \\ & + D_{qq} \left[ \left( \frac{\nabla n}{n} \cdot \nabla \right) u_+ - (\nabla \otimes u_+) \frac{\nabla n}{n} - \nabla \operatorname{div}(u_+) \right]. \end{aligned}$$

Entonces, si suponemos la existencia de un campo escalar del momento, tenemos que  $u_+ = \frac{1}{m} \nabla S$ . Integrando formalmente obtenemos la siguiente ecuación de Hamilton–Jacobi para  $S$

$$\partial_t S + \frac{1}{2m} |\nabla S|^2 = -V - \frac{2\alpha^2}{\hbar^2} Q - \Lambda \log(n) - D_{qq} \Delta S + \Phi_{n,S}, \quad (5.19)$$

donde  $\Phi_{n,S} = \Phi_{n,S}(t)$  es una función independiente de la posición. Esta igualdad y la ecuación de continuidad

$$\partial_t n + \frac{1}{m} \operatorname{div}(n \nabla S) = D_{qq} \Delta n \quad (5.20)$$

que se deduce directamente de (5.13), constituyen un sistema hidrodinámico cuántico de flujo potencial cerrado, que nos permite construir una función de onda que contiene la misma información física que la ecuación de Wigner–Fokker–Planck. De hecho, si definimos

$$\varphi(t, x) = \sqrt{n(t, x)} \exp \left\{ \frac{i}{\alpha} S(t, x) \right\}$$

y utilizamos dicho sistema hidrodinámico, podemos concluir que  $\varphi$  verifica la siguiente ecuación de Schrödinger:

$$i\alpha \partial_t \varphi = -\frac{\alpha^2}{2m} \Delta \varphi + V \varphi + \frac{\alpha^2}{\hbar^2} Q \varphi + \Lambda \log(n) \varphi + D_{qq} \left( \frac{i\alpha}{2} \frac{\Delta n}{n} + m \operatorname{div} \left( \frac{J}{n} \right) \right) \varphi - \frac{\hbar}{\alpha} \Phi \varphi,$$

que coincide con SLC salvo por el término  $-\frac{\hbar}{\alpha} \Phi \varphi$ . Razonando como en la demostración del Teorema 2.3.2 encontramos una función  $\nu = \nu(t)$  tal que  $\psi = e^{i\nu} \varphi$  es solución de (5.1). Obsérvese que en este modelo los efectos de fricción quedan descritos mediante el término logarítmico, mientras que

$$D_{qq} \left( \frac{i\alpha}{2} \frac{\Delta n}{n} + m \operatorname{div} \left( \frac{J}{n} \right) \right) \psi \quad \text{y} \quad \frac{\alpha^2}{\hbar^2} Q \psi$$

representan difusión. Por último, es destacable que el modelo SLC, al igual que la ecuación SLD, se basa en el sistema (5.13)–(5.14) y por tanto los efectos de difusión en velocidad, que son de índole termodinámica, no pueden ser apreciados en el comportamiento de  $\psi$ .

### 5.3. Equivalencia entre las ecuaciones de Schrödinger difusiva y puramente logarítmica

Los resultados que hemos probado en el Capítulo 4 nos resultarán útiles para demostrar que la transformación  $\mathcal{G}$  introducida en (5.9) junto con su inversa,

$$\mathcal{G}^{-1}(\phi)(t, x) = \phi(t, x) \exp \left\{ i \log \left( \sqrt{n_\phi(t, x)} \right) \right\}, \quad (5.21)$$

establecen una relación de equivalencia entre los problemas de tipo mixto asociados a las ecuaciones SLC y de Schrödinger puramente logarítmica. De aquí en adelante aprovecharemos que ambas aplicaciones conservan la amplitud de la función de onda y denotaremos  $n = |\psi|^2 = |\mathcal{G}(\psi)|^2$  indistintamente (y análogamente para  $\mathcal{G}^{-1}$ ) cuando no haya riesgo de confusión. En el primer resultado de esta sección comprobamos que  $\mathcal{G}$  es un homeomorfismo en el conjunto  $C([0, T], H_\delta^2(\Omega))$ .

#### Proposición 5.3.1

Sean  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  un dominio acotado y  $\delta > 0$ . Si definimos  $\mathcal{G}(\psi)$  como en (5.9) para cualquier  $\psi \in C([0, T], H_\delta^2(\Omega))$ , entonces  $\mathcal{G} : C([0, T], H_\delta^2(\Omega)) \rightarrow C([0, T], H_\delta^2(\Omega))$  es un homeomorfismo (respecto de la norma  $\|\cdot\|_{L^\infty([0, T], H^2)}$ ) con inverso  $\mathcal{G}^{-1}$ , definido para cada  $\psi \in C([0, T], H_\delta^2(\Omega))$  como en (5.21).

#### DEMOSTRACIÓN:

Si  $X$  es un espacio topológico arbitrario,  $G : X \rightarrow X$  un homeomorfismo de  $X$  y definimos  $\mathcal{G}(x)(t) := G(x(t))$  para cualquier  $x \in C([0, T], X)$  y  $t \in [0, T]$ , es claro que  $\mathcal{G} : C([0, T], X) \rightarrow C([0, T], X)$  es también un homeomorfismo. Por tanto es suficiente probar que  $G : H_\delta^2(\Omega) \rightarrow H_\delta^2(\Omega)$  (definido de forma evidente en vista de (5.9)) da lugar a una aplicación continua con inversa continua. Dividimos la prueba en dos etapas.

ETAPA 1:  $G(H_\delta^2(\Omega)) \subseteq H_\delta^2(\Omega)$ .

Para cualquier  $\psi \in H_\delta^2(\Omega)$  se tiene que  $n_{G(\psi)} = n_\psi$ , luego  $G(\psi) \in L^2(\Omega)$  y  $|G(\psi)| > \delta$  c.t.  $x \in \Omega$ . Derivando  $G(\psi)$  encontramos que

$$\nabla G(\psi) = \left( \nabla \psi - i \frac{\nabla n}{2n} \psi \right) \exp \left\{ -i \log(\sqrt{n}) \right\}. \quad (5.22)$$

Entonces, en virtud del Lema 4.2.1 podemos deducir fácilmente que  $\nabla G(\psi) \in L^2(\Omega)$ . Además

$$\begin{aligned} \nabla \otimes \nabla G(\psi) = & \left\{ \nabla \otimes \nabla \psi - \frac{i}{2} \left( \frac{\nabla \otimes \nabla n}{n} \right) \psi + \frac{2i-1}{4} \left( \frac{\nabla n}{n} \otimes \frac{\nabla n}{n} \right) \psi \right. \\ & \left. - \frac{i}{n} \text{Sym}(\nabla n \otimes \nabla \psi) \right\} \exp \left\{ -i \log(\sqrt{n}) \right\}, \quad (5.23) \end{aligned}$$

donde hemos denotado  $\text{Sym}(\mathbf{x} \otimes \mathbf{y}) := \frac{1}{2}(\mathbf{x} \otimes \mathbf{y} + \mathbf{y} \otimes \mathbf{x})$  a la parte simétrica del tensor de rango dos  $\mathbf{x} \otimes \mathbf{y}$ . Como  $\psi \in H_\delta^2(\Omega)$  tenemos que  $\nabla \otimes \nabla \psi \in L^2(\Omega)$ , y del

mismo modo  $n \in H_{\delta^2}^2(\Omega)$  implica que  $(\nabla \otimes \nabla n)\psi/n \in L^2(\Omega)$ . Además

$$\nabla\psi, \frac{\nabla n}{n} \in H^1(\Omega) \subset L^4(\Omega),$$

de donde se obtiene que  $(\nabla n \otimes \nabla n)\psi/n^2, \nabla\psi \otimes \nabla\psi, (\nabla n/n) \otimes \nabla\psi \in L^2(\Omega)$ , luego  $G(\psi) \in H_{\delta}^2(\Omega)$ .

ETAPA 2:  $G$  es biyectiva y bicontinua.

Las fórmulas (5.9) y (5.21) dejan claro que  $G(G^{-1}(\phi)) = \phi$  y  $G^{-1}(G(\psi)) = \psi$  para cualesquiera  $\phi, \psi \in H_{\delta}^2(\Omega)$ , luego  $G$  es biyectiva. Para probar la bicontinuidad es suficiente probar que  $G$  es continua, ya que para  $G^{-1}$  el argumento es análogo. Sea  $\psi \in H_{\delta}^2(\Omega)$  y  $\{\psi_k\}_{k \in \mathbb{N}} \subset H_{\delta}^2(\Omega)$  tal que  $\psi_k \rightarrow \psi$  respecto de la norma  $\|\cdot\|_{H^2}$ . Como  $\Omega$  es un dominio acotado, podemos estimar

$$\begin{aligned} \|G(\psi_k) - G(\psi)\|_{L^2} &\leq \sqrt{|\Omega|} \left\{ \|(\psi_k - \psi) \exp\{-i \log(\sqrt{n})\}\|_{L^\infty} \right. \\ &\quad \left. + \|\psi_k (\exp\{-i \log(\sqrt{n_k})\} - \exp\{-i \log(\sqrt{n})\})\|_{L^\infty} \right\}. \end{aligned}$$

El primer término del segundo miembro está acotado por  $\|\psi_k - \psi\|_{L^\infty}$ . Para estimar el segundo término utilizamos el teorema de compacidad de Rellich–Kondrachov junto con la convergencia  $n_k \rightarrow n$  en  $\|\cdot\|_{H^2}$  (que se obtiene gracias al Lema 4.2.1) y el hecho de que  $n > \delta^2$ , que implican que  $\log(\sqrt{n_k}) \rightarrow \log(\sqrt{n})$  en  $\|\cdot\|_{L^\infty}$ . Como consecuencia

$$\left\| \psi_k \left( e^{-i \log(\sqrt{n_k})} - e^{-i \log(\sqrt{n})} \right) \right\|_{L^\infty} \leq C \|\psi_k\|_{H^2} \|\log(\sqrt{n_k}) - \log(\sqrt{n})\|_{L^\infty}.$$

Por tanto, el segundo término tiende a cero cuando  $k \rightarrow \infty$ . Usando las identidades (5.22) y (5.23) y la continuidad de las derivadas de  $n$  y  $\psi$  de  $H_{\delta}^2(\Omega)$  en  $L^2(\Omega)$ , es sencillo probar que  $G(\psi_k) \rightarrow G(\psi)$  en  $\|\cdot\|_{H^2}$ . Esto culmina la segunda etapa y con ello la prueba completa.  $\square$

**OBSERVACIÓN 5.3.2** *A lo largo del desarrollo de este resultado necesitamos dar sentido a la acción de la transformación Gauge sobre la condición de frontera  $\psi_B \in H^{3/2}(\partial\Omega)$ . Para ello basta darse cuenta de que las fórmulas (5.9) y (5.21) son válidas puntualmente en todo  $\bar{\Omega}$ . Entonces, definiendo  $\mathcal{G}(\psi_B) := \mathcal{G}(\psi_I)|_{\partial\Omega}$  y aplicando la Proposición 5.3.1 tenemos que  $\mathcal{G}(\psi_B) \in H^{3/2}(\partial\Omega)$  y se verifican las identidades*

$$\mathcal{G}(\mathcal{G}^{-1}(\phi_B)) = \phi_B, \quad \mathcal{G}^{-1}(\mathcal{G}(\psi_B)) = \psi_B \quad \forall x \in \partial\Omega,$$

lo cual permite tratar la transformación en  $\partial\Omega$  de forma satisfactoria.

El siguiente resultado muestra cómo las soluciones de los problemas de tipo mixto asociados a las ecuaciones SLC y de Schrödinger logarítmica están conectadas a través de  $\mathcal{G}$ .

**Teorema 5.3.3**

Sean  $T > 0$  y  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  ( $1 \leq d \leq 3$ ) un dominio y supongamos que se satisface la hipótesis (H1). Entonces se verifican las siguientes afirmaciones:

(i) Sean  $\psi_I, \psi_B$  cumpliendo (H2)–(H3) y tales que

$$\mathcal{G}(\psi_I) =: \phi_I \in H_\delta^2(\Omega), \quad \mathcal{G}(\psi_B) =: \phi_B \in H_\delta^{3/2}(\partial\Omega).$$

Sea además  $\phi \in X_\delta^T$  una solución de (5.10)–(5.11) en  $[0, T]$ . Entonces  $\psi = \mathcal{G}^{-1}(\phi)$  es solución de (5.1), (5.4) en  $[0, T]$ .

(ii) Recíprocamente, sean  $\phi_I, \phi_B$  cumpliendo (H2)–(H3) y tales que

$$\mathcal{G}^{-1}(\phi_I) =: \psi_I \in H_\delta^2(\Omega), \quad \mathcal{G}^{-1}(\phi_B) =: \psi_B \in H_\delta^{3/2}(\partial\Omega).$$

Sea además  $\psi \in X_\delta^T$  una solución de (5.1), (5.4) en  $[0, T]$ . Entonces  $\phi = \mathcal{G}(\psi)$  es solución de (5.10)–(5.11) en  $[0, T]$ .

(iii) La unicidad se hereda vía  $\mathcal{G}$ , esto es, si  $\psi_I, \psi_B$  satisfacen (H2)–(H3) y el problema (5.10)–(5.11) admite una única solución, entonces (5.1), (5.4) admite también una única solución. Del mismo modo, si  $\phi_I, \phi_B$  satisfacen (H2)–(H3) y el problema (5.1), (5.4) admite una única solución, entonces (5.10)–(5.11) admite también una única solución.

DEMOSTRACIÓN:

Si  $\phi \in X_\delta^T$  es una solución fuerte de (5.10)–(5.11), entonces satisface las hipótesis del Teorema 4.3.2 con  $\Theta[n] = \frac{\Lambda}{\alpha} \log(n)$ , luego existe  $S_\phi \in X^T$  tal que

$$\phi(t, x) = \sqrt{n(t, x)} \exp \left\{ \frac{i}{\alpha} S_\phi(t, x) \right\}.$$

Además, podemos aplicar el Corolario 4.3.4 y concluir que  $n \in X_{\delta^2}^T$ ,  $S_\phi \in X^T$  y el par  $(n, S_\phi)$  es solución del siguiente sistema hidrodinámico en  $[0, T]$ :

$$\partial_t n + \frac{1}{m} \operatorname{div} (n \nabla S_\phi) = 0, \quad (5.24)$$

$$\partial_t S_\phi + \frac{1}{2m} |\nabla S_\phi|^2 = -\frac{\alpha^2}{\hbar^2} Q - \Lambda \log(n). \quad (5.25)$$

Si ahora definimos

$$S_\psi(t, x) := S_\phi(t, x) + \alpha \log(\sqrt{n(t, x)}), \quad (5.26)$$

entonces  $S_\psi \in X^T$  y el par  $(n, S_\psi)$  es solución en  $[0, T]$  del sistema

$$\partial_t n + \frac{1}{m} \operatorname{div} (n \nabla S_\psi) = D_{qq} \Delta n, \quad (5.27)$$

$$\partial_t S_\psi + \frac{1}{2m} |\nabla S_\psi|^2 = -\frac{2\alpha^2}{\hbar^2} Q - \Lambda \log(n) - D_{qq} \Delta S_\psi. \quad (5.28)$$

Definimos  $\psi := \mathcal{G}^{-1}(\phi)$ . La Proposición 5.3.1 implica que  $\psi \in C([0, T], H_\delta^2(\Omega))$  y además se tiene que

$$\psi(t, x) = \sqrt{n(t, x)} \exp \left\{ \frac{i}{\alpha} S_\psi(t, x) \right\},$$

luego  $\psi \in X_\delta^T$  y usando el sistema (5.27)–(5.28) podemos calcular la evolución temporal de  $\psi$  en términos de la siguiente ecuación de Schrödinger:

$$i\alpha\partial_t\psi = -\frac{\alpha^2}{2m}\Delta\psi + \frac{\alpha^2}{\hbar^2}Q\psi + \Lambda\log(n)\psi + \frac{i\alpha D_{qq}}{2}\left(\frac{\Delta n}{n}\right)\psi + mD_{qq}\operatorname{div}\left(\frac{J}{n}\right)\psi,$$

luego  $\psi$  es solución de SLC en  $[0, T]$ . Además, se verifican las siguientes identidades casi en todo punto de  $\Omega$  y  $\partial\Omega$  respectivamente:

$$\begin{aligned} \psi(0, x) &= \sqrt{n_I(x)} \exp \left\{ \frac{i}{\alpha} \left( S_\phi(0, x) + \alpha \log(\sqrt{n_I(x)}) \right) \right\} \\ &= \phi_I(x) \exp \left\{ i \log(\sqrt{n_I(x)}) \right\} = \psi_I(x), \\ \psi(t, x) &= \sqrt{n(t, x)} \exp \left\{ \frac{i}{\alpha} \left( S_\phi(t, x) + \alpha \log(\sqrt{n(t, x)}) \right) \right\} \\ &= \phi_B(x) \exp \left\{ i \log(\sqrt{n_B(x)}) \right\} = \psi_B(x), \end{aligned}$$

donde hemos denotado  $n_I = |\psi_I|^2 = |\phi_I|^2$ . Por tanto,  $\psi$  es solución de (5.1), (5.4). Esto demuestra el apartado (i).

La prueba de (ii) es totalmente análoga a la anterior, teniendo en cuenta que en este caso

$$\Theta[n, J] = \frac{\alpha}{\hbar^2}Q + \frac{\Lambda}{\alpha}\log(n) + \frac{iD_{qq}}{2}\left(\frac{\Delta n}{n}\right) + \frac{1}{2}\operatorname{div}\left(\frac{J}{n}\right)$$

es un operador continuo de  $H_\delta^2(\Omega) \times H^1(\Omega)$  en  $L^2(\Omega)$  y el hecho de que

$$S_\phi(t, x) = S_\psi(t, x) - \alpha \log(\sqrt{n(t, x)}). \quad (5.29)$$

Para comprobar (iii), suponemos primero que  $\psi_1, \psi_2 \in X_\delta^T$  son dos soluciones del problema (5.1), (5.4) y que (5.10)–(5.11) admite a lo más una única solución. Es claro que

$$\phi_I(x) = \psi_I(x) \exp \left\{ -i \log(\sqrt{n_I(x)}) \right\} \text{ y } \phi_B(x) = \psi_B(x) \exp \left\{ -i \log(\sqrt{n_B(x)}) \right\}$$

satisfacen (H2)–(H3). Además,  $\psi_{1,2}(0, x) = \mathcal{G}^{-1}(\phi_I)(x)$  y  $\psi_{1,2}(t, x) = \mathcal{G}^{-1}(\phi_B)(t, x)$  para todo  $t \in [0, T]$  y casi todo  $x \in \partial\Omega$ . Como consecuencia,  $\psi_{1,2}$  verifican las hipótesis del apartado (ii), luego

$$\phi_{1,2}(t, x) = \mathcal{G}(\psi_{1,2})(t, x) = \psi_{1,2}(t, x) \exp \left\{ -i \log(\sqrt{n_{1,2}(t, x)}) \right\}$$

pertenecen a  $X_\delta^T$  y son soluciones de (5.10)–(5.11). Como este problema tiene solución única, ha de ser  $\phi_1 = \phi_2$ , luego

$$\psi_1 \exp \{-i \log(\sqrt{n_1})\} = \psi_2 \exp \{-i \log(\sqrt{n_2})\}, \quad n_{1,2} = |\phi_{1,2}|^2,$$

de donde deducimos de forma sencilla que  $n_1 = n_2$  y por tanto  $\psi_1 = \psi_2$ . La afirmación recíproca se obtiene análogamente.  $\square$

**OBSERVACIÓN 5.3.4** *El Teorema 5.3.3 es aplicable a cualquier ecuación de la familia de Doebner–Goldin cuyos coeficientes cumplan las relaciones (5.5) bajo la hipótesis (5.6). En el caso más general, el cambio de fase no lineal  $\mathcal{G}$  sigue el esquema [43]*

$$\mathcal{G}(\phi)(t, x) = \sqrt{n_\psi(t, x)} \exp \left\{ i \left[ A \log(n(t, x)) + B S_\psi(t, x) \right] \right\},$$

donde los coeficientes  $A$  y  $B$  pueden ser dependientes del tiempo, y es necesario (salvo control de  $A$  y  $B$ ) trabajar en espacios funcionales cociente para evitar evaluaciones múltiples de la transformación. En este contexto se podría eliminar la hipótesis de conexión simple sobre  $\Omega$ .

Es destacable señalar que en la prueba del Teorema 5.3.3 hemos establecido la equivalencia entre los problemas asociados a SLC y la ecuación de Schrödinger logarítmica a través de los sistemas hidrodinámicos (5.27)–(5.28) y (5.24)–(5.25) respectivamente, aprovechando que la correspondencia  $S_\psi \leftrightarrow S_\phi$  es lineal. Hacemos explícito este hecho en el último resultado de la sección, cuya demostración está incluida en la que acabamos de completar.

#### Corolario 5.3.5

Sean  $T > 0$  y  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  ( $1 \leq d \leq 3$ ) un dominio y supongamos que se satisface (H1). Entonces:

- (i) Si  $(n, S_\phi) \in X_{\delta^2}^T \times X^T$  es solución del sistema (5.24)–(5.25) en  $[0, T]$  y consideramos  $S_\psi$  definida como en (5.26), entonces  $(n, S_\psi) \in X_{\delta^2}^T \times X^T$  es solución del sistema (5.27)–(5.28) en  $[0, T]$ .
- (ii) Recíprocamente, si  $(n, S_\psi) \in X_{\delta^2}^T \times X^T$  es solución del sistema (5.27)–(5.28) en  $[0, T]$  y consideramos  $S_\phi$  definida como en (5.29), entonces  $(n, S_\phi) \in X_{\delta^2}^T \times X^T$  es solución del sistema (5.24)–(5.25) en  $[0, T]$ .

## 5.4. Buen planteamiento de la ecuación logarítmica

Una vez reducido el análisis del problema de tipo mixto asociado a SLC a aquel relativo a la ecuación de Schrödinger puramente logarítmica tan solo nos falta probar el buen planteamiento de (5.10)–(5.11) en el conjunto  $H_\delta^2(\Omega)$  (y en

el contexto en que estamos trabajando). De esta forma estableceremos el último resultado necesario para resolver nuestro problema original.

La ecuación de Schrödinger logarítmica fue introducida en 1.976 por Bialynicki–Birula y Miczyński [16] y aparece de forma natural en diversos problemas físicos conectados con la mecánica cuántica. Recientemente, por ejemplo, ha sido propuesta para modelar diferentes procesos relativos a fenómenos de capilaridad o transporte de magma [35, 36, 75]. Dicha ecuación ha sido estudiada en la literatura matemática desde distintos enfoques y existen diversos resultados acerca de su buen planteamiento y la estabilidad de sus soluciones [23, 24, 25, 64]. Es interesante, además, la cuestión del signo del término logarítmico a la hora de estudiar el comportamiento asintótico u otras propiedades cualitativas del modelo. En la derivación original [16] se obtiene  $\Lambda < 0$  como coeficiente del término logarítmico, lo cual conduce a funcionales de energía minorados. Sin embargo, en [32, 33] se justifica el signo positivo para este término a pesar de que el funcional de energía asociado no esté acotado inferiormente.

El resultado requerido preciso de existencia de soluciones que necesitamos es el siguiente.

**Teorema 5.4.1**

Sean  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  ( $1 \leq d \leq 3$ ) un dominio acotado con frontera de clase  $C^2$  y  $\phi_I \in H^2(\Omega)$ ,  $\phi_B \in H^{3/2}(\partial\Omega)$  verificando (H2)–(H3). Entonces existen  $T > 0$  y  $\phi \in X_\delta^T$  una única solución del problema (5.10)–(5.11) en  $[0, T]$ .

Para llevar a cabo la demostración de este resultado necesitamos tratar el término logarítmico de forma adecuada según nuestro contexto.

**Lema 5.4.2 (estimaciones a priori)**

Sean  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  ( $1 \leq d \leq 3$ ) un dominio acotado y  $M, \delta > 0$ . Entonces se verifican las siguientes afirmaciones:

(i) Existe  $K_1(\delta, M, \Omega) > 0$  tal que  $\|\phi \log(n)\|_{H^2} \leq K_1$  para todo  $\phi \in H_\delta^2(\Omega)$  con  $\|\phi\|_{H_2} \leq M$ .

(ii) Existe  $K_2(\delta, M, \Omega) > 0$  tal que

$$\|\phi_1 \log(n_1) - \phi_2 \log(n_2)\|_{L^2} \leq K_2 \|\phi_1 - \phi_2\|_{L^2}$$

para cualesquiera  $\phi_1, \phi_2 \in H_\delta^2(\Omega)$  con  $\|\phi_{1,2}\|_{H_2} \leq M$ .

(iii) Existe  $K_3(\delta, M, \Omega) > 0$  tal que

$$\|\phi_1 \log(n_1) - \phi_2 \log(n_2)\|_{H^2} \leq K_3 \|\phi_1 - \phi_2\|_{H^2}$$

para cualesquiera  $\phi_1, \phi_2 \in H_\delta^2(\Omega)$  con  $\|\phi_{1,2}\|_{H_2} \leq M$ .

DEMOSTRACIÓN:

Sean  $C_1, C_2 > 0$  dos constantes positivas verificando  $\|\phi\|_{L^\infty} \leq C_1\|\phi\|_{H^2} \leq C_1M$  y  $\|\phi\|_{L^4} \leq C_2\|\phi\|_{H^1} \leq C_2M$  para cualquier  $\phi \in C_c^\infty(\Omega)$ . Definimos además

$$M_1 = \max \{ |\log(\delta)|, 2|\log(C_1M)| \}.$$

(i) Una estimación  $L^2$  sencilla conduce a

$$\|\phi \log(n)\|_{L^2} \leq M_1M. \quad (5.30)$$

Derivando y acotando de forma adecuada, es fácil observar que

$$\|\nabla(\phi \log(n))\|_{L^2} \leq M_1M + \frac{C_1}{\delta^2}M\|n\|_{H^2}. \quad (5.31)$$

Finalmente, si derivamos de nuevo obtenemos que  $\nabla \otimes \nabla(\phi \log(n))$  es igual a

$$(\nabla \otimes \nabla \phi) \log(n) + 2 \operatorname{Sym} \left( \nabla \phi \otimes \frac{\nabla n}{n} \right) + \phi \left( \frac{\nabla \otimes \nabla n}{n} - \frac{\nabla n}{n} \otimes \frac{\nabla n}{n} \right).$$

Por tanto

$$\|\nabla \otimes \nabla(\phi \log(n))\|_{L^2} \leq M_1M + \frac{2C_2^2}{\delta^2}M\|n\|_{H^2} + \frac{C_1}{\delta^2}M\|n\|_{H^2} \left( 1 + \frac{C_2^2}{\delta^2}\|n\|_{H^2} \right).$$

Combinando (5.30), (5.31) y (5.32) y observando que

$$\|n\|_{H^2} \leq (5C_1 + 2C_2^2)M^2 \quad (5.32)$$

completamos la prueba de (i).

(ii) Para comprobar esta afirmación, usamos que

$$\begin{aligned} \|\phi_1 \log(n_1) - \phi_2 \log(n_2)\|_{L^2} &\leq \|\phi_1(\log(n_1) - \log(n_2))\|_{L^2} + \|\log(n_2)(\phi_1 - \phi_2)\|_{L^2} \\ &\leq \left( \frac{2C_1}{\delta}M + M_1 \right) \|\phi_1 - \phi_2\|_{L^2}, \end{aligned} \quad (5.33)$$

donde hemos empleado la desigualdad  $|\log(r_1^2) - \log(r_2^2)| \leq \frac{2}{\delta}|r_1 - r_2|$ , que es una consecuencia directa del Teorema del Valor Medio. Esto culmina la prueba del segundo apartado.

(iii) Calculamos

$$\begin{aligned} \nabla[\phi_1(\log(n_1) - \log(n_2))] &= \nabla\phi_1(\log(n_1) - \log(n_2)) \\ &+ \phi_1 \left[ \frac{\nabla(n_1 - n_2)}{n_1} + \frac{\nabla n_2}{n_1 n_2}(n_2 - n_1) \right] \end{aligned}$$

y estimamos

$$\|\nabla\phi_1(\log(n_1) - \log(n_2))\|_{L^2} \leq \frac{2}{\delta}\|\nabla\phi_1(|\phi_1| - |\phi_2|)\|_{L^2} \leq \frac{2C_2^2}{\delta}M\|\phi_1 - \phi_2\|_{H^1},$$

$$\left\| \frac{\nabla(n_1 - n_2)}{n_1} \right\|_{L^2} \leq \frac{2}{\delta^2} \|\overline{\phi_1}(\nabla\phi_1 - \nabla\phi_2) - (\overline{\phi_2} - \overline{\phi_1})\nabla\phi_2\|_{L^2} \leq \frac{4C_1}{\delta^2} M \|\phi_1 - \phi_2\|_{H^2},$$

$$\begin{aligned} \left\| \frac{\nabla n_2}{n_1 n_2} (n_2 - n_1) \right\|_{L^2} &\leq \frac{2}{\delta^4} \|\overline{\phi_2} \nabla \phi_2\|_{L^2} \left( \|\phi_1(\overline{\phi_1} - \overline{\phi_2})\|_{L^\infty} + \|\overline{\phi_2}(\phi_1 - \phi_2)\|_{L^\infty} \right) \\ &\leq \frac{4C_1^3}{\delta^4} M^3 \|\phi_1 - \phi_2\|_{H^2}. \end{aligned}$$

Si utilizamos (5.32), solo necesitamos las siguientes acotaciones

$$\|\nabla \otimes \nabla \phi_1 (\log(n_1) - \log(n_2))\|_{L^2} \leq \frac{2}{\delta} \|\nabla \otimes \nabla \phi_1 (\phi_1 - \phi_2)\|_{L^2} \leq \frac{2C_1 M}{\delta} \|\phi_1 - \phi_2\|_{H^2}$$

$$\begin{aligned} \left\| \phi_1 \left( \frac{\nabla \otimes \nabla n_1}{n_1} - \frac{\nabla n_1 \otimes \nabla n_1}{n_1^2} - \frac{\nabla \otimes \nabla n_2}{n_2} + \frac{\nabla n_2 \otimes \nabla n_2}{n_2^2} \right) \right\|_{L^2} \\ \leq \frac{2C_1^2}{\delta^2} M^2 \left( 1 + \frac{2C_1 C_2^2}{\delta^2} M \right) \|\phi_1 - \phi_2\|_{H^2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left\| \nabla \phi_1 \otimes \left( \frac{\nabla n_1}{n_1} - \frac{\nabla n_2}{n_2} \right) \right\|_{L^2} &\leq C_2^2 M \left\| \frac{\nabla n_1}{n_1} - \frac{\nabla n_2}{n_2} \right\|_{H^1} \\ &\leq \frac{2C_1 C_2^2}{\delta^2} M^2 \left\{ \frac{2C_1}{\delta^2} M (C_2^2 + C_1 M) + 3 \right\} \|\phi_1 - \phi_2\|_{H^2}, \end{aligned}$$

para obtener

$$\|\nabla \otimes \nabla [\phi_1 (\log(n_1) - \log(n_2))]\|_{L^2} \leq C(\delta, M, \Omega) \|\phi_1 - \phi_2\|_{H^2}.$$

Estimamos ahora  $\|\log(n_2)(\phi_1 - \phi_2)\|_{H^2}$ . La norma  $\|\cdot\|_{L^2}$  se puede acotar como en (5.33). Además se tiene que

$$\begin{aligned} \left\| \frac{\nabla n_2}{n_2} (\phi_1 - \phi_2) \right\|_{L^2} &\leq \frac{C_2^2}{\delta^2} \|n_2\|_{H^2} \|\phi_1 - \phi_2\|_{H^2}, \\ \|\log(n_2) \nabla (\phi_1 - \phi_2)\|_{L^2} &\leq M_1 \|\phi_1 - \phi_2\|_{H^2}, \end{aligned}$$

luego  $\|\nabla [\log(n_2)(\phi_1 - \phi_2)]\|_{L^2} \leq C(\delta, M, \Omega) \|\phi_1 - \phi_2\|_{H^2}$ . De acuerdo con (5.32) solo es necesario estimar

$$\begin{aligned} \left\| \left( \frac{\nabla \otimes \nabla n_2}{n_2} - \frac{\nabla n_2}{n_2} \otimes \frac{\nabla n_2}{n_2} \right) (\phi_1 - \phi_2) \right\|_{L^2} \\ \leq \frac{C_1}{\delta^2} \|n_2\|_{H^2} \left( 1 + \frac{C_2^2}{\delta^2} \|n_2\|_{H^2} \right) \|\phi_1 - \phi_2\|_{H^2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left\| \frac{\nabla n_2}{n_2} \otimes \nabla (\phi_1 - \phi_2) \right\|_{L^2} &\leq \frac{C_2^2}{\delta^2} \|n_2\|_{H^2} \|\phi_1 - \phi_2\|_{H^2}, \\ \|\log(n_2) \nabla \otimes \nabla (\phi_1 - \phi_2)\|_{L^2} &\leq M_1 \|\phi_1 - \phi_2\|_{H^2}, \end{aligned}$$

que implica  $\|\nabla \otimes \nabla[\log(n_2)(\phi_1 - \phi_2)]\|_{L^2} \leq C(\delta, M, \Omega)\|\phi_1 - \phi_2\|_{H^2}$ , donde hemos usado nuevamente (5.32). Esto culmina la prueba.  $\square$

La demostración del Teorema 5.4.1 se basa en un argumento de punto fijo sobre un subconjunto adecuado de  $H_\delta^2(\Omega)$ , tratando de forma adecuada la condición en la frontera y empleando las estimaciones establecidas en el lema anterior.

DEMOSTRACIÓN DEL TEOREMA 5.4.1:

La hipótesis (H3) sobre la frontera nos permite considerar  $\log(|\phi_B|^2)\phi_B \in C(\partial\Omega)$ , y por tanto podemos aplicar el Lema 1.2.1 para obtener  $\widetilde{\phi}_B, \widetilde{L}_B \in C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$  armónicas en  $\Omega$  y tales que  $\widetilde{\phi}_B = \phi_B$  y  $\widetilde{L}_B = \log(|\phi_B|^2)\phi_B$  en  $\partial\Omega$ . Definimos entonces

$$\mathcal{U}(t) := \widetilde{\phi}_B + e^{At}(\phi_I - \widetilde{\phi}_B), \quad \mathcal{V}(t) := -\frac{i\Lambda}{\alpha} \int_0^t e^{A(t-\tau)} \widetilde{\phi}_B d\tau, \quad \forall t \in \mathbb{R},$$

donde  $\{e^{At}\}_{t \in \mathbb{R}}$  es el grupo de isometrías de  $L^2(\Omega)$  con generador infinitesimal  $A = i(\alpha/2)\Delta$ , cuyo dominio es en nuestro caso  $\mathcal{D} = H_0^1(\Omega) \cap H^2(\Omega)$ . De la definición del grupo es claro que  $\mathcal{U}$  es la única solución del siguiente problema

$$\begin{aligned} \mathcal{U} &\in X^T, \\ i\partial_t \mathcal{U} &= -D_{qq}\Delta \mathcal{U} \quad \text{en } [0, T] \times \Omega, \\ \mathcal{U}(0, x) &= \phi_I(x) \quad \text{en } \Omega, \\ \mathcal{U}(t, x) &= \phi_B(x) \quad \text{en } \partial\Omega, \quad t \in [0, T] \end{aligned}$$

para  $T \in \mathbb{R}$  arbitrario. Además, como la aplicación  $t \mapsto \widetilde{L}_B$  es constante, podemos aplicar el Lema 1.2.7 para garantizar que  $\mathcal{V}$  es la única solución de

$$\begin{aligned} \mathcal{V} &\in C([0, T], \mathcal{D}) \cap C^1([0, T], L^2(\Omega)), \\ i\partial_t \mathcal{V} &= -D_{qq}\Delta \mathcal{V} + \frac{\Lambda}{\alpha} \widetilde{L}_B \quad \text{en } [0, T] \times \Omega, \\ \mathcal{V}(0, x) &= 0 \quad \text{en } \Omega, \\ \mathcal{V}(t, x) &= 0 \quad \text{en } \partial\Omega, \quad t \in [0, T], \end{aligned}$$

para todo  $T > 0$ . Vamos a demostrar la existencia de soluciones de (5.10)–(5.11) a través del teorema del punto fijo de Banach al operador

$$\Gamma(\phi)(t) := \mathcal{U}(t) + \mathcal{V}(t) - \frac{i\Lambda}{\alpha} \int_0^t e^{A(t-\tau)} [\log(n(\tau))\phi(\tau) - \widetilde{L}_B] d\tau \quad \forall t \in \mathbb{R}, \quad (5.34)$$

en un subconjunto apropiado de  $X_\delta^T$  para cierto  $T > 0$ . Para encontrar  $T$  necesitamos el siguiente resultado, cuya demostración no incluimos aquí por tratarse de un caso particular del Lema 6.2.5 que utilizamos en el Capítulo 6.

**Lema 5.4.3**

Bajo las hipótesis del Teorema 5.4.1, existen constantes positivas  $r^*$ ,  $T^*$ ,  $K_0$  dependientes de  $\delta$ ,  $\Omega$ ,  $\phi_I$  y  $\phi_B$  tales que

$$\|\mathcal{U}\|_{L^\infty([0,T],H^2)}, \|\mathcal{V}\|_{L^\infty([0,T],H^2)} \leq K_0,$$

y  $B_{r,T} \subset C([0,T], H_\delta^2(\Omega))$  para cualesquiera  $r \in (0, r^*)$  y  $T \in (0, T^*)$ , donde

$$B_{r,T} := \{\phi \in C([0,T], H^2(\Omega)) : \|\phi - \mathcal{U} - \mathcal{V}\|_{L^\infty([0,T],H^2)} \leq r\}.$$

Usando este resultado podemos definir el conjunto donde el operador  $\Gamma$  definido en (5.34) admite un punto fijo. En efecto, sea

$$Y_{r,T} := \{\phi \in B_{r,T} : \log(n)\phi - \widetilde{L}_B \in C([0,T], \mathcal{D})\},$$

para  $r < r^*$  y  $T < \min\{T^*, T_1, T_2\}$ , donde  $r^*$ ,  $T^*$  son las constantes del Lema 5.4.3 y

$$T_1 = \frac{\alpha r}{\Lambda(K_1 + \|\widetilde{L}_B\|_{H^2})}, \quad T_2 = \frac{\alpha}{2\Lambda K_3},$$

donde  $K_1, K_3$  provienen del Lema 5.4.2 (i) y (iii), respectivamente. Para ver que  $\Gamma$  admite un punto fijo en  $Y_{r,T} \subset X_\delta^T$  completaremos las siguientes tres etapas

ETAPA 1: *El conjunto  $Y_{r,T}$ , equipado con la distancia asociada a  $\|\cdot\|_{L^\infty([0,T],H^2)}$  es un espacio métrico completo.*

Nótese que es suficiente con probar que  $Y_{r,T}$  es cerrado en  $B_{r,T}$ . Con este objetivo consideramos  $\mathcal{L}$ , definido en  $B_{r,T}$  por

$$\mathcal{L}[\phi](t) = \log(n(t))\phi(t) - \widetilde{L}_B \quad \forall t \in [0, T],$$

para cualquier  $\phi \in B_{r,T}$ . Como  $r < r^*$  y  $T < T^*$ , el Lema 5.4.3 garantiza que  $B_{r,T} \subset C([0,T], H_\delta^2(\Omega))$ . En particular,  $\|\phi(t)\|_{H^2} \leq r^* + 2K_0$  para todo  $t \in [0, T]$  y aplicando el Lema 5.4.2 se tiene que  $\mathcal{L}(t) \in H^2(\Omega)$  y

$$\|\mathcal{L}[\phi_1](t) - \mathcal{L}[\phi_2](t)\|_{H^2} \leq K_3\|\phi_1(t) - \phi_2(t)\|_{H^2} \quad \forall t \in [0, T], \phi_{1,2} \in B_{r,T},$$

luego  $\mathcal{L} : B_{r,T} \rightarrow C([0,T], H^2(\Omega))$  es lipschitziana y por tanto continua. Por último, como  $C([0,T], \mathcal{D})$  es cerrado en  $C([0,T], H^2(\Omega))$ , basta con observar que  $Y_{r,T} = \mathcal{L}^{-1}(C([0,T], \mathcal{D}))$ . Esto concluye la primera etapa de la demostración.

ETAPA 2:  $\Gamma(Y_{r,T}) \subseteq Y_{r,T}$ .

Sea  $\phi \in Y_{r,T}$ . Es claro que  $\Gamma(\phi)(t) = \mathcal{U}(t) + \mathcal{V}(t) + W_\phi(t) \in C([0,T], H^2(\Omega))$ , donde  $W_\phi \in C([0,T], \mathcal{D})$  está dado por

$$W_\phi(t) := -\frac{i\Lambda}{\alpha} \int_0^t e^{A(t-\tau)} \left( \log(n(\tau))\phi(\tau) - \widetilde{L}_B \right) d\tau, \quad \forall t \in [0, T].$$

Además

$$\begin{aligned} \|\Gamma(\phi)(t) - \mathcal{U}(t) - \mathcal{V}(t)\|_{H^2} &\leq \frac{\Lambda}{\alpha} \int_0^t \|\log(n(\tau))\phi(\tau) - \widetilde{L}_B\|_{H^2} d\tau \\ &\leq \frac{\Lambda}{\alpha} \int_0^t \left( K_1 + \|\widetilde{L}_B\|_{H^2} \right) d\tau \leq \frac{\Lambda}{\alpha} (K_1 + \|\widetilde{L}_B\|_{H^2}) T_1 = r \end{aligned}$$

para cualquier  $t \in [0, T]$ , luego  $\Gamma(\phi) \in B_{r,T}$ . Finalmente, para concluir que  $\Gamma(\phi) \in Y_{r,T}$  falta conocer su comportamiento en la frontera. Para ello usamos la definición de  $\mathcal{U}$  para escribir  $\Gamma(\phi) = \widetilde{\phi}_B + \widetilde{\Gamma}(\phi)$ , donde

$$\widetilde{\Gamma}(\phi)(t) = e^{At}(\phi_0 - \widetilde{\phi}_B) + \mathcal{V}(t) + W_\phi(t) \in C([0, T], \mathcal{D}).$$

Como consecuencia  $\Gamma(\phi)(t)|_{\partial\Omega} \equiv \phi_B$  en  $\partial\Omega \forall t \in [0, T]$ , lo que implica junto con el Lema 5.4.2 que  $\log(n_{\Gamma(\phi)}) \Gamma(\phi) - \widetilde{L}_B \in C([0, T], \mathcal{D})$ . Con esto concluye la segunda etapa de la demostración.

ETAPA 3:  $\Gamma : Y_{r,T} \rightarrow Y_{r,T}$  es una aplicación contractiva.

Sean  $\phi_1, \phi_2 \in Y_{r,T}$  y  $t \in [0, T]$ . Como  $e^{At} : \mathcal{D} \rightarrow \mathcal{D}$  es una isometría, se dispone de la siguiente estimación:

$$\|\Gamma(\phi_1)(t) - \Gamma(\phi_2)(t)\|_{H^2} \leq \frac{\Lambda}{\alpha} \int_0^t \|(\log(n_2(\tau))\phi_2(\tau) - \log(n_1(\tau))\phi_1(\tau))\|_{H^2} d\tau.$$

Usando los Lemas 5.4.2 (iii) y 5.4.3 obtenemos

$$\|\Gamma(\phi_1)(t) - \Gamma(\phi_2)(t)\|_{H^2} \leq \frac{\Lambda K_3}{\alpha} \int_0^t \|\phi_1(\tau) - \phi_2(\tau)\|_{H^2} d\tau < \|\phi_1 - \phi_2\|_{L^\infty([0, T], H^2)},$$

lo que significa que en efecto  $\Gamma$  es contractiva en  $Y_{r,T}$ . De este modo concluimos la tercera etapa de la demostración.

Aplicando entonces el teorema del punto fijo de Banach tenemos garantizada la existencia de un único  $\phi \in Y_{r,T}$  punto fijo de  $\Gamma$  en  $[0, T]$  que se puede escribir como  $\phi(t) = \mathcal{U}(t) + \mathcal{V}(t) + W_\phi(t)$ , donde  $\mathcal{U}, \mathcal{V} \in X^T$  como sabemos. En particular,  $\mathcal{U}, \mathcal{V} : [0, T] \rightarrow L^2(\Omega)$  son lipschitzianas. Además, para  $0 \leq t_1 < t_2 < T$  se tiene que

$$\|W_\phi(t_2) - W_\phi(t_1)\|_{L^2} \leq f(t_1, t_2) + g(t_1, t_2),$$

donde  $f$  y  $g$  vienen dadas por

$$\begin{aligned} f(t_1, t_2) &= \frac{\Lambda}{\alpha} \int_0^{t_1} \left\| e^{A(t_1-\tau)} \left( I - e^{A(t_2-t_1)} \right) [\log(n(\tau))\phi(\tau) - \widetilde{L}_B] \right\|_{L^2} d\tau, \\ g(t_1, t_2) &= \frac{\Lambda}{\alpha} \int_{t_1}^{t_2} \left\| e^{A(t_2-\tau)} [\log(n(\tau))\phi(\tau) - \widetilde{L}_B] \right\|_{L^2} d\tau. \end{aligned}$$

Usando que  $e^{At}$  es una isometría de  $L^2(\Omega)$  para cada  $t$  real y aplicando el Lema 1.2.6 podemos estimar  $f$  de la siguiente forma:

$$f(t_1, t_2) \leq \frac{\Lambda}{\alpha} \int_0^{t_1} \left\| \int_0^{t_2-t_1} e^{A\tau} \Delta[\log(n(\tau))\phi(\tau)] d\tau \right\|_{L^2} d\tau \leq \frac{\Lambda}{\alpha} K_1 T^*(t_2 - t_1).$$

Aprovechando nuevametne que el grupo conserva la norma  $\|\cdot\|_{L^2}$  se tiene que

$$g(t_1, t_2) \leq \frac{\Lambda}{\alpha} \int_{t_1}^{t_2} \left\| \log(n(\tau))\phi(\tau) - \widetilde{L}_B \right\|_{L^2} d\tau \leq \frac{\Lambda}{\alpha} (K_1 + \|\widetilde{L}_B\|_{H^2})(t_2 - t_1),$$

luego

$$\|W_\phi(t_2) - W_\phi(t_1)\|_{L^2} \leq \frac{\Lambda}{\alpha} (K_1(T^* + 1) + \|\widetilde{L}_B\|_{H^2}) |t_2 - t_1|,$$

lo que nos permite concluir, dada la arbitrariedad de  $t_1$  y  $t_2$ , que  $W_\phi : [0, T] \rightarrow L^2(\Omega)$  es lipschitziana, luego  $\phi$  también lo es. Usando la estimación del Lema 5.4.2 (ii) tenemos que la aplicación  $t \mapsto \phi(t) \log(n(t)) - \widetilde{L}_B \in L^2(\Omega)$  es lipschitziana, y en particular está en  $W^{1,1}([0, T], L^2(\Omega))$ . Aplicando ahora el Lema 1.2.7 deducimos que  $W_\phi$  es la única solución de

$$\begin{aligned} W_\phi &\in C([0, T], \mathcal{D}) \cap C^1([0, T], L^2(\Omega)), \\ i\partial_t W_\phi &= -D_{q\bar{q}} \Delta W_\phi + \frac{\Lambda}{\alpha} (\log(n)\phi - \widetilde{L}_B) \quad \text{en } [0, T] \times \Omega, \\ W_\phi(0, x) &= 0 \quad \text{en } \Omega. \end{aligned}$$

Como consecuencia,  $\phi \in X^T$  y basta observar que  $\phi = \mathcal{U} + \mathcal{V} + W_\phi$  para darse cuenta de que  $\phi$  satisface las condiciones inicial y de contorno. Es importante que  $\phi \in Y_{r,T}$ , lo cual implica, en virtud del Lema 5.4.3, que  $\phi \in X_\delta^T$ . Por tanto,  $\phi$  es la única solución del problema (5.10)–(5.11).  $\square$

## 5.5. Existencia y unicidad de solución en dominios acotados

Una vez establecido el Teorema 5.4.1 ya estamos en condiciones de demostrar la existencia y unicidad de solución local para el problema de tipo mixto asociado al modelo SLC, cuya prueba consiste simplemente en transformar las condiciones iniciales y de contorno establecidas en (5.4) según la transformación  $\mathcal{G}$  definida en (5.9), aplicar el Teorema 5.4.1 para obtener  $\phi \in X_\delta^T$ , solución de la ecuación logarítmica, y construir finalmente la única solución de nuestro problema a través de  $\mathcal{G}^{-1}$  y del Teorema 5.3.3. Materializamos este proceso en el resultado principal de este capítulo.

### Teorema 5.5.1

Sea  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  ( $1 \leq d \leq 3$ ) un dominio acotado y supongamos que se satisfacen (H1)–(H3). Entonces se verifican las siguientes afirmaciones:

- (i) Existe  $T > 0$  tal que el problema de tipo mixto (5.1), (5.4) asociado a la ecuación de Schrödinger no lineal SLC admite una única solución  $\psi \in X_\delta^T$  en  $[0, T]$ .
- (ii) La dinámica asociada a dicho problema es equivalente a aquella asociada al problema relativo a la ecuación (5.10) sujeta a las condiciones (5.11), en el sentido de que existe un homeomorfismo de  $C([0, T], H_\delta^2(\Omega))$  que conserva la densidad local  $n = |\psi|^2$  y lleva soluciones de (5.1), (5.4) en soluciones de (5.10)–(5.11).

DEMOSTRACIÓN:

Consideramos  $\psi_I$  y  $\psi_B$  las condiciones inicial y de contorno de nuestro problema y definimos  $\phi_I := \mathcal{G}(\psi_I)$  y  $\phi_B := \mathcal{G}(\psi_B)$ , donde  $\mathcal{G}$  es la transformación definida en (5.9). Usando la Proposición 5.3.1 tenemos que  $\phi_I \in H_\delta^2(\Omega)$ , y gracias a la Observación 5.3.2 sabemos también que  $\phi_B \in H_\delta^{3/2}(\partial\Omega)$ . Entonces las hipótesis del Teorema 5.4.1 son satisfechas, luego existe  $T > 0$  y  $\phi \in X_\delta^T$  que es la única solución de (5.10)–(5.11) en  $[0, T]$ . Aplicando a continuación el Teorema 5.3.3 se tiene que  $\psi = \mathcal{G}^{-1}(\phi) \in X_\delta^T$  es la única solución del problema (5.1), (5.4) en  $[0, T]$ , lo que demuestra el apartado (i). La segunda afirmación es una consecuencia directa de la Proposición 5.3.1 y del Teorema 5.3.3, donde el homeomorfismo que se menciona es la propia  $\mathcal{G}$ . Esto concluye la demostración.  $\square$

Aunque el teorema 5.5.1 está diseñado para dimensión 3, también se puede establecer de forma obvia para  $d = 1, 2$ . Generalizar este resultado para cualquier dimensión, sin embargo, depende de saber hacerlo con los Teoremas 5.4.1 y 5.3.3, que se fundamentan de forma inevitable en la regularidad y en la separación de cero de las funciones de onda con las que trabajamos. Estas dos condiciones, que en los casos  $1 \leq d \leq 3$  proceden de la inmersión de Sobolev  $H^2(\Omega) \hookrightarrow L^\infty(\Omega)$ , deben analizarse con mayor profundidad si pretendemos extrapolar el resultado a dimensión arbitraria.

Del mismo modo, el análisis de la prolongabilidad en tiempo o la existencia global de las soluciones de (5.1), (5.4) es, en este contexto, poco viable. Esto se debe a que la dinámica asociada al modelo SLC es demasiado compleja y en principio no se puede garantizar la ausencia de regiones de vacío, que nosotros evitamos usando (H3) y la acotación del dominio, y que en caso de generarse con la evolución temporal pueden ocasionar la formación de singularidades.

Surgen dificultades similares si tratamos de estudiar el problema de Cauchy asociado al modelo SLC en todo el espacio  $\mathbb{R}^d$ . En [107] se estudia el buen planteamiento de dicho problema para ecuaciones de tipo Doebner–Goldin ([43]) en un subconjunto denso de  $L^2(\mathbb{R}^d)$  y bajo condiciones sobre los coeficientes que dotan a la dinámica de un comportamiento parabólico. Dichas condiciones no son compatibles con las relaciones de linealización (5.5), aunque la idea fundamental, que consiste en evitar las singularidades suponiendo perfiles exponenciales, podría adaptarse a nuestro caso.



# Interpretación rigurosa y buen planteamiento local de la ecuación de Schrödinger–Langevin

---

La ecuación de Schrödinger–Langevin constituye uno de los modelos cuánticos disipativos más importantes y es uno de los pocos aceptados como representativo de efectos de fricción en la formulación de onda de la mecánica cuántica. La descripción matemática precisa del término no lineal que genera dichos efectos, sin embargo, resulta genuinamente controvertida, ya que involucra el conocimiento explícito del argumento  $S$  de la función de onda  $\psi$ . Es tan claro que la aplicación  $\psi \mapsto S$  es multivaluada como que la elección concreta del valor de dicha función no debe alterar la dinámica observable asociada a  $\psi$ , lo que causa irremediamente el mal planteamiento de cualquier problema asociado a la ecuación de Schrödinger–Langevin. Sin embargo, los observables asociados a este modelo describen de forma fiel las propiedades físicas deseables en un fenómeno con fricción, lo que nos lleva a buscar una reescritura del término de fricción en la ecuación de Schrödinger en lugar de descartar una descripción de estas características. Con dicho propósito vamos a proponer este capítulo una formulación de la ecuación de Schrödinger–Langevin basada en la derivación original del mismo (véase [73]), que desarrolla idéntica dinámica observable y evita cualquier ambigüedad en su escritura. A partir de ahí, probaremos el buen planteamiento del problema de tipo mixto sobre dominios acotados asociado a nuestra reformulación del modelo, admitiendo el efecto de un potencial (no lineal) genérico  $\Theta$  y en el marco funcional establecido en capítulos anteriores. En la última sección aplicaremos este resultado, sacando partido de la libertad de  $\Theta$ , para resolver el problema tipo mixto asociado a un modelo de Schrödinger–Poisson con entalpía equivalente a algunos sistemas hidrodinámicos cuánticos que aparecen en el estudio de dispositivos semiconductores [71].

## 6.1. Sobre la interpretación unívoca de la ecuación de Schrödinger–Langevin

El modelado de problemas con disipación en mecánica cuántica plantea numerosas dificultades, ya que algunas ecuaciones disipativas clásicas no se pueden cuantizar según los procedimientos usuales. Un ejemplo relevante en esta dirección está constituido por la ecuación de Langevin, que describe el movimiento browniano de una partícula clásica suspendida en un fluido y no se puede reescribir en términos de una función hamiltoniana o lagrangiana adecuada. No está claro, por tanto, qué proceso puede conducir a una representación cuántica de dicho comportamiento observable. En la interpretación de onda, una de las leyes de evolución mayormente aceptadas como ecuación de Schrödinger–Langevin fue la propuesta por Kostin [73] a principios de los años setenta, que en el sistema de unidades establecido en el Capítulo 3 viene dada por

$$i\partial_t\psi = -\frac{1}{2}\Delta\psi + V\psi + V_R(t)\psi + \lambda V_L\psi, \quad (6.1)$$

donde  $\psi = \psi(t, x)$  es la función de onda,  $\lambda > 0$  es el coeficiente de fricción,  $V$  es el potencial externo y  $V_R$  es un potencial aleatorio que representa la interacción del sistema cuántico con el entorno y depende solo del tiempo. Este modelo surge al añadir a la ecuación de Schrödinger un potencial efectivo  $\lambda V_L\psi$  para incorporar los efectos relevantes de la dinámica de Langevin, en el sentido de que los valores de expectación de los operadores posición y momento asociados al estado  $\psi$  evolucionen según dicha ley. De este modo se llega al siguiente término no lineal de fricción

$$V_L(\psi) = S - \langle S \rangle, \quad (6.2)$$

donde  $S$  representa una función argumento de  $\psi$ ,

$$S(t, x) = \frac{1}{2i} \log \left( \frac{\psi(t, x)}{\bar{\psi}(t, x)} \right),$$

$\log(z)$  y  $\bar{z}$  denotan respectivamente el logaritmo neperiano y el conjugado del número complejo  $z$ , y donde  $\langle S \rangle = \langle S \rangle(t)$  es el valor esperado de  $S$  en el estado  $\psi$ , definido como

$$\langle S \rangle(t) = \frac{1}{\|\psi\|_{L^2}^2} \int_{\Omega} |\psi(t, x)|^2 S(t, x) dx. \quad (6.3)$$

que realmente no aporta información física al sistema, por lo que es usual eliminarlo de la ecuación (6.1) usando la transformación Gauge

$$\psi \mapsto \psi e^{i\nu(t)}, \quad \nu(t) = - \int_0^t e^{-\lambda(t-\tau)} \langle S \rangle(\tau) d\tau.$$

De esta manera, el propio Kostin desecha la forma original de la ecuación en favor de

$$i\partial_t\psi = -\frac{1}{2}\Delta\psi + V\psi + V_R(t)\psi + \lambda S\psi, \quad (6.4)$$

y prueba en [74] que dicha ecuación sufre disipación de energía. Posteriormente, el modelo (6.4) y diversas generalizaciones suyas han sido explorados en la literatura. En el Capítulo 2, por ejemplo, hemos obtenido el término de Kostin describiendo los efectos de fricción en un modelo que emula la dinámica de WFP. Además, el estudio de la ecuación (6.4) adquiere una relevancia fundamental debido a su equivalencia formal con los sistemas hidrodinámicos y de flujo potencial cuánticos con fricción ([7, 71, 76, 90], por ejemplo), que son modelos ampliamente aceptados cuando se considera la presencia de efectos cuánticos en dispositivos semiconductores [70]. Esta equivalencia se basa en la descomposición módulo–argumento de la función de onda (descomposición de Madelung [85] o perfil WKB),

$$\psi(t, x) = |\psi(t, x)| \exp \{iS(t, x)\} , \quad (6.5)$$

que en general no es posible de materializar ya que en zonas de vacío (donde  $|\psi| = 0$ ) pierde sentido (no se puede definir el argumento de cero). En [7] se calculan soluciones débiles del sistema hidrodinámico a nivel de las densidades local y de corriente, lo cual les permite admitir regiones con densidad nula y evitar el cálculo explícito de  $S$ . En el Capítulo 4, sin embargo, demostramos que para una función compleja  $\psi$  la igualdad (6.5) implica que  $\nabla S = \text{Im}(\nabla\psi/\psi)$ , campo vectorial irrotacional que admite potenciales escalares, por lo que es suficiente que la distribución  $\text{Im}(\nabla\psi/\psi)$  tenga regularidad  $H^{k-1}$  para obtener una familia de argumentos en  $H^k$ , donde  $k$  es cualquier entero arbitrario.

En todo caso, la ecuación (6.4) está mal definida incluso en los casos donde se pueda obtener de alguna manera  $S(\psi)$  verificando (6.5). Desde el punto de vista matemático es claro que la correspondencia  $\psi \mapsto S(\psi)$  es multivaluada, lo que hace necesario disponer de un criterio objetivo y *a priori* de selección del potencial  $S$ . En [71] se resuelve esta ambigüedad para el problema de Dirichlet en un dominio acotado  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  ( $1 \leq d \leq 3$ ), imponiendo como hipótesis la existencia de una función argumento  $S_I$  para la condición inicial  $\psi_I$  y resolviendo el siguiente problema de valores en la frontera para cada tiempo:

$$\Delta S(t) = \text{div} \left\{ \text{Im} \left( \frac{\nabla\psi(t)}{\psi(t)} \right) \right\} \quad \text{en } \Omega, \quad (6.6)$$

$$S(t) = S_B \quad \text{en } \partial\Omega. \quad (6.7)$$

Este sistema se obtiene como consecuencia de (6.5) si admitimos que el valor de la función  $S$  en la frontera del dominio está determinado en todo tiempo por  $S_B := S_I|_{\partial\Omega}$ , condición que no resulta muy restrictiva pues es consistente con las condiciones de Dirichlet habituales para  $\psi$ . Bajo esta interpretación de  $S$  la ecuación (6.4) tiene solución única en espacios de funciones separadas de cero, y dichas soluciones permiten resolver los sistemas hidrodinámicos cuánticos con fricción asociados a (6.4). Este criterio no resulta plenamente satisfactorio, no obstante, ya que la ecuación (6.4) con  $S$  obtenida de esta manera depende de  $S_I$ . En efecto, si consideramos como argumento de la condición inicial  $S'_I = S_I + 2\pi\hbar l$ , con  $l \in \mathbb{Z}$  arbitrario, en lugar de  $S_I$  y nos restringimos a la frontera obtenemos  $S'_B := S'_I|_{\partial\Omega}$ , cambiando de esta manera los valores de  $S$  en la frontera del dominio, lo que implica que una elección del argumento inicial altera la definición del término no lineal

en la ecuación de Schrödinger y por tanto la propia ecuación, característica esta que resulta poco deseable porque afecta a la dinámica observable del modelo.

Por otra parte, además de la ambigüedad que conlleva el tratamiento matemático riguroso de (6.4), existe otra razón que convierte dicho modelo en inadmisibile desde un enfoque puramente físico. Se trata de que no es invariante ante cambios de fase constantes y globales, propiedad esencial en cualquier modelo que describa un comportamiento cuántico, ya que  $\psi$  y  $\phi = e^{i\nu}\psi$  representan el mismo estado para cualquier  $\nu \in \mathbb{R}$ , y ninguna ecuación de Schrödinger “admisibile” debe distinguir entre ambas funciones de onda. Sin embargo, si  $\psi$  es solución de (6.4), entonces  $\phi = e^{i\nu}\psi$  no puede ser solución de la misma ecuación para ningún  $\nu \neq 0$ , ya que  $S(\phi) = S(\psi) + \nu \neq S(\psi)$ . Como consecuencia debemos descartar (6.4) como ecuación de Schrödinger–Langevin, ya que presenta serias ambigüedades en su formulación y describe distintas dinámicas para estados idénticos. No obstante, sería deseable encontrar un modelo que mantuviese el mismo comportamiento observable. Es por ello que proponemos buscar una reinterpretación de la descripción que ofrece Kostin evitando las dificultades que supone trabajar con el potencial no lineal  $S$ . Con este propósito podemos aprovechar una propiedad muy sencilla: si  $\psi$  es una función compleja (regular) y  $S, S'$  satisfacen la relación de Madelung (6.5), entonces  $S - \langle S \rangle = S' - \langle S' \rangle$  y la aplicación  $\psi \mapsto V_L(\psi)$ , donde  $V_L$  viene dado por (6.2), está unívocamente determinada en consecuencia (a pesar de que  $S$  no lo está). Por tanto, la formulación original (6.1) con potencial no lineal  $\lambda V_L$  en lugar de  $\lambda S$  evita la ambigüedad en la definición de l término de fricción y además es invariante ante cambios de fase constantes y globales, ya que para cualquier función compleja  $\psi$  y  $\nu \in \mathbb{R}$  arbitrario se tiene que  $V_L(\psi) = V_L(\psi e^{i\nu})$ . Como consecuencia, (6.1) resulta más apropiada que su versión simplificada (6.4), tanto para su interpretabilidad física como para su tratamiento matemático. Estudiaremos, por tanto, el buen planteamiento de problemas asociados a aquel modelo en dominios acotados y bajo condiciones de separación de cero, admitiendo efectos de autointeracción e influencias de un potencial prefijado. Concretamente consideramos la ecuación de Schrödinger–Langevin generalizada (que denotaremos por SLG)

$$i\partial_t \psi = -\frac{1}{2}\Delta \psi + \Theta \psi + \lambda V_L \psi, \quad (6.8)$$

donde  $\lambda V_L$  es el término de fricción descrito en (6.2) y  $\Theta$  es un potencial efectivo, en principio por determinar, que describe los efectos de una fuerza externa sobre el sistema o de la autointeracción (posiblemente no lineal) que surge eventualmente como consecuencia de la influencia del entorno o de un potencial poissoniano (por ejemplo, el potencial electrostático de Hartree). En particular, puede contener los efectos del potencial  $V_R$  en el modelo de Kostin. En la sección siguiente estudiaremos la existencia y unicidad de solución local para el problema de Cauchy con condiciones de tipo Dirichlet en la frontera

$$\psi(0) = \psi_I, \quad \psi(t)|_{\partial\Omega} = \psi_B. \quad (6.9)$$

El marco funcional en que nos moveremos se basa en las siguientes hipótesis: donde  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  es un dominio (abierto conexo) con  $1 \leq d \leq 3$  y vamos a imponer las

siguientes hipótesis

- (H1)  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  ( $1 \leq d \leq 3$ ) es acotado, simplemente conexo con frontera de clase  $C^2$ .
- (H2)  $\psi_I \in H^2(\Omega)$ ,  $\psi_B \in H^{3/2}(\partial\Omega)$ , y  $\psi_I|_{\partial\Omega} = \psi_B$ .
- (H3) Existe  $\delta > 0$  tal que  
 $\inf\text{-es}\{|\psi_I(x)| : x \in \Omega\} > \delta$ ,  $\inf\text{-es}\{|\psi_B(x)| : x \in \partial\Omega\} > \delta$ .
- (H4)  $\Theta : H_\delta^2(\Omega) \rightarrow H^2(\Omega)$  es localmente lipschitziana y existe  $\Theta_B \in H^{3/2}(\partial\Omega)$  tal que  $\Theta(\psi)|_{\partial\Omega} = \Theta_B$  siempre que  $\psi|_{\partial\Omega} = \psi_B$ .

Recordamos que  $H_\delta^2(\Omega)$  denota el espacio de funciones de  $H^2(\Omega)$  de módulo mayor que  $\delta$  con el que venimos trabajando. La hipótesis de conexión simple aparece de forma natural por la interpretación del término de fricción  $V_L$  dada en (6.2), que conduce en principio al estudio de existencia de argumento para la función de onda. En este sentido heredamos la interpretación contemplada en el Capítulo 4 y la independencia espacial de  $\langle S \rangle$  para estudiar la ecuación

$$\nabla V_L = \text{Im} \left( \frac{\nabla \psi}{\psi} \right), \quad (6.10)$$

que es una consecuencia de (6.2) y (6.5) y que tendrá soluciones (véase[3]) siempre que supongamos que  $\Omega$  es simplemente conexo (en la primera sección del Capítulo 4 proporcionamos un ejemplo de función compleja regular que no puede tener argumentos en un anillo 2-dimensional). Además, si fijamos previamente el valor medio de dichas soluciones en  $\Omega$ , podemos conseguir una propiedad de dependencia continua de las mismas respecto de la función de onda [4], lo que nos permite aprovechar (6.2) para establecer la condición de normalización

$$\langle V_L \rangle = 0 \quad (6.11)$$

y así definir de forma unívoca el operador  $V_L$  con la regularidad apropiada para que el sistema (6.8)–(6.11) disfrute de existencia y unicidad de solución, evitando la dependencia de una elección concreta de argumento para la condición inicial. El resultado principal de este capítulo es el teorema de existencia de solución fuerte para el problema (6.8)–(6.11), que enunciaremos y demostraremos en la siguiente sección, estableciendo la existencia del potencial no lineal  $V_L$  con las propiedades que hemos descrito. Utilizaremos una técnica de punto fijo, teniendo en cuenta que el comportamiento de  $V_L$  no es conocido (ni se puede establecer *a priori*) en la frontera del dominio  $\Omega$ , lo que impide utilizar el carácter isométrico del grupo de Schrödinger. Una vez establecido este resultado, podemos sacar partido de la generalidad del término  $\Theta$  para resolver el problema de tipo mixto con condiciones de Dirichlet asociado al modelo de Schrödinger–Poisson con entalpía para semiconductores [70, 71, 76], que precisamos en la tercera y última sección.

## 6.2. Existencia y unicidad de solución local para la ecuación de Schrödinger–Langevin generalizada

La interpretación del término de fricción que hemos proporcionado nos permite trabajar con una versión unívoca de la ecuación de Schrödinger–Langevin, de forma que (6.1) admite un problema de tipo mixto asociado que disfruta de existencia y unicidad de solución bajo las hipótesis (H1)–(H4). Este hecho constituye el resultado principal del capítulo, el cual demostramos admitiendo efectos de interacción muy generales.

### Teorema 6.2.1

Sean  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  ( $1 \leq d \leq 3$ ),  $\lambda > 0$  y supongamos que las hipótesis (H1)–(H4) son satisfechas. Entonces existe  $T > 0$  y una única solución  $(\psi, \Theta, V_L)$  del problema (6.8)–(6.11) en  $[0, T]$ , donde  $\Theta = \Theta(\psi)$  y se verifica

$$\psi \in X_\delta^T, \quad V_L \in X^T, \quad \Theta \in C([0, T], H^2(\Omega)).$$

Para probar este teorema utilizando un método de punto fijo debemos establecer la existencia de un operador  $V_L$  unívoco y continuo que nos proporcione el término de fricción en la ecuación. Como señalamos anteriormente, lo haremos buscando una solución de (6.10) sujeta a la condición de normalización (6.11), planteamiento adecuado para aplicar los resultados desarrollados en el Capítulo 4.

### Lema 6.2.2

Sean  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  ( $1 \leq d \leq 3$ ) un dominio acotado, simplemente conexo y con frontera lipschitziana y  $T, \delta > 0$ . Entonces existe una aplicación  $V_L : H_\delta^2(\Omega) \rightarrow H^2(\Omega)$  tal que:

(i) Para cualquier  $\psi \in H_\delta^2(\Omega)$ ,  $V_L(\psi)$  es solución de (6.10) con  $\langle V_L(\psi) \rangle = 0$ .

(ii) Para cualquier  $M > 0$  existe  $C(\delta, \Omega, M) > 0$  tal que

$$\begin{aligned} \|V_L(\psi) - V_L(\varphi)\|_{H^2} &\leq C \|\psi - \varphi\|_{H^2}, \\ \|V_L(\psi) - V_L(\varphi)\|_{L^2} &\leq C \|\psi - \varphi\|_{L^2}, \end{aligned}$$

donde  $\psi, \varphi \in H_\delta^2(\Omega)$  son tales que  $\|\psi\|_{H^2}, \|\varphi\|_{H^2} \leq M$ .

Además, si  $S \in H^2(\Omega)$  es un argumento de  $\psi$ , entonces  $V_L(\psi)$  verifica (6.2). En particular

$$V_L(\psi) = V_L(e^{i\nu} \psi) \quad \text{para cualquier } \nu \in \mathbb{R}. \quad (6.12)$$

### DEMOSTRACIÓN:

El Lema 4.2.1 garantiza que  $\nabla\psi/\psi \in H^1(\Omega)$  para cualquier  $\psi \in H_\delta^2(\Omega)$ , por lo

que podemos aplicar el Teorema 4.2.2 con  $\mu = 0$  y  $k = 2$  y obtener una única  $S_\psi \in H^2(\Omega)$  tal que

$$\nabla S_\psi = \operatorname{Im} \left( \frac{\nabla \psi}{\psi} \right) \quad \text{y} \quad \int_{\Omega} S_\psi(x) \, dx = 0.$$

Dicha  $S_\psi$  nos permite definir

$$V_L(\psi)(x) := S_\psi(x) - \langle S_\psi \rangle \quad \text{c.t. } x \in \Omega,$$

de manera que  $V_L(\psi) \in H^2(\Omega)$  y se verifica (i). Para probar (ii), sea  $M > 0$  y denotemos  $M_S = \sup \{ \|S_\psi\|_{H^2} : \psi \in H^2(\Omega), \|\psi\|_{H^2} \leq M \} < \infty$  y  $K(\Omega, M)$  el máximo de entre las constantes proporcionadas por la inmersión de Sobolev  $H^2(\Omega) \hookrightarrow L^\infty(\Omega)$ , el Lema 4.2.1 para  $\nabla \psi/\psi = J/n$  y el Teorema 4.2.2 con  $k = 0, 2$ . Entonces, para  $\psi, \varphi \in H_\delta^2(\Omega)$  tales que  $\|\psi\|_{H^2}, \|\varphi\|_{H^2} \leq M$  podemos mayorar la diferencia  $|\langle S_\psi \rangle - \langle S_\varphi \rangle|$  por

$$\int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{\|\psi\|_{L^2}^2} |\psi(x)|^2 S_\psi(x) - |\varphi(x)|^2 S_\varphi(x) \right\} + \left| \frac{1}{\|\psi\|_{L^2}^2} - \frac{1}{\|\varphi\|_{L^2}^2} \right| |\psi(x)|^2 |S_\psi(x)| \, dx.$$

Como  $|\psi(x)|, |\varphi(x)| > \delta$ , el primer sumando está acotado por

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\delta^2 |\Omega|} \left( \int_{\Omega} \{ |\psi(x)|^2 |S_\psi(x) - S_\varphi(x)| + ||\psi(x)|^2 - |\varphi(x)|^2 | |S_\varphi(x)| \} \, dx \right) \\ & \leq \frac{1}{\delta^2 |\Omega|} (\|\psi\|_{L^\infty}^2 \|S_\psi - S_\varphi\|_{L^2} + (\|\psi\|_{L^\infty} + \|\varphi\|_{L^\infty}) \|\psi - \varphi\|_{L^2} \|S_\varphi\|_{L^\infty}), \end{aligned}$$

y aplicando el Teorema 4.2.2 y el Lema 4.2.1 obtenemos  $C_1(\delta, \Omega, M) > 0$  tal que

$$\frac{1}{\|\psi\|_{L^2}^2} \int_{\Omega} |\psi(x)|^2 S_\psi(x) - |\varphi(x)|^2 S_\varphi(x) \, dx \leq C_1 \|\psi - \varphi\|_{L^2}.$$

De forma análoga, el segundo sumando está controlado por

$$\frac{1}{\|\psi\|_{L^2}^2 \|\varphi\|_{L^2}^2} \left| \|\varphi\|_{L^2}^2 - \|\psi\|_{L^2}^2 \right| |\Omega| \|\psi\|_{L^\infty}^2 \|S_\psi\|_{L^\infty} \leq C_2 \|\psi - \varphi\|_{L^2},$$

donde  $C_2 = C_2(\delta, \Omega, M) > 0$ . De esta manera tenemos que

$$|\langle S_\psi \rangle - \langle S_\varphi \rangle| \leq (C_1 + C_2) \|\psi - \varphi\|_{L^2}, \quad (6.13)$$

donde  $C := K + \sqrt{|\Omega|}(C_1 + C_2)$  es la constante que verifica (ii). Para comprobarlo basta observar que  $\langle S_\psi \rangle$  y  $\langle S_\varphi \rangle$  no dependen de  $x$ , por lo que la estimación

$$\|V_L(\psi) - V_L(\varphi)\| \leq \|S_\psi - S_\varphi\| + \sqrt{|\Omega|} |\langle S_\psi \rangle - \langle S_\varphi \rangle|,$$

es válida para  $\|\cdot\| = \|\cdot\|_{L^2}$  y  $\|\cdot\| = \|\cdot\|_{H^2}$ . Además, si  $S \in H^2(\Omega)$  es un argumento de  $\psi$ , basta con tomar derivadas y partes imaginarias en la fórmula de Madelung

$\psi = |\psi|e^{iS}$  y tomar parte imaginaria para obtener que  $\nabla S = \text{Im}(\nabla\psi/\psi)$ . Por tanto, si consideramos  $\sigma := S - \langle S \rangle - V_L(\psi)$ , es claro que  $\nabla\sigma = 0$  y  $\langle\sigma\rangle = 0$ , por lo que  $\sigma$  es idénticamente nula y obtenemos (6.2). En particular, para cualquier  $\nu \in \mathbb{R}$  se tiene que  $S + \nu$  es un argumento de  $\psi e^{i\nu}$  y

$$V_L(\psi e^{i\nu}) = S + \nu - \langle S \rangle - \langle \nu \rangle = S - \langle S \rangle = V_L(\psi),$$

lo que concluye la prueba.  $\square$

**OBSERVACIÓN 6.2.3** *Con el objeto de dar una interpretación de la dinámica de Langevin cuántica tan solo en términos de la función de onda, en este capítulo vamos a escribir todos los cálculos en función de  $\psi$  y evitar la nomenclatura dependiente de  $n$  y  $J$  que venimos utilizando hasta ahora. Sin embargo, la fórmula (6.12) deja de manifiesto que  $V_L = V_L[n, J]$  (véase la Observación 4.3.5). En particular, es factible aplicar el Teorema 4.3.2 a (6.1) (algo que no podemos hacer con (6.4)) para obtener regularidad temporal de la propia  $V_L$ .*

La condición de frontera de tipo Dirichlet prescrita para  $\psi$  implica que su argumento ha de estar determinado en  $\partial\Omega$  en todo tiempo, al menos salvo un múltiplo entero de  $2\pi$ . Esto causa que el valor de  $V_L$  en la frontera no sea constante a lo largo de la evolución temporal de la función de onda y no se pueda determinar. Como el grupo de Schrödinger  $\{e^{\frac{i}{2}\Delta t}\}_{t \in \mathbb{R}}$  establece una isometría del dominio  $\mathcal{D} = H_0^1(\Omega) \cap H^2(\Omega)$  para cada  $t \in \mathbb{R}$  que no es una isometría de  $H^2(\Omega)$ , necesitamos una estimación en norma  $\|\cdot\|_{H^2}$  de dicho grupo para trabajar con la formulación integral asociada a (6.1). La obtendremos gracias a la regularidad de las soluciones del problema elíptico general (véase el Lema 1.2.2).

**Lema 6.2.4**

Sea  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  un dominio acotado con frontera de clase  $C^2$ . Entonces existe  $C(\Omega) > 0$  tal que

$$\left\| e^{\frac{i}{2}\Delta t} g \right\|_{H^2} \leq C \|g\|_{H^2} \quad \forall t \in \mathbb{R},$$

para cualquier  $g \in H^2(\Omega)$ .

DEMOSTRACIÓN:

Seleccionando un representante continuo de  $g$  en  $\overline{\Omega}$  podemos obtener una única  $\widetilde{g}_B \in C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$  armónica tal que  $\widetilde{g}_B - g \in \mathcal{D}$ , en virtud del Lema 1.2.1. Aplicando el Lema 1.2.2 a  $f = \Delta g$  obtenemos  $K_1(\Omega) > 0$  tal que  $\|g - \widetilde{g}_B\|_{H^2} \leq K_1 \|\Delta g\|_{L^2}$ , luego

$$\|\widetilde{g}_B\|_{H^2} \leq (K_1 + 1) \|g\|_{H^2}. \quad (6.14)$$

Definimos  $C := 2K_1 + 3$  y

$$\psi(t) := \widetilde{g}_B + \varphi(t), \quad \text{con } \varphi(t) = e^{\frac{i}{2}\Delta t}(g - \widetilde{g}_B) \quad \forall t \in \mathbb{R}. \quad (6.15)$$

Para cualquier  $t \in \mathbb{R}$  se tiene que  $e^{\frac{i}{2}\Delta t}$  es una isometría del dominio  $\mathcal{D}$ , luego  $\|\psi(t)\|_{H^2} \leq \|\widetilde{g}_B\|_{H^2} + \|g - \widetilde{g}_B\|_{H^2}$ , lo que implica

$$\|\psi(t)\|_{H^2} \leq C \|g\|_{H^2} \quad \forall t \in \mathbb{R} \quad (6.16)$$

en virtud de (6.14). Para concluir la prueba del lema es suficiente observar que  $\psi = u$ , donde  $u(t) := e^{\frac{i}{2}\Delta t} g$  para cualquier  $t \in \mathbb{R}$  real. Con este objeto aplicamos el Lema 1.2.7 con  $f = 0$ , que garantiza que  $u$  es la única solución de

$$\begin{aligned} u &\in C([0, T], L^2(\Omega)) \cap C^1([0, T], \mathcal{D}'), \\ i\partial_t u + \frac{1}{2}\overline{\Delta}u &= 0, \\ u(0) &= g, \end{aligned} \tag{6.17}$$

donde  $\overline{\Delta}$  es el operador con dominio  $L^2(\Omega)$  que extiende  $\Delta$ . Por otra parte, aplicando nuevamente el Lema 1.2.7 con  $f = 0$  y condición inicial  $g - \widetilde{g}_B$  junto con (6.15) obtenemos que  $\varphi$  es la única solución de

$$\begin{aligned} \varphi &\in C([0, T], \mathcal{D}) \cap C^1([0, T], L^2(\Omega)), \\ i\partial_t \varphi + \frac{1}{2}\Delta\varphi &= 0, \\ \varphi(0) &= g - \widetilde{g}_B. \end{aligned} \tag{6.18}$$

Por tanto,  $\psi \in C([0, T], \mathcal{D}) \cap C^1([0, T], L^2(\Omega)) \subset C([0, T], L^2(\Omega)) \cap C^1([0, T], \mathcal{D}')$  satisface

$$i\partial_t \psi + \frac{1}{2}\overline{\Delta}\psi = i\partial_t(\widetilde{g}_B + \varphi) + \frac{1}{2}\overline{\Delta}(\widetilde{g}_B + \varphi) = \frac{1}{2}\overline{\Delta}\widetilde{g}_B = 0,$$

para lo cual hemos empleado el Lema 1.2.5. Como  $\psi(0) = g$ , la unicidad en (6.17) nos dice que  $\psi = u$ , lo que concluye la prueba gracias a (6.16).  $\square$

Estos dos lemas nos ayudan a construir una sucesión en un subconjunto apropiado de  $C([0, T], H_\delta^2(\Omega))$  con constante de Lipschitz uniforme, cuyo límite nos permitirá definir la solución de nuestro problema.

DEMOSTRACIÓN DEL TEOREMA 6.2.1:

Utilizamos el Teorema de compacidad de Rellich–Kondrakov para seleccionar un representante continuo de  $\psi_B = \psi_I|_{\partial\Omega}$ , por lo que existe una única  $\widetilde{\psi}_B \in C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$  armónica en  $\Omega$  e igual que  $\psi_B$  en  $\partial\Omega$ . Utilizando (H4) podemos obtener, de manera análoga, la única extensión armónica  $\widetilde{\Theta}_B \in C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$  de  $\Theta_B$  a todo  $\Omega$  y definir de ese modo

$$Z(t) = \widetilde{\psi}_B + e^{\frac{i}{2}\Delta t}(\psi_I - \widetilde{\psi}_B) - i \int_0^t e^{\frac{i}{2}\Delta(t-\tau)} \widetilde{\Theta}_B \widetilde{\psi}_B \, d\tau \quad \forall t \in \mathbb{R}.$$

Como la aplicación  $t \mapsto \widetilde{\Theta}_B \widetilde{\psi}_B$  es constante y por tanto pertenece a  $W^{1,1}(\mathbb{R}, L^2(\Omega))$ , podemos aplicar el Lema 1.2.7 para obtener que  $Z$  es la única solución del problema

$$\begin{aligned} Z &\in C(\mathbb{R}, H^2(\Omega)) \cap C^1(\mathbb{R}, L^2(\Omega)), \\ i\partial_t Z + \frac{1}{2}\Delta Z - \widetilde{\Theta}_B \widetilde{\psi}_B &= 0, \\ Z(0) = \psi_I, \quad Z(t)|_{\partial\Omega} = \psi_B, \quad t &\in \mathbb{R}. \end{aligned} \tag{6.19}$$

$Z$  nos permite definir para  $r, T > 0$  el conjunto

$$Y_{r,T} := \{\psi \in C([0, T], H^2(\Omega)) : \|\psi - Z\|_{L^\infty([0, T], H^2)} \leq r, \psi(t)|_{\partial\Omega} = \psi_B \quad \forall t \in [0, T]\},$$

que goza de las siguientes propiedades:

**Lema 6.2.5**

Bajo las hipótesis del Teorema 6.2.1 y para cualesquiera  $r, T > 0$  se tiene que  $Y_{r,T}$  es un espacio métrico completo (respecto de la norma  $\|\cdot\|_{L^\infty([0, T], H^2)}$ ). Además, existen  $r^*, T^*, C > 0$  (dependientes de  $\delta, \Omega, \psi_I, \psi_B$ ) tales que

$$(i) \quad \|Z\|_{L^\infty([0, T], H^2)} \leq C,$$

$$(ii) \quad Y_{r,T} \subset C([0, T], H_\delta^2(\Omega)),$$

para  $0 < r < r^*$  y  $0 < T < T^*$  arbitrarios.

DEMOSTRACIÓN:

Para ver que  $Y_{r,T}$  es un espacio métrico completo observamos que está contenido en  $B_r(Z)$ , la bola de centro  $Z$  y radio  $r$  respecto de la norma  $\|\cdot\|_{L^\infty([0, T], H^2)}$ , que es completa. Por consiguiente basta comprobar que  $Y_{r,T}$  es cerrado en dicha bola. Para ello consideramos la aplicación  $\mathcal{B} : C([0, T], H^2(\Omega)) \rightarrow C([0, T], H^2(\Omega))$  definida por

$$\mathcal{B}(\psi)(t) := \psi(t) - \widetilde{\psi}_B, \quad \forall t \in [0, T] \quad \text{y} \quad \psi \in C([0, T], H^2(\Omega)),$$

que es continua y permite escribir  $Y_{r,T}$  de la siguiente forma:

$$Y_{r,T} = B_r(Z) \cap \mathcal{B}^{-1}(C([0, T], \mathcal{D})).$$

Como  $\mathcal{D}$  es cerrado en  $H^2(\Omega)$ , se tiene que  $Y_{r,T}$  es cerrado y en consecuencia completo respecto de la norma  $\|\cdot\|_{L^\infty([0, T], H^2)}$ .

Para la segunda parte sea

$$\begin{aligned} m_I &= \inf\text{-es}\{|\psi_I(x)| : x \in \Omega\}, & m_B &= \inf\text{-es}\{|\psi_B(x)| : x \in \partial\Omega\}, \\ m &= \min\{m_I, m_B\}. \end{aligned}$$

Como  $m > \delta$ , existe  $\varepsilon(\delta, \Omega, \psi_I, \psi_B) > 0$  tal que  $\varepsilon < m - \delta$ . Definimos  $r^* := \frac{\varepsilon}{2K_1}$ , donde  $K_1$  es la constante de la inmersión de Sobolev  $H^2(\Omega) \hookrightarrow L^\infty(\Omega)$ . Nos valemos, además, de la continuidad temporal de  $Z$  para garantizar la existencia de  $T^*(\delta, \Omega, \psi_I, \psi_B) > 0$  tal que

$$\|Z(t) - \psi_I\|_{H^2} \leq r^* \quad \forall 0 \leq t < T^*, \quad (6.20)$$

que permite definir  $C := r^* + \|\psi_I\|_{H^2}$ , constante que verifica (i). Falta verificar la inclusión  $Y_{r,T} \subset C([0, T], H_\delta^2(\Omega))$  con  $0 < r < r^*$  y  $0 < T < T^*$  arbitrarios, y para ello es suficiente notar que cada  $\psi \in B_r(Z)$  pertenece a  $H_\delta^2(\Omega)$ . Lo comprobamos:

$$\|\psi(t) - \psi_I\|_{H^2} \leq \|\psi(t) - Z(t)\|_{H^2} + \|Z(t) - \psi_I\|_{H^2} < 2r^* = \frac{\varepsilon}{K_1}$$

para cualquier  $t \in [0, T]$ , luego  $\|\psi - \psi_I\|_{L^\infty([0, T]; H^2)} < \frac{\varepsilon}{K_1}$  y la inmersión de Sobolev  $H^2(\Omega) \hookrightarrow L^\infty(\Omega)$  nos permite establecer que  $|\psi_I(x)| - |\psi(t, x)| \leq |\psi_I(x) - \psi(t, x)| < \varepsilon$  c.t.  $x \in \Omega$  y para cada  $t \in [0, T]$ , por lo que  $|\psi(t, x)| > |\psi_I(x)| - \varepsilon > m_0 - m + \delta \geq \delta$  y entonces  $\psi \in C([0, T]; H_\delta^2(\Omega))$ , lo que concluye la prueba.  $\square$

Tomamos  $r^*, T^*, M_1 > 0$  las constantes que nos proporciona el Lema 6.2.5 y fijamos  $0 < r < r^*$ . Para  $M := r + 2M_1 > 0$  se tiene que  $\|\psi\|_{L^\infty([0, T]; H^2)} \leq M$  para cualquier  $\psi \in Y_{r, T}$ . El Lema 6.2.2 y la hipótesis (H4) nos proporcionan  $K_{V_L}(M), K_\Theta(M) > 0$  las constantes de lipschitzianidad para  $V_L$  y  $\Theta$ , respectivamente, y

$$M_{V_L} = \sup\{\|V_L(\psi)\|_{H^2} : \|\psi\|_{H^2} \leq M\} \quad \text{y} \quad M_\Theta = \sup\{\|\Theta(\psi)\|_{H^2} : \|\psi\|_{H^2} \leq M\},$$

cotas en norma para los términos no lineales. Además, denotamos por  $K = K(\Omega)$  a cualquier constante asociada a las estimaciones que provienen de las inmersiones de Sobolev o del Lema 1.2.3. Sean entonces

$$T_1 = \frac{\min\{r, 1/2\}}{KM [\lambda K M_{V_L} + M_\Theta(1 + K^3)]},$$

$$T_2 = \frac{1}{2K [\lambda K (M_{V_L} + K_{V_L} M) + M_\Theta + K_\Theta M]},$$

y elegimos  $T = \min\{T^*, T_1, T_2\}$ . Vamos a construir una solución de (6.8)–(6.11) en  $[0, T]$  como límite de una sucesión de elementos de  $Y_{r, T}$ . Con este objeto definimos

$$\psi_0 := Z, \quad \psi_{k+1} := Z + \Gamma_{V_L}(\psi_k) + \Gamma_\Theta(\psi_k), \quad (6.21)$$

para cada  $k \geq 0$  entero, donde

$$\begin{aligned} \Gamma_{V_L}(\psi)(t) &:= -i\lambda \int_0^t e^{\frac{i}{2}\Delta(t-\tau)} V_L(\psi(\tau))\psi(\tau) d\tau, \\ \Gamma_\Theta(\psi)(t) &:= -i \int_0^t e^{\frac{i}{2}\Delta(t-\tau)} \Theta(\psi(\tau))\psi(\tau) d\tau, \quad \forall t \in [0, T] \end{aligned}$$

para cualquier  $\psi \in Y_{r, T}$ , y vamos a probar que la familia  $\{\psi_k\}_{k \in \mathbb{N}}$  definida en (6.21) es convergente en  $Y_{r, T}$ . Lo haremos en dos etapas:

ETAPA 1: *La sucesión  $\{\psi_k\}_{k \in \mathbb{N}}$  está contenida en  $Y_{r, T}$  y existe  $L > 0$  independiente de  $k$  tal que*

$$\|V_L(\psi_k(t))\psi_k(t) - V_L(\psi_k(s))\psi_k(s)\|_{L^2} \leq L|t - s| \quad \forall t, s \in [0, T] \quad (6.22)$$

y todo  $k \geq 0$  entero.

Para demostrar esta primera afirmación definimos

$$L := K(M_{V_L} + K_{V_L} M)L_\psi, \quad L_\psi = M \left( \frac{1}{2} + K(K^2 M_\Theta + \lambda M_{V_L} + M_\Theta) \right)$$

y razonamos por inducción.  $\psi_0 = Z \in Y_{r,T}$  de forma sencilla usando (6.19), que además implica que  $\psi_0 \in X_\delta^T$  es solución de

$$i\partial_t\psi_0 = -\frac{1}{2}\Delta\psi_0 + \widetilde{\Theta}_B\widetilde{\psi}_B.$$

Por tanto, si estimamos las extensiones armónicas como en (6.14), se tiene

$$\|\partial_t\psi_0\|_{L^2} \leq \frac{1}{2}\|\Delta\psi_0\|_{L^2} + K\|\widetilde{\Theta}_B\|_{H^2}\|\widetilde{\psi}_B\|_{H^2} \leq L_\psi$$

uniformemente en tiempo, lo que implica que  $t \mapsto \psi_0(t)$  es lipschitziana con constante  $L_\psi$ , que junto con el Lema 6.2.2 nos permite establecer la estimación

$$\|V_L(\psi_0(t))\psi_0(t) - V_L(\psi_0(s))\psi_0(s)\|_{L^2} \leq K(M_{V_L} + K_{V_L}M)L_\psi|t - s| \quad (6.23)$$

para cualesquier  $t, s \in [0, T]$ . Esto concluye la etapa 1 para  $\psi_0$ . Sea ahora  $k \geq 0$  y supongamos que  $\psi_k \in Y_{r,T}$  y satisface (6.22). Entonces la aplicación  $t \mapsto V_L(\psi_k(t))\psi_k(t)$  es lipschitziana y en particular, usando el Lema 1.2.8, está en  $W^{1,1}([0, T], L^2(\Omega))$ . Además, la hipótesis (H4) informa de que  $\Theta(\psi_k)\psi_k - \widetilde{\Theta}_B\widetilde{\psi}_B \in C([0, T], \mathcal{D})$ , por lo que aplicando el Lema 1.2.7 obtenemos que

$$\Gamma_k = \Gamma_{V_L}(\psi_k) + \Gamma_\Theta(\psi_k)$$

es la única solución de

$$\begin{aligned} \Gamma_k &\in C([0, T], \mathcal{D}) \cap C^1([0, T], L^2(\Omega)), \\ i\partial_t\Gamma_k + \frac{1}{2}\Delta\Gamma_k &= (\Theta(\psi_k)\psi_k - \widetilde{\Theta}_B\widetilde{\psi}_B) + \lambda V_L(\psi_k)\psi_k, \\ \Gamma_k(0) &= 0. \end{aligned} \quad (6.24)$$

Por tanto  $\psi_{k+1}(t)|_{\partial\Omega} = \psi_0(t)|_{\partial\Omega} = \psi_B$  o, equivalentemente,  $\psi_{k+1}(t) - \psi_B \in \mathcal{D}$  para cualquier  $t \in [0, T]$ . A continuación nos valemos del Lema 6.2.4 en  $t \in [0, T]$  arbitrario, obteniendo

$$\|\Gamma_{V_L}(\psi_k(t))\|_{H^2} \leq \lambda \int_0^t \left\| e^{\frac{i}{2}\Delta(t-\tau)} V_L(\psi_k(\tau))\psi_k(\tau) \right\|_{H^2} d\tau \leq \lambda K^2 M M_{V_L} t. \quad (6.25)$$

Por otra parte, aprovechamos que  $e^{\frac{i}{2}\Delta t}$  es una isometría sobre  $\mathcal{D}$  para establecer

$$\|\Gamma_\Theta(\psi_k(t))\|_{H^2} \leq \int_0^t \left\| \Theta(\psi_k(\tau))\psi_k(\tau) - \widetilde{\Theta}_B\widetilde{\psi}_B \right\|_{H^2} d\tau \leq KM M_\Theta(1 + K^3)t \quad (6.26)$$

para todo  $t \in [0, T]$ . Como consecuencia

$$\|\psi_{k+1} - Z\|_{L^\infty([0, T], H^2)} \leq KM [\lambda K M_{V_L} + M_\Theta(1 + K^3)] T \leq r,$$

ya que  $T < T_1$ , luego  $\psi_{k+1} \in Y_{r,T}$ . Para probar que se verifica (6.22) basta observar en (6.19) y (6.24) que  $\psi_{k+1} \in X_\delta^T$  es solución de

$$i\partial_t\psi_{k+1} + \frac{1}{2}\Delta\psi_{k+1} = \Theta(\psi_k)\psi_k + \lambda V_L(\psi_k)\psi_k,$$

de donde se desprende que

$$\|\partial_t \psi_{k+1}(t)\|_{L^2} \leq \frac{1}{2}M + KM(\lambda M_{V_L} + M_\Theta) \leq L_\psi, \quad \forall t \in [0, T].$$

Esto significa que  $L_\psi$  es una constante de Lipschitz en tiempo válida para  $\psi_{k+1}$ . Razonando como en (6.23) llegamos a

$$\|V_L(\psi_k(t))\psi_k(t) - V_L(\psi_k(s))\psi_k(s)\|_{L^2} \leq K(M_{V_L} + K_{V_L}M)L_\psi|t - s|, \quad (6.27)$$

para  $t, s \in [0, T]$  arbitrarios, luego aplicando el principio de inducción tenemos probada la etapa 1.

ETAPA 2: La sucesión  $\{\psi_k\}_{k \in \mathbb{N}}$  es de Cauchy (respecto de la norma  $\|\cdot\|_{L^\infty([0, T], H^2)}$ ) Para ello es suficiente demostrar que

$$\|\psi_{k+1} - \psi_k\|_{L^\infty([0, T], H^2)} \leq \frac{1}{2^{k+1}} \quad \forall k \geq 0, \quad (6.28)$$

ya que la propiedad de Cauchy se deduce de esta desigualdad. De nuevo razonamos por inducción. Para  $k = 0$  podemos estimar del mismo modo que en (6.25) y (6.26) y, usando que  $T < T_1$ , obtener  $\|\psi_1 - \psi_k\|_{L^\infty([0, T], H^2)} \leq \frac{1}{2}$ . Además, si  $\psi, \varphi \in Y_{r, T}$  el Lema 6.2.4 nos permite escribir

$$\|\Gamma_{V_L}(\psi(t)) - \Gamma_{V_L}(\varphi(t))\|_{H^2} \leq \lambda K^2(M_{V_L} + K_{V_L}M) \int_0^t \|\psi(\tau) - \varphi(\tau)\|_{H^2} d\tau \quad (6.29)$$

para  $t \in [0, T]$  arbitrario. Asimismo, (H4) implica

$$\|\Gamma_\Theta(\psi(t)) - \Gamma_\Theta(\varphi(t))\|_{H^2} \leq \lambda K(M_\Theta + K_\Theta M) \int_0^t \|\psi(\tau) - \varphi(\tau)\|_{H^2} d\tau \quad (6.30)$$

para todo  $t \in [0, T]$ . Por tanto, si  $k \geq 1$  se tiene

$$\|\psi_{k+1} - \psi_k\|_{L^\infty([0, T], H^2)} \leq \frac{1}{2} \|\psi_k - \psi_{k-1}\|_{L^\infty([0, T], H^2)},$$

donde hemos usado el hecho de que  $T < T_2$ . Aplicando finalmente la hipótesis de inducción obtenemos (6.28) y culminamos así la segunda etapa.

La completitud de  $Y_{r, T}$  implica entonces la existencia de límite para la sucesión  $\{\psi_k\}$ , que denotaremos  $\psi \in Y_{r, T}$  y nos proporcionará la única solución del problema (6.8)–(6.11). En primer lugar basta observar las estimaciones (6.29) y (6.30), que nos permiten pasar al límite de forma continua en (6.21) de manera que  $\psi = Z + \Gamma_{V_L}(\psi) + \Gamma_\Theta(\psi)$ . Además, si  $\psi' \in Y_{r, T}$  tiene esta propiedad, entonces

$$\|\psi(t) - \psi'(t)\|_{H^2} \leq 2T_2 \int_0^t \|\psi(\tau) - \varphi(\tau)\|_{H^2} d\tau \quad \forall t \in [0, T],$$

donde hemos recurrido a (6.29) y (6.30). El Lema de Gronwall implica que  $\psi = \psi'$  y, por tanto, existe un único punto fijo del operador  $\psi \mapsto Z + \Gamma_{V_L}(\psi) + \Gamma_\Theta(\psi)$ .

Para concluir la prueba del Teorema 6.2.1 definimos  $\Theta := \Theta(\psi)$  y  $V_L := V_L(\psi)$  y observamos que (H4) implica  $\Theta \in C([0, T], H^2(\Omega))$  y que el Lema 6.2.2 garantiza que  $V_L \in C([0, T], H^2(\Omega))$  es solución de (6.10)–(6.11). Además, si observamos que  $\psi \in Y_{r,T} \subset C([0, T], H_\delta^2(\Omega))$  verifica las condiciones iniciales y de contorno y tomamos límite en (6.22), obtenemos que  $V_L(\psi)\psi \in W^{1,1}([0, T], L^2(\Omega))$ . Por otra parte, de la condición de frontera  $\psi(t)|_{\partial\Omega} = \psi_B$  y la hipótesis (H4) se deduce que  $\Theta(\psi)\psi - \widetilde{\Theta}_B \widetilde{\psi}_B \in C([0, T], \mathcal{D})$ . Entonces el Lema 1.2.7 implica que  $\psi \in X_\delta^T$  es solución (6.8). Para completar la demostración tan solo es necesario probar que  $V_L \in X^T$ . El Teorema 4.3.2 es aplicable en este caso, por lo que existe un argumento  $S \in X^T$  de  $\psi$ . Teniendo en cuenta que  $\langle S \rangle \in C^1([0, T], \mathbb{R})$  y aplicando el lema 6.2.2, deducimos que  $V_L = S - \langle S \rangle \in X^T$ , lo que culmina la demostración.  $\square$

**OBSERVACIÓN 6.2.6** *El potencial  $\Theta$  en la ecuación (6.8) es genérico, y hemos impuesto la hipótesis (H4) en el Teorema 6.2.1 para poder seleccionar una autointeracción de tipo Poisson de forma sencilla. Esto nos ha obligado a tratar  $\Theta$  (bien conocido en  $\partial\Omega$ ) de manera distinta a  $V_L$ , que no está determinado en la frontera del dominio pero es lipschitziana respecto de  $\|\cdot\|_{L^2}$ . Si sustituimos (H4) por*

$$(H4') \quad \Theta : H_\delta^2(\Omega) \rightarrow H^2(\Omega) \text{ es localmente lipschitziana respecto de } \|\cdot\|_{L^2, H^2, s}$$

*el teorema sigue siendo válido y la demostración se simplifica, pues podríamos tratar a  $\Theta$  independientemente de los valores que pueda tomar en  $\partial\Omega$ , como sucede con el potencial  $V_L$ .*

**OBSERVACIÓN 6.2.7** *La generalización del Teorema 6.2.1 a dimensión arbitraria presenta dos dificultades. La primera es de regularidad, ya que este resultado depende fuertemente de la inmersión de Sobolev  $H^2(\Omega) \hookrightarrow L^\infty(\Omega)$ , que se verifica solamente para  $1 \leq d \leq 3$ . En dimensiones superiores, sin embargo, debemos trabajar en  $H^s(\Omega)$  con  $s > d/2$  y la extrapolación del resultado a dimensión arbitraria depende de aquella del Lema 6.2.4 (además de la adaptación de las hipótesis sobre  $\Theta$ ). La segunda viene del Teorema 4.2.2 que se obtiene gracias a la existencia de potenciales escalares de un campo irrotacional  $f$ . En este caso la condición*

$$\partial_{x_j} f_k = \partial_{x_k} f_j, \quad \forall j \neq k$$

*resuelve el problema (consúltese la Observación 4.2.4).*

**OBSERVACIÓN 6.2.8** *El problema de establecer el Teorema 6.2.1 en todo el espacio  $\mathbb{R}^d$  resulta de gran interés, ya que la técnica que utilizamos para el caso de dominios acotados resulta inoperante. La primera dificultad que encontramos reside en generalizar los Teoremas 1.2.9 y 1.2.10 a todo  $\mathbb{R}^d$ , problema que puede resolverse usando propiedades de geometría diferencial. La segunda, en apariencia más complicada, es que no está claro cómo mantener la condición  $\nabla\psi/\psi \in H^k(\mathbb{R}^d)$  a lo largo de la evolución temporal, al menos localmente. Un análisis detallado de la acción del grupo de Schrödinger sobre funciones con esa propiedad podría dar luz sobre esta cuestión.*

### 6.3. Aplicación: el sistema de Schrödinger–Langevin–Poisson con entalpía

Consideramos el siguiente sistema de Schrödinger–Poisson no lineal describiendo efectos de fricción y autointeracción que surge de forma natural en el modelado de dispositivos semiconductores gracias a su equivalencia con los sistemas hidrodinámicos cuánticos disipativos [7, 70, 71, 76, 90]:

$$i\partial_t\psi = -\frac{1}{2}\Delta\psi + V\psi + U\psi + \lambda S\psi, \quad (6.31)$$

$$\lambda_D^2\Delta V = \mathcal{C} - n, \quad (6.32)$$

$$V|_{\partial\Omega} = V_B. \quad (6.33)$$

En este sistema  $\lambda_D > 0$  es la longitud de Debye,  $\lambda > 0$  el coeficiente de fricción,  $\mathcal{C} = \mathcal{C}(x)$  la concentración de dopaje del dispositivo,  $n = |\psi|^2$  la densidad local asociada a la función de onda  $\psi$  y  $V_B$  es el valor del potencial de Poisson en la frontera del dispositivo. Además  $U$  es un potencial efectivo que representa la entalpía del sistema,

$$U(\psi) = h(n), \quad \text{donde } r h'(r) = p'(r), \quad \text{con } h(1) = 0 \quad (6.34)$$

y  $p$  es la presión, en este caso una función escalar que supondremos depende tan solo de la densidad  $n$  de forma suficientemente suave. El término  $U\psi$  en (6.31) se puede entender como el efecto observable de la mezcla de estados que se produce como consecuencia del efecto del entorno sobre el sistema. Este término está asociado a procesos térmicos que se desarrollan de forma natural a nivel hidrodinámico y en los casos usuales adopta una forma funcional bien definida. Destacan en particular los perfiles del tipo

$$p(n) = T_0 n^\beta, \quad \beta \geq 1,$$

donde  $T_0 > 0$  es la temperatura del sistema, que engloban los modelos hidrodinámicos isoterma [37, 58, 72] (con  $\beta = 1$ ) e isentrópico [70] (para cualquier  $\beta > 1$ ). Este sistema, que como vemos es de gran relevancia por su aplicabilidad, no ha sido estudiado en profundidad en la literatura a causa de las dificultades que presenta el tratamiento del término de fricción  $S\psi$ , expuestas ampliamente en la primera sección. Sin embargo, sustituyendo la no linealidad  $S$  en (6.31) por la reinterpretación discutida anteriormente

$$\nabla V_L = \text{Im} \left( \frac{\nabla\psi}{\psi} \right), \quad \langle V_L \rangle = 0, \quad (6.35)$$

obtenemos una ecuación bien planteada

$$i\partial_t\psi = -\frac{1}{2}\Delta\psi + V\psi + U\psi + \lambda V_L\psi, \quad (6.36)$$

e invariante frente a cambios de fase constantes y globales (véase el Lema 6.2.2), que da lugar a un sistema que respeta la dinámica del original y es matemáticamente

tratable. En este caso vamos a estudiar el problema de tipo mixto asociado a (6.36) en un dominio acotado  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  ( $1 \leq d \leq 3$ ), con condiciones iniciales y de contorno

$$\psi(0) = \psi_I, \quad \psi(t)|_{\partial\Omega} = \psi_B, \quad (6.37)$$

y en el marco funcional de las hipótesis (H1)–(H3). Lo haremos aplicando el Teorema 6.2.1 con  $\Theta$  adecuado y bajo hipótesis poco restrictivas sobre  $p$  y  $\mathcal{C}$ .

**Teorema 6.3.1**

Sean  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  ( $1 \leq d \leq 3$ ),  $\lambda, \lambda_D > 0$ ,  $\mathcal{C} \in L^2(\Omega)$ ,  $p \in C^{2,1}([\delta, \infty[)$ ,  $V_B \in H^{3/2}(\partial\Omega)$  y supongamos que las hipótesis (H1)–(H3) son satisfechas. Entonces existe  $T > 0$  y una única solución  $(\psi, V, V_L)$  del problema (6.32)–(6.37) en  $[0, T]$ , que verifica

$$\psi \in X_\delta^T, \quad V_L \in X^T, \quad V \in C([0, T], H^2(\Omega)).$$

Para llevar a cabo la demostración es suficiente hacer una elección adecuada del potencial efectivo  $\Theta$  de modo que se verifique la hipótesis (H4) del Teorema 6.2.1. En este caso

$$\Theta(\psi) = V(\psi) + U(\psi), \quad (6.38)$$

donde  $V(\psi)$  es la única solución del sistema (6.32)–(6.33) y  $U(\psi)$  viene determinado explícitamente por (6.34). Debemos, por tanto, establecer dos aplicaciones  $V$  y  $U$  en el espacio  $H_\delta^2(\Omega)$  con las propiedades adecuadas para que  $\Theta$  verifique (H4). En primer lugar determinaremos  $V$  adecuado a nuestro contexto.

**Lema 6.3.2**

Sean  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  un dominio acotado con frontera de clase  $C^2$ ,  $\mathcal{C} \in L^2(\Omega)$  y  $V_B \in H^{3/2}(\partial\Omega)$ . Entonces existe  $V : H^2(\Omega) \rightarrow H^2(\Omega)$  localmente lipschitziana tal que, para cualquier  $\psi \in H^2(\Omega)$ ,  $V(\psi)$  es la única solución de (6.32)–(6.33).

DEMOSTRACIÓN:

Al igual que en la sección anterior, elegimos un representante continuo de  $V_B$  definido en  $\partial\Omega$  y tomamos  $\widetilde{V}_B \in C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$  la extensión armónica de  $V_B$  a todo  $\Omega$ . Para  $\psi \in H^2(\Omega)$  consideramos  $f_\psi = -\frac{1}{\lambda_D}(\mathcal{C} - n) \in L^2(\Omega)$  y le aplicamos el Lema 1.2.2, obteniendo de esta forma  $u_\psi \in \mathcal{D}$  única tal que  $\Delta u_\psi = \frac{1}{\lambda_D}(\mathcal{C} - n)$ . Por tanto, definiendo  $V(\psi) := \widetilde{V}_B + u_\psi$  basta con hacer los cálculos para comprobar que  $V(\psi)$  resuelve (6.32)–(6.33). Además, se trata obviamente de la única solución. Si  $M > 0$  y  $\psi, \varphi \in H^2(\Omega)$  son tales que  $\|\psi\|_{H^2}, \|\varphi\|_{H^2} \leq M$ , se tiene que

$$\|V(\psi) - V(\varphi)\|_{H^2} \leq \frac{K_1}{\lambda_D^2} \|n_\psi - n_\varphi\|_{H^2} \leq \frac{K_1 K_2}{\lambda_D^2} \|\psi - \varphi\|_{H^2}$$

tras una nueva aplicación del Lema 1.2.2 con  $f = f_\psi - f_\varphi$  que proporciona  $K_1$ . Por su parte  $K_2$  procede del Teorema 4.2.2. Esto culmina la prueba.  $\square$

A continuación veremos que para  $p$  suficientemente regular en intervalos separados de 0, el potencial  $U$  tiene las características necesarias.

**Lema 6.3.3**

Sean  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  un dominio acotado con frontera de clase  $C^2$ ,  $\delta > 0$  y  $p \in C^{2,1}([\delta, \infty), \mathbb{R})$ . Entonces, si definimos  $U(\psi)$  para  $\psi \in H_\delta^2(\Omega)$  como en (6.34), se tiene que  $U : H_\delta^2(\Omega) \rightarrow H^2(\Omega)$  es una aplicación localmente lipschitziana.

DEMOSTRACIÓN:

Si definimos

$$h(s) := \int_1^s \frac{1}{r} p'(r) dr \quad \forall s > \delta,$$

es claro, usando el Teorema Fundamental del Cálculo y la regularidad de  $p$ , que  $h \in C^{2,1}([\delta, \infty])$  y se verifica la segunda igualdad de (6.34). Además,  $U(\psi) \in L^2(\Omega)$  y podemos aplicar el Lema 1.2.4 dos veces, obteniendo que  $U(\psi) \in H^2(\Omega)$  y se verifican las reglas de derivación habituales

$$\begin{aligned} \nabla U(\psi) &= h'(n) \nabla n, \\ (\nabla \otimes \nabla) U(\psi) &= h''(n) \nabla n \otimes \nabla n + h'(n) + (\nabla \otimes \nabla) n. \end{aligned}$$

Denotamos por  $K = K(\Omega)$  una constante tal que  $\|v\|_{L^\infty} \leq K\|v\|_{H^2}$  y  $\|v\|_{L^4} \leq K\|v\|_{H^1}$  para cualquier  $v \in C_c^\infty(\Omega)$ . Para probar que  $U$  es localmente lipschitziana fijamos  $M > 0$  y usamos la regularidad de  $h$  para obtener  $K_h(\Omega, M)$ ,  $M_h(\Omega, M) > 0$  constante de Lipschitz y cota superior, respectivamente, válidas para  $h$ ,  $h'$  y  $h''$  en el intervalo  $[\delta, KM]$ . El Teorema 4.2.2 nos proporciona asimismo  $K_n(\Omega, M)$ ,  $M_n(\Omega, M) > 0$  constantes análogas para  $n \in \Omega$ . Entonces, para cualesquiera  $\psi, \varphi \in H_\delta^2(\Omega)$  tales que  $\|\psi\|_{H^2}, \|\varphi\|_{H^2} \leq M$  se tiene que

$$\|U(\psi) - U(\varphi)\|_{L^2} \leq K_h \|n_\psi - n_\varphi\|_{L^2} \leq C_0 \|\psi - \varphi\|_{H^2}. \quad (6.39)$$

Usando ahora (6.39) y acotando de manera sencilla se deduce que

$$\begin{aligned} \|\nabla U(\psi) - \nabla U(\varphi)\|_{L^2} &\leq \|h'(n_\psi)\|_{L^\infty} \|\nabla n_\psi - \nabla n_\varphi\|_{L^2} \\ &\quad + \|h'(n_\psi) - h'(n_\varphi)\|_{L^\infty} \|\nabla n_\varphi\|_{L^2} \\ &\leq (M_h + M_n K_h) \|n_\psi - n_\varphi\|_{H^1} \leq C_1 \|\psi - \varphi\|_{H^2}. \end{aligned} \quad (6.40)$$

Por último, recurrimos nuevamente a (6.39) para establecer

$$\begin{aligned} \|\Delta U(\psi) - \Delta U(\varphi)\|_{L^2} &\leq \|h''(n_\psi)\|_{L^\infty} (\|\nabla n_\psi\|_{L^4} + \|\nabla n_\varphi\|_{L^4}) \|\nabla n_\psi - \nabla n_\varphi\|_{L^4} \\ &\quad + \|h''(n_\psi) - h''(n_\varphi)\|_{L^\infty} \|\nabla n_\varphi\|_{L^4}^2 \\ &\quad + \|h'(n_\psi)\|_{L^\infty} \|\Delta n_\psi - \Delta n_\varphi\|_{L^2} \\ &\quad + \|h'(n_\psi) - h'(n_\varphi)\|_{L^\infty} \|\Delta n_\varphi\|_{L^2} \leq C_2 \|\psi - \varphi\|_{H^2}, \end{aligned} \quad (6.41)$$

donde  $C_0, C_1, C_2 > 0$  son funciones polinómicas de las constantes mencionadas al principio. Utilizando finalmente el Lema 1.2.2 y las estimaciones (6.39)–(6.39) obtenemos la lipschitzianidad local de  $U$ .  $\square$

Una vez establecidos los términos no lineales de forma adecuada, podemos probar la existencia y unicidad de solución local del problema (6.32)–(6.37).

DEMOSTRACIÓN DEL TEOREMA 6.3.1:

Las hipótesis del teorema implican las condiciones que se imponen en los Lemas 6.3.2 y 6.3.3. Por tanto, si definimos  $\Theta(\psi)$  como en (6.38) para  $\psi \in H^2(\Omega)$  y

$$\Theta_B = V_B + h(n_B), \quad n_B = |\psi_B|^2,$$

es sencillo comprobar que la hipótesis (H4) es satisfecha. En efecto,  $\Theta$  es localmente lipschitziana por ser suma de aplicaciones que lo son y, para cualquier  $\psi \in H^2(\Omega)$  tal que  $\psi|_{\partial\Omega} = \psi_B$ , se tiene que

$$\Theta(\psi)|_{\partial\Omega} = V(\psi)|_{\partial\Omega} + U(\psi)|_{\partial\Omega} = V_B + h(n|_{\partial\Omega}) = \Theta_B,$$

donde las igualdades se han establecido aprovechando la regularidad de  $h$  y de  $n$ . Aplicando entonces el Teorema 6.2.1 tenemos  $T > 0$  y una única terna  $(\psi, \Theta, V_L)$  tal que  $V_L \in X^T$  satisface (6.35) y  $\psi \in X_\delta^T$  cumple las condiciones (6.37) y (6.8) con  $\Theta = U(\psi) + V(\psi) \in C([0, T], H^2(\Omega))$ , que es exactamente (6.36). Por último, los Lemas 6.3.2 y 6.3.3 implican que  $V := V(\psi) \in C([0, T], H^2(\Omega))$  y resuelve (6.32)–(6.33), por lo que  $(\psi, V, V_L)$  es la única solución de nuestro problema como queríamos demostrar.  $\square$





# Distintas formulaciones de un sistema cuántico

---

El objetivo de este apéndice es introducir y comparar las descripciones básicas de las distintas formulaciones de la mecánica cuántica que nos han servido de marco teórico para modelar introducir los efectos disipativos, así como las relaciones formales entre las mismas. Al final se incluye un esquema gráfico resumen que permite visualizar la exposición previa.

## A.1. El operador de densidad y la ecuación de Liouville Von Neumann

El formalismo de operadores de densidad fue introducido por J. Von Neumann en 1.925 como herramienta compatible con las interpretaciones de Heisenberg–Dirac y de Schrödinger para la mecánica cuántica. Como se trata de la descripción básica sobre la que se formulan los sistemas cuánticos abiertos, vamos a dar una idea general sobre la noción de operador de densidad de un sistema cuántico sin mostrar una definición rigurosa y en todo caso orientada a problemas de ecuaciones en derivadas parciales, por lo que utilizaremos como espacio inicial de estados  $L^2(\mathbb{R}^d)$  (aunque utilizaremos derivadas si fuera oportuno). Puede consultarse en [110] una discusión detallada sobre la motivación y los aspectos teóricos que conducen a definir el operador de densidad de un sistema cuántico.

El concepto de operador de densidad se fundamenta en la idea de que conocer un sistema físico  $\mathcal{S}$  es equivalente a conocer los resultados de medir cualquier magnitud que se pueda observar en  $\mathcal{S}$ . En mecánica cuántica esta afirmación cobra especial sentido ya que se postula que los estados de un sistema son elementos de un espacio de Hilbert, que en nuestro caso es  $L^2(\mathbb{R}^d)$  con el producto escalar usual

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} \psi(x) \overline{\phi(x)} dx \quad \forall \psi, \phi \in L^2(\mathbb{R}^d).$$

Cada magnitud  $\mathcal{A}$  observable sobre  $\mathcal{S}$  está representada por un operador lineal y hermítico  $A$  sobre  $L^2(\mathbb{R}^d)$ , de manera que

- (a) Cualquier medición de  $\mathcal{A}$  que realicemos sobre  $\mathcal{S}$  proporciona siempre como resultado un valor propio  $a$  de  $A$ .
- (b) Si  $\mathcal{S}$  está en el estado  $\psi$ , la probabilidad de que al medir  $\mathcal{A}$  se obtenga  $a$  es  $|\langle\psi|\phi_a\rangle|^2$ , donde  $\phi_a$  es un vector propio asociado al valor propio  $a$ .

Por tanto, el valor esperado de  $\mathcal{A}$  en el estado  $\psi$  viene dado por  $\langle\mathcal{A}\rangle_\psi = \langle A\psi|\psi\rangle$ . Este hecho se puede describir en términos de un operador de proyección asociado a  $\psi$ . En efecto, si consideramos

$$P_\psi : L^2(\mathbb{R}^d) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^d), \text{ definido por } P_\psi\phi = \langle\psi|\phi\rangle\psi \quad \forall\phi \in L^2(\mathbb{R}^d),$$

se tiene que  $P_\psi$  es (i) hermítico, (ii) definido positivo y (iii) de clase traza (es decir, tiene traza finita) y basta hacer cálculos sencillos para comprobar que el valor esperado del observable  $\mathcal{A}$  cuando  $\mathcal{S}$  se encuentra en el estado  $\psi$  viene dado por  $\langle\mathcal{A}\rangle_\psi = \text{traza}(P_\psi A)$ . Por tanto cada estado del sistema  $\psi$  define, a través de su operador de proyección, una forma de calcular el valor esperado  $\langle\cdot\rangle_\psi$  de cualquier magnitud  $\mathcal{A}$  que se pueda medir en  $\mathcal{S}$ . Von Neumann abstrae propiedades intuitivas sobre qué es *un valor de expectación* y demuestra que cualquier aplicación  $\langle\cdot\rangle$  con dichas propiedades queda representada por cierto operador  $R$  hermítico, definido positivo y de clase traza, de manera que

$$\langle\mathcal{A}\rangle = \text{traza}(RA),$$

para cualquier observable  $\mathcal{A}$  con operador asociado  $A$ . Esto conduce a identificar cada estado de  $\mathcal{S}$  con un operador  $R : L^2(\mathbb{R}^d) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^d)$  verificando (i), (ii) y (iii) que proporciona toda la información probabilística relativa a mediciones que podemos hacer sobre  $\mathcal{S}$  y al que denominaremos operador (matriz) de densidad del sistema. En el caso particular de que  $R = P_\psi$  para cierta  $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ , diremos que el sistema está en el estado (puro)  $\psi$ . Sin embargo, el formalismo de operadores de densidad admite mucha mayor generalidad permitiendo considerar mezclas estadísticas de estados, propiedad esencial a la hora de incluir los efectos de interacción de  $\mathcal{S}$  con otro sistema cuántico.

Von Neumann prueba que la evolución temporal de  $R$  está gobernada por la versión cuántica de la ecuación de Liouville:

$$\frac{d}{dt}R = -\frac{i}{\hbar}[H, R], \quad (\text{A.1})$$

donde  $H = -\frac{p^2}{2m} + V$  es el hamiltoniano del sistema ( $p$  es el operador momento) asociado al potencial externo  $V$ . Para poder trabajar con ella desde nuestro punto de vista consideramos el núcleo integral de  $R$ , esto es,  $\rho = \rho(x, y)$  tal que

$$(R\phi)(x) = \int_{\mathbb{R}^d} \rho(x, y)\phi(y) dy \quad \forall\phi \in L^2(\mathbb{R}^d).$$

Podemos considerar  $\rho \in L^2(\mathbb{R}^{2d})$ , ya que si  $R$  describe un estado puro  $\psi$  es fácil probar que  $\rho(x, y) = \psi(x)\psi(y)$  y en el caso general se puede escribir como suma

ponderada de productos de este tipo. Una de las ventajas de  $\rho$  es que permite trabajar “en coordenadas” con el operador  $R$ , haciendo posible un tratamiento de la ecuación de Liouville–Von Neumann en el lenguaje diferencial, que resulta más operativo que la formulación basada en operadores. La ecuación (A.1) se escribe en términos de  $\rho$  de la siguiente manera:

$$\partial_t \rho = -\frac{i}{\hbar}(H_x - H_y)\rho, \tag{A.2}$$

donde los subíndices en el hamiltoniano indican la variable respecto de la que actúan. Esta igualdad es equivalente a la ecuación maestra y constituye la reescritura apropiada para introducir la ecuación de Wigner del sistema.

## A.2. Interpretación cinética. La ecuación de Wigner

La representación de un sistema cuántico en el espacio de fases establece una analogía con la mecánica clásica de muchas partículas, que explica la dinámica mediante una función de densidad de probabilidad. Para establecer dicha descripción a partir del operador de densidad  $R$  basta considerar su transformada de Wigner [114], que se expresa de la siguiente forma:

$$\mathcal{W}[R](x, \xi) := \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \rho\left(x + \frac{\hbar}{2m}\eta, x - \frac{\hbar}{2m}\eta\right) e^{-i\xi \cdot \eta} d\eta.$$

De esta manera se define la función de Wigner del sistema como  $W(x, \xi) := \mathcal{W}(R)(x, \xi)$  para cualquier  $(x, \xi) \in \mathbb{R}^{2d}$ , donde  $x$  representa la posición y  $\xi$  la velocidad. El carácter hermítico de  $R$  implica que  $W$  es una función con valores reales, aunque se puede comprobar con ejemplos sencillos que no es necesariamente positiva, lo que provoca que la interpretación probabilística de la función de Wigner no sea del todo adecuada. Sin embargo el tratamiento de  $W$  es más operativo y aporta un enfoque cinético a la teoría cuántica conservando toda la información del sistema. En efecto, la transformación  $\mathcal{W}$  es biyectiva y su inversa (denominada cuantización de Weyl [113]) viene dada por

$$(\mathcal{W}^{-1}[W]\phi)(x) := \int_{\mathbb{R}^d} W\left(\frac{x+y}{2}, \xi\right) \phi(y) e^{\frac{i}{\hbar}\xi(x-y)} d\xi, \quad \forall \phi \in L^2(\mathbb{R}^d).$$

La transformación de Wigner proporciona, por tanto, una reescritura de  $R$  más sencilla y con una interpretación clásica más precisa. Además, permite interpretar la ecuación de Von Neumann como una ecuación de transporte, ya que tomando  $\mathcal{W}$  en (A.1) se deduce la denominada ecuación de Wigner

$$\partial_t W + (\xi \cdot \nabla)W + \Theta_{\hbar}[V]W = 0, \tag{A.3}$$

donde  $\Theta_{\hbar}[V]$  es un término pseudo-diferencial asociado al potencial externo  $V$ :

$$\Theta_{\hbar}[V]W(x, \xi, t) = \frac{i}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \frac{1}{\hbar} \left[ V \left( x + \frac{\hbar}{2m} y, t \right) - V \left( x - \frac{\hbar}{2m} y, t \right) \right] \\ \times W(x, \xi', t) e^{-i(\xi - \xi') \cdot y} d\xi' dy$$

La ecuación (A.3) es equivalente a (A.1) y cualquier término adicional en la ecuación de Liouville–Von Neumann puede reescribirse (vía  $\mathcal{W}$ ) en términos de  $W$ , por lo que la equivalencia entre la ecuación maestra y la de Wigner se conserva si tenemos en cuenta efectos disipativos. Por último, es importante señalar que la evolución temporal gobernada por las ecuaciones (A.3) o (A.1) conserva estados puros (asociados a un operador de proyección  $P_{\psi}$  con  $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ ), pero esta propiedad se pierde en el caso disipativo, como ocurre en los modelos de Caldeira–Leggett o Wigner–Fokker–Planck.

### A.3. Enfoque hidrodinámico

Tanto el operador de densidad como la función de Wigner proporcionan una descripción completa de un sistema cuántico, pero en ciertos casos su estudio resulta complejo o computacionalmente costoso. Para simplificarlo se pueden considerar los momentos en velocidad asociados a  $W$

$$\begin{pmatrix} n(t, x) \\ J(t, x) \\ \mathbb{T}(t, x) \end{pmatrix} = \int_{\mathbb{R}^d} \begin{pmatrix} 1 \\ \xi \\ \xi \otimes \xi \end{pmatrix} W(x, \xi, t) d\xi = \begin{pmatrix} \text{densidad local} \\ \text{densidad de corriente} \\ \text{tensor de energía cinética 2} \end{pmatrix},$$

y calcular la evolución temporal de  $n$  y  $J$  a través de (A.3), obteniendo el siguiente sistema hidrodinámico no local:

$$\partial_t n + \text{div} J = 0, \quad (\text{A.4})$$

$$\partial_t J + \text{div} \mathbb{T} + \frac{1}{m} n \nabla V = 0, \quad (\text{A.5})$$

que se puede reescribir en términos de la velocidad media  $u := \frac{J}{n}$  siempre que la densidad local no se anule:

$$\partial_t n + \text{div}(nu) = 0, \quad (\text{A.6})$$

$$\partial_t u + (u \cdot \nabla)u = -\frac{1}{m} \nabla V - \frac{1}{n} \text{div}(P), \quad (\text{A.7})$$

donde  $P = \mathbb{T} - nu \otimes u$  es el tensor cuántico de esfuerzos. Como la evolución según (A.3) conserva la pureza de los estados se puede probar, usando la definición de  $\mathbb{T}$ , que  $\text{div}(P) = \frac{1}{m} n \nabla Q$ , donde  $Q = Q(t, x)$  es el potencial cuántico de Bohm y viene dado por

$$Q := -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \sqrt{n}}{\sqrt{n}}.$$

Por tanto, el sistema (A.6)–(A.7) (y equivalentemente (A.4)–(A.5)) es cerrado y proporciona la formulación hidrodinámica de De Broglie–Bohm para la mecánica cuántica [34, 18]. En consecuencia, si partimos de un estado puro las evoluciones temporales según (A.1), (A.3) y estos sistemas son equivalentes. Esto no ocurre en el caso disipativo ya que las ecuaciones maestra y de Wigner no conservan en general la pureza de los estados, causando que el tensor  $\mathbb{T}$  recoja información sobre la mezcla que conforma  $W$  en cada instante de tiempo. Esto implica que la representación del sistema basada en  $n$  y  $J$  no describe totalmente la fenomenología física de  $W$  y en particular los sistemas (A.4)–(A.5) y (A.6)–(A.7) no son cerrados, por lo que se hace necesaria alguna relación de clausura que permita trabajar con ellos. Es usual, en este sentido, dar una interpretación clásica a la información adicional que contiene  $\mathbb{T}$  y no se puede expresar en términos de  $n$  y  $J$ , de manera que  $\text{div}(P) = \text{div}(P^c) + \frac{1}{m} n \nabla Q$ , donde  $P^c$  es el tensor de esfuerzos clásico del sistema. Bajo esta interpretación podemos obtener modelos hidrodinámicos que denominaremos locales. Los modelos más habituales desprecian efectos de tensiones laterales y describen el tensor en términos de la presión escalar:  $P^c = p\mathbb{I}$ . Cada perfil de  $n$  que supongamos genera un sistema hidrodinámico cuántico:  $p = 0$  conduce al modelo de temperatura cero (que coincide con el sistema de De Broglie–Bohm),  $p = T_0 n$  con  $T_0 > 0$  genera el modelo isoterma [37, 58, 72] y, en general,  $p = T_0 n^\beta$  con  $\beta > 1$  da lugar a modelos denominados isentrópicos [70].

Existe una interpretación hidrodinámica más restrictiva que permite conectar con la formulación de onda. Se trata de considerar sólo fluidos irrotacionales (sin vorticidad), lo que permite encontrar un campo escalar  $S$  de  $mu$  y expresar toda la información en función de la densidad local  $n$  y de dicha  $S$ . En este caso los dos miembros de la ecuación (A.7) se pueden ver como gradientes, lo que permite deducir la evolución temporal de  $S$  en función de  $n$  y  $S$ , que da lugar al denominado sistema hidrodinámico cuántico de flujo potencial:

$$\partial_t n + \frac{1}{m} \text{div}(n \nabla S) = 0, \quad (\text{A.8})$$

$$\partial_t S + \frac{1}{2m} |\nabla S|^2 = -V - mU - Q, \quad (\text{A.9})$$

donde  $n \nabla U = \text{div}(P^c)$ . Si partimos de un estado puro se puede demostrar que  $\text{rot}(u) = 0$  en todos los instantes de tiempo, luego  $U = 0$  y la evolución según el sistema (A.8)–(A.9) (eliminando los efectos de  $U$ ) es equivalente a la que proporcionan (A.1) y (A.3). Admitiendo efectos disipativos no tenemos garantizada la irrotacionalidad del fluido que describimos, luego la hipótesis de existencia de  $S$  supone una pérdida de información real acerca del sistema. Además el potencial  $U$  no se anula en general, y bajo las interpretaciones comentadas anteriormente describe la entalpía del sistema  $U = h(n)$ , con  $nh'(n) = p'(n)$ .

## A.4. Formulación de onda y ecuación de Schrödinger

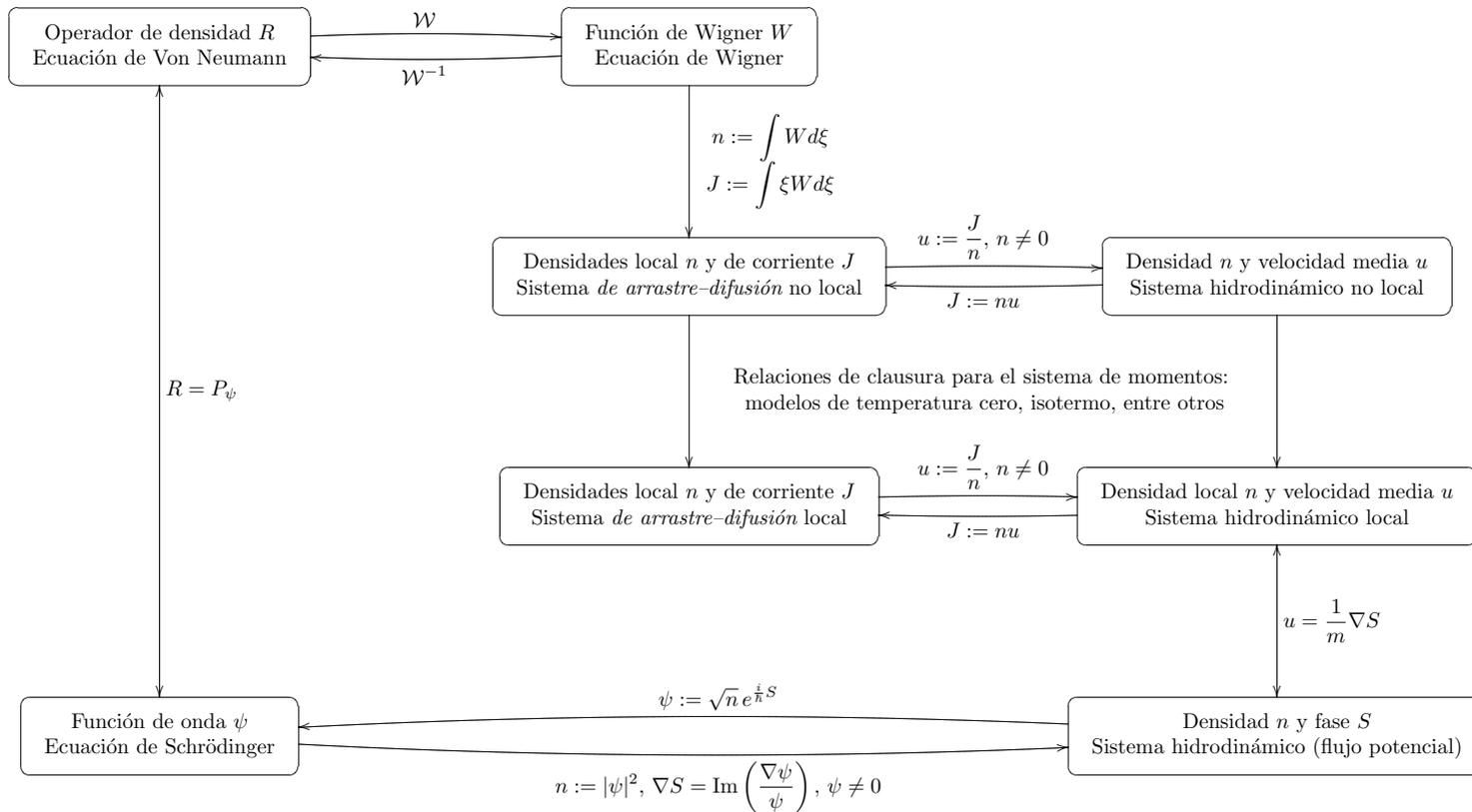
La interpretación de Schrödinger es una de las formulaciones básicas de la mecánica cuántica y su conexión con la formulación hidrodinámica se basa en la descomposición de Madelung de la función de onda, de manera que si partimos de la descripción de un sistema basada en  $n$  y  $S$  es suficiente definir

$$\psi = \sqrt{n} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S \right\}$$

para obtener la función de onda que describe la misma física que  $n$  y  $S$ . La evolución temporal de  $\psi$  queda descrita a partir de esta construcción y del sistema de flujo potencial (A.8)–(A.9). En el caso no disipativo (donde  $U = 0$ ) es sencillo comprobar que  $\psi$  satisface la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi. \quad (\text{A.10})$$

Existe controversia sobre la equivalencia matemática entre (A.8)–(A.9) y la ecuación de Schrödinger, basada en la posible multivaluación de  $\psi$  que pueden originar distintas soluciones del sistema de flujo potencial (en [111] se defiende que es necesaria una condición de cuantización adicional sobre  $S$ , mientras que en [67] se justifica que esa condición se verifica sin necesidad de ser impuesta). No obstante, si entendemos el estado cuántico como un “rayo” de funciones de onda (sin distinguir entre  $\psi$  y  $e^{i\nu}\psi$ ) dicha multivaluación no afecta a la física del sistema y podemos tratar la ecuación de Schrödinger y el sistema de flujo potencial como equivalentes de forma efectiva. Por tanto, en el caso hamiltoniano (sin efectos de disipación) la evolución de un estado puro según la ecuación de Wigner (y de Von Neumann) es equivalente a la ecuación de Schrödinger. En un proceso disipativo se pueden establecer ecuaciones de Schrödinger que incorporan efectos observables de esta índole conservando las densidades local y de corriente, aunque en general es imposible representar un sistema disipativo de manera fiel utilizando una única función de onda. En primer lugar debemos observar que mediante esta construcción hemos ido descartando información para poder construir la función de onda a partir de un operador de densidad general. Además esta carencia no depende del procedimiento y las hipótesis utilizadas, ya que cada función de onda  $\psi$  representa un estado puro  $P_\psi$  y las evoluciones según las ecuaciones maestras y de Wigner con efectos adicionales no respetan esta propiedad. Se pueden establecer representaciones para mezclas de estados utilizando un sistema de ecuaciones de Schrödinger, si bien mediante esta aproximación no se puede recuperar toda la información que encierran  $R$  o  $W$ , por lo que este enfoque no es suficientemente operativo. En la página siguiente mostramos una visualización de las relaciones entre las distintas formulaciones y la evolución temporal natural que llevan asociada cada una de ellas.





# Soluciones exactas de la ecuación de Wigner–Fokker–Planck

---

Consideramos la ecuación de Wigner–Fokker–Planck (WFP)

$$\partial_t W + (\xi \cdot \nabla)W + \Theta_{\hbar}[V]W = L_{WFP}[W],$$

donde

$$L_{WFP}[W] = \frac{D_{pp}}{m^2} \Delta_{\xi} W + 2\lambda \operatorname{div}_{\xi}(\xi W) + 2\frac{D_{pq}}{m} \operatorname{div}(\nabla_{\xi} W) + D_{qq} \Delta W,$$

las constantes físicas están descritas en el Capítulo 2,  $\Theta_{\hbar}[V]W$  es el término pseudo-diferencial asociado al potencial externo  $V$ :

$$\begin{aligned} \Theta_{\hbar}[V]W(x, \xi, t) &= \frac{i}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \frac{1}{\hbar} \left[ V\left(x + \frac{\hbar}{2m}y, t\right) - V\left(x - \frac{\hbar}{2m}y, t\right) \right] \\ &\quad \times W(x, \xi', t) e^{-i(\xi - \xi') \cdot y} d\xi' dy \end{aligned}$$

Vamos a calcular la solución exacta y los momentos de orden más bajo, así como el potencial  $U$  de la familia SLD para la partícula libre y el oscilador armónico, de entrada en el caso general (dimensión y condición inicial arbitrarios) e iremos particularizando para los ejemplos que utilizamos en el capítulo 3. Supondremos la regularidad que sea necesaria para poder llevar a cabo los cálculos.

## B.1. Solución del problema de valores iniciales asociado a la ecuación de Wigner–Fokker–Planck

Como se trata de una ecuación lineal podemos emplear la transformada de Fourier

$$\mathcal{F}[W](y, \zeta, t) = \int_{\mathbb{R}^{2d}} W(x, \xi, t) \exp\{i x y + i \xi \zeta\} d(x, \xi),$$

cuya inversa viene dada por

$$\mathcal{F}^{-1}[G](x, \xi, t) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} G(y, \zeta, t) \exp\{-i x \cdot y - i \xi \cdot \zeta\} d(y, \zeta),$$

para transformarla en una más simple .

**Teorema B.1**

La aplicación  $\mathcal{F}$  lleva la ecuación de Wigner–Fokker–Planck en la siguiente:

$$\partial_t G + (2\lambda \zeta - y) \cdot \nabla_\zeta G + \mathcal{F} [\Theta_{\hbar}[V]W] + \left( \frac{D_{pp}}{m^2} |\zeta|^2 + 2 \frac{D_{pq}}{m} y \cdot \zeta + D_{qq} |y|^2 \right) G = 0.$$

DEMOSTRACIÓN:

Si denotamos  $G = \mathcal{F}[W]$ , es claro que  $\mathcal{F}[\partial_t W](y, \zeta, t) = \partial_t G(y, \zeta, t)$ . Además

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[(\xi \cdot \nabla)W](y, \zeta, t) &= \int_{\mathbb{R}^{2d}} \left( \sum_{j=1}^d \xi_j \partial_{x_j} W(x, \xi, t) \right) \exp\{i x \cdot y + i \xi \cdot \zeta\} d(x, \xi) \\ &= \frac{1}{i} \sum_{j=1}^d \partial_{\zeta_j} \left( \int_{\mathbb{R}^d} \exp\{i \xi \cdot \zeta\} \partial_{x_j} W(x, \xi, t) \exp\{i x \cdot y\} d(x, \xi) \right) \end{aligned}$$

y  $\mathcal{F}[(\xi \cdot \nabla)W](y, \zeta, t) = -y \cdot \nabla_\zeta G(y, \zeta, t)$ , en consecuencia. Por otra parte

$$\mathcal{F}[\Delta_\xi W](y, \zeta) = i^2 \sum_{j=1}^d \zeta_j^2 \int_{\mathbb{R}^{2d}} W(x, \xi) \exp\{i x \cdot y + i \xi \cdot \zeta\} d(x, \xi) = -|\zeta|^2 G(y, \zeta).$$

Análogamente,  $\mathcal{F}[\Delta W](y, \zeta, t) = -|y|^2 G(y, \zeta, t)$ . Para los términos cruzados se tiene

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[\operatorname{div}_\xi (\xi W)](y, \zeta, t) &= \sum_{j=1}^d \int_{\mathbb{R}^{2d}} \partial_{\xi_j} (\xi_j W(x, \xi, t)) \exp\{i x \cdot y + i \xi \cdot \zeta\} d(x, \xi) \\ &= - \sum_{j=1}^d \zeta_j \partial_{\zeta_j} \int_{\mathbb{R}^{2d}} W(x, \xi, t) \exp\{i x \cdot y + i \xi \cdot \zeta\} d(x, \xi), \end{aligned}$$

luego  $\mathcal{F}[\operatorname{div}_\xi (\xi W)](y, \zeta, t) = -\zeta \cdot \nabla_\zeta G(y, \zeta, t)$ . Finalmente

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[\operatorname{div} (\nabla_\xi W)](y, \zeta, t) &= \sum_{j=1}^d \int_{\mathbb{R}^{2d}} \partial_{x_j} (\partial_{\xi_j} W(x, \xi, t)) \exp\{i x \cdot y + i \xi \cdot \zeta\} d(x, \xi) \\ &= i^2 \sum_{j=1}^d y_j \zeta_j G(y, \zeta, t) = -y \cdot \zeta G(y, \zeta, t). \end{aligned}$$

Por tanto, si tomamos transformada de Fourier en la ecuación de Wigner–Fokker–Planck y reagrupamos términos, tenemos demostrado el teorema.  $\square$

En consecuencia, resolviendo la ecuación para  $G$  podemos recuperar  $W$ . Estos cálculos los haremos de forma independiente para los dos potenciales en los que estamos interesados.

### B.1.1. La partícula libre

En este caso tomamos  $V = 0$  y tenemos que resolver

$$\partial_t G + (2\lambda\zeta - y) \cdot \nabla_\zeta G + \left( \frac{D_{pp}}{m^2} |\zeta|^2 + 2 \frac{D_{pq}}{m} y \cdot \zeta + D_{qq} |y|^2 \right) G = 0 \quad (\text{B.1})$$

Para ello planteamos el sistema característico asociado:

$$\begin{cases} Y'(t) = 0, & Y(0) = y, \\ Z'(t) = 2\lambda Z(t) - Y(t), & Z(0) = \zeta. \end{cases}$$

Resolviendo la ecuación homogénea, aplicando el método de variación de constantes e imponiendo la condición inicial, obtenemos que las curvas características de (B.1) vienen dadas por

$$\begin{cases} Y(t) = y, \\ Z(t) = \zeta e^{2\lambda t} + \frac{y}{2\lambda} (1 - e^{2\lambda t}). \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

En este caso es sencillo deducir la inversión de las mismas:

$$\begin{cases} y = Y(t), \\ \zeta = \frac{Y(t)}{2\lambda} (1 - e^{-2\lambda t}) + Z(t) e^{-2\lambda t}. \end{cases} \quad (\text{B.3})$$

A continuación denotamos  $G(t) = G(Y(t), Z(t), t)$  y así podemos interpretar la ecuación (B.1) como una ecuación diferencial ordinaria, lo que nos proporciona, tomando como condición inicial  $W(0) = \delta_0$  (que implica  $G(0) \equiv 1$ ), la siguiente expresión:

$$G(t) = \exp \left\{ - \int_0^t \left( \frac{D_{pp}}{m^2} |Z(s)|^2 + 2 \frac{D_{pq}}{m} Y(s) Z(s) + D_{qq} |Y(s)|^2 \right) ds \right\}.$$

Usando (B.2) obtenemos que la integral anterior vale

$$\begin{aligned} & - \frac{D_{pp}}{m^2} \left[ |\zeta|^2 \frac{e^{4\lambda t} - 1}{4\lambda} + \frac{|y|^2}{4\lambda^2} \left( t + \frac{e^{4\lambda t} - 2e^{2\lambda t} + 1}{4\lambda} \right) + \frac{y \cdot \zeta}{\lambda} \left( \frac{2e^{2\lambda t} - e^{4\lambda t} - 1}{4\lambda} \right) \right] \\ & - \frac{D_{pq}}{m} \left[ y \cdot \zeta \left( \frac{e^{2\lambda t} - 1}{2\lambda} \right) + \frac{|y|^2}{2\lambda} \left( t - \frac{e^{2\lambda t} - 1}{2\lambda} \right) \right] - D_{qq} |y|^2 t. \end{aligned}$$

Conforme a (B.3) y reagrupando de nuevo en términos de  $Z(t)$  e  $Y(t)$  tenemos que  $G$  viene dada por

$$G(t) = \exp\{-a(t)|Y(t)|^2 - b(t)Y(t) \cdot Z(t) - c(t)|Z(t)|^2\},$$

donde los coeficientes  $a$ ,  $b$  y  $c$  vendrán dados por (3.16) en el sistema de unidades fijado en el Capítulo 3. De este modo podemos recuperar la transformada de Fourier de la solución:

$$\mathcal{F}[W](y, \zeta, t) = \exp\{-a(t)|y|^2 - b(t)y \cdot \zeta - c(t)|\zeta|^2\}.$$

Finalmente, para obtener  $W$  debemos conocer la transformada inversa. El siguiente lema nos será de utilidad siempre que debamos efectuar dicho cálculo.

**Lema B.2**

Si  $c > 0$  y  $4ac - b^2 > 0$ , entonces

$$\frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \exp\{-a|y|^2 - by \cdot \zeta - c|\zeta|^2\} \exp\{-iy \cdot x - i\zeta \cdot \xi\} d(y, \zeta)$$

es igual a

$$\frac{1}{(2\pi)^d (4ac - b^2)^{\frac{d}{2}}} \exp\left\{-\frac{a|\xi|^2 + bx \cdot \xi + c|x|^2}{4ac - b^2}\right\}.$$

DEMOSTRACIÓN:

Denotando por  $I(x, \xi)$  a la integral que pretendemos calcular, tenemos que

$$I(x, \xi) = \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \exp\{-a|y|^2 - iy \cdot x\} \int_{\mathbb{R}^d} \exp\{-c|\zeta|^2 - by \cdot \zeta - i\zeta \cdot \xi\} d\zeta dy.$$

Sea  $I_1(y, \xi)$  la integral respecto de  $\zeta$ , que se puede escribir de la siguiente manera:

$$I_1(y, \xi) = \int_{\mathbb{R}^d} \exp\left\{-\left|\sqrt{c}\zeta + \frac{by + i\xi}{2\sqrt{c}}\right|^2\right\} \exp\left\{\frac{|by + i\xi|^2}{4c}\right\} d\zeta = \left(\frac{\pi}{c}\right)^{\frac{d}{2}} e^{\frac{|by + i\xi|^2}{4c}},$$

donde se ha usado el cambio de variable

$$\eta = \sqrt{c}\zeta + \frac{by + i\xi}{2\sqrt{c}}$$

y  $\int_{\mathbb{R}^d} e^{-|\eta|^2} d\eta = \pi^{\frac{d}{2}}$ . Insertando el valor de  $I_1$  en  $I$  se obtiene que el valor de esta integral es

$$\frac{\pi^{\frac{d}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{4c}|\xi|^2\right\}}{(2\pi)^{2d} c^{\frac{d}{2}}} \int_{\mathbb{R}^d} \exp\left\{-\left|\sqrt{a - \frac{b^2}{4c}}y + \frac{i\left(x - \frac{b}{2c}\xi\right)}{2\sqrt{a - \frac{b^2}{4c}}}\right|^2 - \frac{\left|x - \frac{b}{2c}\xi\right|^2}{4a - \frac{b^2}{c}}\right\} dy.$$

Haciendo el cambio de variable

$$\eta = \sqrt{a - \frac{b^2}{4c}} y + \frac{i \left( x - \frac{b}{2c} \xi \right)}{2\sqrt{a - \frac{b^2}{4c}}} \exp \left\{ \frac{1}{4c} |\xi|^2 \right\}$$

y usando de nuevo la integral de Gauss tenemos finalmente que  $I(x, \xi)$  es igual a

$$\frac{1}{(2\pi)^d (4ac - b^2)^{\frac{d}{2}}} \exp \left\{ -\frac{c|x|^2}{4ac - b^2} - \frac{b^2|\xi|^2}{16ac^2 - 4b^2c} + \frac{bx \cdot \xi}{4ac - b^2} - \frac{|\xi|^2}{4c} \right\}.$$

Agrupando y simplificando obtenemos el resultado anunciado.  $\square$

Como las funciones  $c(t)$  y  $4a(t)c(t) - b(t)^2$  son positivas podemos aplicar el Lema B.2 para obtener que

$$W_0(x, \xi, t) = (4\pi^2 d(t))^{-\frac{d}{2}} \exp \left\{ -\frac{c(t)}{d(t)} |x|^2 + \frac{b(t)}{d(t)} x \cdot \xi - \frac{a(t)}{d(t)} |\xi|^2 \right\}$$

resuelve la ecuación de Wigner–Fokker–Planck, donde  $a, b$  y  $c$  son las calculadas anteriormente y

$$d(t) = 4a(t)c(t) - b(t)^2 \quad \forall t > 0$$

es una función positiva. Para obtener la solución de la ecuación de WFP con una condición inicial arbitraria  $W_I$ , ensayamos perfiles de la forma

$$W(x, \xi, t) = \int_{\mathbb{R}^{2d}} W_0(x - A(z, v, t), \xi - B(z, v, t), t) W_I(z, v) d(z, v)$$

y usamos que  $W_0$  es solución de la ecuación de WFP, es decir

$$(\partial_t W_0 + \xi \cdot \nabla W_0 - L_{WFP}[W_0])(x, \xi, t) = 0 \quad \forall (x, \xi, t) \in \mathbb{R}^{2d} \times \mathbb{R}_0^+.$$

En particular esta identidad es satisfecha para los puntos de la forma  $(x - A, \xi - B, t)$ , de modo que denotando  $W_0(x - A, \xi - B, t)$  por  $W_0(\cdot)$  y desarrollando el término  $\operatorname{div}_\xi(\xi W)$  de  $L_{WFP}$  tenemos que

$$\begin{aligned} & \partial_t W_0(\cdot) + \xi \cdot \nabla W_0(\cdot) - 2\lambda \xi \cdot \nabla_\xi W_0(\cdot) - \frac{D_{pp}}{m^2} \Delta_\xi W_0(\cdot) - 2\lambda d W_0(\cdot) \\ & - 2 \frac{D_{pq}}{m} \operatorname{div}(\nabla_\xi W_0)(\cdot) - D_{qq} \Delta W_0(\cdot) = B \nabla W_0(\cdot) - 2\lambda B \nabla_\xi W_0(\cdot). \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Si  $W$  ha de ser solución de la ecuación de WFP, entonces  $(\partial_t W + \xi \cdot \nabla W - L_{WFP}[W])(x, \xi, t) = 0$ , lo que implica

$$\begin{aligned} 0 = \int_{\mathbb{R}^{2d}} & \left\{ -\partial_t A \nabla W_0(\cdot) - \partial_t B \nabla_\xi W_0(\cdot) + \partial_t W_0(\cdot) + \xi \cdot \nabla W_0(\cdot) - \frac{D_{pp}}{m^2} \Delta_\xi W_0(\cdot) \right. \\ & \left. - 2\lambda \xi \cdot \nabla_\xi W_0(\cdot) - 2\lambda d W_0(\cdot) - 2 \frac{D_{pq}}{m} \operatorname{div}(\nabla_\xi W_0)(\cdot) - D_{qq} \Delta W_0(\cdot) \right\} W_I(z, v) d(z, v). \end{aligned}$$

Usando (B.4), tenemos que

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} \{(-\partial_t A + B) \nabla W_0(\cdot) + (-\partial_t B - 2\lambda B) \nabla_\xi W_0(\cdot)\} W_I(z, v) d(z, v) = 0.$$

Esta igualdad se cumple si  $A$  y  $B$  satisfacen el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{cases} A'(t) = B(t), \\ B'(t) = -2\lambda B(t), \end{cases}$$

donde podemos considerar la dependencia de  $z$  y  $v$  como paramétrica. Además si imponemos que  $W(x, \xi, 0) = W_I(x, \xi)$  tenemos que

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} W_0(x - A(0), \xi - B(0), 0) W_I(z, v) d(z, v) = W_I(x, \xi),$$

de donde se desprende que  $A(0) = z$  y  $B(0) = v$ , habida cuenta de que  $W(\cdot, \cdot, 0) = \delta_0$ . Por consiguiente tenemos planteado un problema de valores iniciales para  $A$  y  $B$  que podemos resolver, obteniendo así la solución de la ecuación de WFP con condición inicial  $W_I$  en el caso  $V = 0$ :

$$W(x, \xi, t) = \int_{\mathbb{R}^{2d}} W_0(x - A_z(t)z - A_v(t)v, \xi - B_z(t)z - B_v(t)v, t) W_I(z, v) d(z, v),$$

donde  $A_z, A_v, B_z$  y  $B_v$  vienen dadas por:

$$\begin{aligned} A_z(t) &= 1, & B_z(t) &= 0, \\ A_v(t) &= \frac{1}{2\lambda}(1 - e^{-2\lambda t}), & B_v(t) &= ve^{-2\lambda t}, \end{aligned}$$

fórmulas que nos proporcionan la ecuación (3.17), las cuales utilizamos en las simulaciones numéricas del Capítulo 3.

### B.1.2. El oscilador armónico

En este caso consideramos  $V = \frac{k}{2}|x|^2$ , donde  $k$  es la constante de recuperación. Calculamos en primer lugar el término pseudo-diferencial en la ecuación de WFP:

$$\Theta_h[V]W = \frac{ik}{(2\pi)^d m} \sum_{j=1}^d x_j \int_{\mathbb{R}^d} y_j \int_{\mathbb{R}^d} W(x, \xi', t) e^{-i(\xi - \xi') \cdot y} d\xi' dy.$$

Haciendo el cambio de variable  $\eta = \xi' - \xi$  obtenemos

$$\Theta_h[V]W = -\frac{k}{m} \sum_{j=1}^d x_j \int_{\mathbb{R}^d} \partial_{\eta_j} W(x, \xi + \eta, t) \delta(\eta) d\eta,$$

donde hemos usado que  $(2\pi)^d \int_{\mathbb{R}^d} e^{iy \cdot \eta} dy = \delta(\eta)$ . Por tanto, para el oscilador armónico se tiene que

$$\Theta_h[V]W(x, \xi, t) = -\frac{k}{m} (x \cdot \nabla_\xi) W(x, \xi, t),$$

y la ecuación de WFP es ahora

$$\partial_t W + (\xi \cdot \nabla) W - \omega_0^2 (x \cdot \nabla_\xi) W = L_{WFP}[W],$$

donde  $\omega_0 = \sqrt{(k/m)} > 0$  es la frecuencia natural del oscilador. Usando el Teorema B.1 y el hecho de que

$$\mathcal{F}[(x \cdot \nabla_\xi) W](y, \zeta, t) = -\zeta \cdot \nabla_y G(y, \zeta, t),$$

que se deduce de forma análoga a  $\mathcal{F}[(\xi \cdot \nabla) W]$  (hecho en la prueba del teorema), tenemos que la ecuación para la transformada de Fourier se lee

$$\partial_t G + \omega_0^2 \zeta \cdot \nabla_y G + (2\lambda \zeta - y) \cdot \nabla_\zeta G + \left( \frac{D_{pp}}{m^2} |\zeta|^2 + 2 \frac{D_{pq}}{m} y \cdot \zeta + D_{qq} |y|^2 \right) G = 0. \quad (\text{B.5})$$

Para resolverla planteamos, al igual que antes, el sistema característico asociado:

$$\begin{cases} Y'(t) = \omega_0^2 Z(t), & Y(0) = y, \\ Z'(t) = 2\lambda Z(t) - Y(t), & Z(0) = \zeta, \end{cases}$$

de manera que las curvas características para (B.5) vienen dadas por

$$\begin{cases} Y(t) = C_1 e^{\lambda_+ t} + C_2 e^{\lambda_- t}, \\ Z(t) = \frac{\lambda_+}{\omega_0^2} C_1 e^{\lambda_+ t} + \frac{\lambda_-}{\omega_0^2} C_2 e^{\lambda_- t}, \end{cases}$$

donde

$$C_1 = \frac{\omega_0^2 \zeta - \lambda_- y}{\lambda_+ - \lambda_-}, \quad C_2 = \frac{-\omega_0^2 \zeta + \lambda_+ y}{\lambda_+ - \lambda_-}.$$

La inversión de las características viene dada por las siguientes expresiones

$$\begin{cases} y = \frac{e^{-2\lambda t}}{\lambda_+ - \lambda_-} \left( (\lambda_+ e^{\lambda_+ t} - \lambda_- e^{\lambda_- t}) Y + (-\omega_0^2 e^{\lambda_+ t} - \omega_0^2 e^{\lambda_- t}) Z \right), \\ \zeta = \frac{e^{-2\lambda t}}{\lambda_+ - \lambda_-} \left( (e^{\lambda_+ t} - e^{\lambda_- t}) Y + (-\lambda_- e^{\lambda_+ t} + \lambda_+ e^{\lambda_- t}) Z \right), \end{cases} \quad (\text{B.6})$$

tras cálculos largos pero sencillos. Nótese que  $\lambda_+ + \lambda_- = 2\lambda$ ,  $\lambda_+ - \lambda_- = 2\sqrt{\lambda^2 - \omega_0^2}$  y  $\lambda_+ \lambda_- = \omega_0^2$ , propiedades que utilizaremos asiduamente de aquí en adelante. Del mismo modo respetaremos la notación de la raíz con radicando negativo, dándole el sentido de número complejo imaginario puro.

Una vez conocidas las curvas características podemos resolver la ecuación para  $G$ . Si denotamos  $G(t) = G(Y(t), Z(t), t)$ , podemos entender la evolución de  $G$  como una ecuación diferencial ordinaria, que para  $G(0) = 1$  (que corresponde a  $W(0) = \delta_0$ , como ya comentamos en el caso anterior) implica

$$G(t) = \exp \left\{ - \int_0^t \left( \frac{D_{pp}}{m^2} |Z(s)|^2 + 2 \frac{D_{pq}}{m} Y(s) \cdot Z(s) + D_{qq} |Y(s)|^2 \right) ds \right\}.$$

Sustituyendo la expresión de las características y agrupando adecuadamente se deduce que

$$G(t) = -|C_1|^2 D_+(t) - |C_2|^2 D_-(t) - C_1 \cdot C_2 D(t),$$

donde

$$\begin{aligned} D_{\pm}(t) &= \frac{1}{2\lambda_{\pm}} \left( \frac{D_{pp}}{m^2} \frac{\lambda_{\pm}^2}{\omega_0^4} + D_{qq} + \frac{2D_{pq}\lambda_{\pm}}{\omega_0^2 m} \right) (e^{2\lambda_{\pm} t} - 1), \\ D(t) &= \frac{1}{2\lambda} \left( \frac{2D_{pp}}{m^2 \omega_0^2} + 2D_{qq} + \frac{4\lambda D_{pq}}{\omega_0^2 m} \right) (e^{2\lambda t} - 1). \end{aligned}$$

Para introducir (B.6), comenzamos desarrollando  $C_1$  y  $C_2$  en función de  $y$  y  $\zeta$ :

$$\begin{aligned} |C_1|^2 &= \frac{1}{(\lambda_+ - \lambda_-)^2} (\omega_0^4 |\zeta|^2 + \lambda_-^2 |y|^2 - 2\omega_0^2 \lambda_- \zeta y), \\ |C_2|^2 &= \frac{1}{(\lambda_+ - \lambda_-)^2} (\omega_0^4 |\zeta|^2 + \lambda_+^2 |y|^2 - 2\omega_0^2 \lambda_+ \zeta y), \\ C_1 C_2 &= \frac{1}{(\lambda_+ - \lambda_-)^2} (-\omega_0^4 |\zeta|^2 - \omega_0^2 |y|^2 + 2\omega_0^2 \lambda \zeta y). \end{aligned}$$

Así

$$-|C_1|^2 D_+(t) - |C_2|^2 D_-(t) - C_1 \cdot C_2 D(t) = \frac{-\tilde{a}(t) |y|^2 - \tilde{c}(t) |\zeta|^2 - \tilde{b}(t) y \cdot \zeta}{(\lambda_+ - \lambda_-)^2},$$

donde los nuevos coeficientes vienen dados por

$$\begin{aligned} \tilde{a}(t) &= \lambda_-^2 D_+(t) + \lambda_+^2 D_-(t) - \omega_0^2 D(t), \\ \tilde{b}(t) &= 2\omega_0^2 (-\lambda_- D_+(t) - \lambda_+ D_-(t) + \lambda D(t)), \\ \tilde{c}(t) &= \omega_0^4 (D_+(t) + D_-(t) + D(t)). \end{aligned}$$

Insertando (B.6) encontramos que  $G(t)$  está determinada por

$$G(t) = \exp\{-a(t)|Y(t)|^2 - b(t)Y(t) \cdot Z(t) - c(t)|Z(t)|^2\},$$

donde  $a, b$  y  $c$  están descritos en (3.20) en el sistema de unidades normalizado. Atendiendo a la definición de  $G(t)$  podemos recuperar la transformada de Fourier de la solución:

$$\mathcal{F}[W](y, \zeta, t) = \exp\{-a(t)|y|^2 - b(t)y \cdot \zeta - c(t)|\zeta|^2\}.$$

Para conocer  $W$  debemos calcular la transformada inversa. Usando que las funciones  $c(t)$  y  $d(t) := 4a(t)c(t) - b(t)^2$  son positivas (se puede observar representándolas) y aplicando el Lema B.2 obtenemos que

$$W_0(x, \xi, t) = (4\pi^2 d(t))^{-\frac{d}{2}} \exp\left\{-\frac{c(t)}{d(t)} |x|^2 + \frac{b(t)}{d(t)} x \xi - \frac{a(t)}{d(t)} |\xi|^2\right\}$$

es solución de la ecuación de Wigner–Fokker–Planck. Para resolver el problema de Cauchy asociado a dicha ecuación con una condición genérica  $W_I$  ensayamos perfiles de la forma

$$W(x, \xi, t) = \int_{\mathbb{R}^{2d}} W_0(x - A(z, v, t), \xi - B(z, v, t), t) W_I(z, v) d(z, v).$$

Razonando de forma análoga al caso de la partícula libre se debe cumplir

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} \{(-\partial_t A + B) \nabla W_0(\cdot) + (-\partial_t B - 2\lambda B - \omega_0^2 A) \nabla_\xi W_0(\cdot)\} W_I(z, v) d(z, v) = 0.$$

Esta igualdad es satisfecha si  $A$  y  $B$  resuelven el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{cases} A'(t) = B(t), \\ B'(t) = -2\lambda B(t) - \omega_0^2 A(t), \end{cases}$$

donde podemos considerar la dependencia de  $z$  y  $v$  como paramétrica. Además, si imponemos que  $W(x, \xi, 0) = W_I(x, \xi)$  se tiene que

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} W_0(x - A(0), \xi - B(0), 0) W_I(z, v) d(z, v) = W_I(x, \xi),$$

de donde se deduce que  $A(0) = z$  y  $B(0) = v$ . Por tanto, disponemos de un problema de valores iniciales para  $A$  y  $B$  cuya solución es

$$\begin{aligned} A(t) &= -\frac{v + \lambda_- z}{\lambda_+ - \lambda_-} e^{-\lambda_+ t} + \frac{v + \lambda_+ z}{\lambda_+ - \lambda_-} e^{-\lambda_- t}, \\ B(t) &= \frac{\lambda_+(v + \lambda_- z)}{\lambda_+ - \lambda_-} e^{-\lambda_+ t} - \frac{\lambda_-(v + \lambda_+ z)}{\lambda_+ - \lambda_-} e^{-\lambda_- t}. \end{aligned}$$

En consecuencia la solución de la ecuación de WFP con condición inicial  $W_I$  para el oscilador armónico viene dada por (3.21), como pretendíamos comprobar.

## B.2. Densidad local asociada a la ecuación de Wigner–Fokker–Planck

Como hemos demostrado anteriormente, la solución de la ecuación de WFP para los dos potenciales estudiados viene dada en ambos casos por

$$W(x, \xi, t) = \int_{\mathbb{R}^{2d}} W_0(x - A_z(t)z - A_v(t)v, \xi - B_z(t)z - B_v(t)v, t) W_I(z, v) d(z, v),$$

donde  $W_I$  es la condición inicial,  $W_0$  es función maxwelliana:

$$W_0(x, \xi, t) = (4\pi^2 d(t))^{-\frac{d}{2}} \exp \left\{ -\frac{c(t)}{d(t)} |x|^2 + \frac{b(t)}{d(t)} x \xi - \frac{a(t)}{d(t)} |\xi|^2 \right\},$$

y donde  $a, b, c, d$  y  $A_z, A_v, B_z, B_v$  son funciones que dependen exclusivamente del tiempo (diferentes para cada potencial). Calcularemos a continuación los momentos asociados a  $W$  de orden más bajo aprovechando esta estructura de las soluciones. El primero de ellos es la densidad local, que constituye el momento de orden cero:

$$n(x, t) = \int_{\mathbb{R}^d} W(x, \xi, t) d\xi,$$

y se puede calcular insertando el perfil de las soluciones que conocemos y denotando (por simplicidad)  $A = A_z z + A_v v$  y  $B = B_z z + B_v v$ :

$$n(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^d (4ac - b^2)^{\frac{d}{2}}} \int_{\mathbb{R}^{2d}} W_I(z, v) \exp \left\{ \frac{-c|x - A|^2}{4ac - b^2} \right\} I_2(x, z, v, t) d(z, v),$$

donde hemos denotado

$$I_2(x, z, v, t) = \int_{\mathbb{R}^d} \exp \left\{ \frac{b(x - A)(\xi - B)}{4ac - b^2} - \frac{a|\xi - B|^2}{4ac - b^2} \right\} d\xi.$$

Haciendo el cambio de variable  $\xi' = \xi - B$  tenemos el valor de  $I_2$ :

$$I_2(x, z, v, t) = \left( \frac{(4ac - b^2)\pi}{a} \right)^{\frac{d}{2}} \exp \left\{ \frac{b^2|x - A|^2}{4a(4ac - b^2)} \right\},$$

y la densidad local asociada a la ecuación de WFP con condición inicial  $W_I$  viene dada por

$$n(t, x) = \frac{1}{(4\pi a)^{\frac{d}{2}}} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \exp \left\{ -\frac{1}{4a} |x - A_z(t)z - A_v(t)v|^2 \right\} W_I(z, v) d(z, v). \quad (\text{B.7})$$

Tomaremos  $d = 1$ , el régimen de constantes en el que  $\hbar = m = k_B = 1$  y elegimos como dato inicial la distribución maxwelliana centrada en la posición  $x_0$  y la velocidad  $\xi_0$ ,

$$W_I(x, \xi) = \frac{1}{\pi} \exp \left\{ -(x - x_0)^2 - (\xi - \xi_0)^2 \right\}. \quad (\text{B.8})$$

Usando la expresión general para  $n$  establecida en (B.7) y agrupando convenientemente los términos de la exponencial, tenemos que la densidad local asociada a  $W$  viene dada por

$$\frac{1}{2\sqrt{a\pi^3}} \exp \left\{ -\frac{1}{4a} x^2 - x_0^2 - \xi_0^2 \right\} \int_{\mathbb{R}} \exp \left\{ -\left( \frac{A_z^2}{4a} + 1 \right) z^2 + \left( \frac{A_z x}{2a} + 2x_0 \right) z \right\} I_3 dz,$$

donde

$$I_3(x, z, t) = \int_{\mathbb{R}} \exp \left\{ -\left( \frac{A_v^2}{4a} + 1 \right) v^2 - \left( \frac{A_z A_v z}{2a} - \frac{A_v x}{2a} - \xi_0 \right) v \right\} dv.$$

Para calcular esta integral usaremos el siguiente resultado:

**Lema B.3**

Si  $\alpha > 0$ , entonces para cualquier  $\beta \in \mathbb{R}$  se tiene que

$$\int_{\mathbb{R}} \exp \{-\alpha v^2 - 2\beta v\} dv = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\alpha}} \exp \left\{ \frac{\beta^2}{\alpha} \right\}.$$

DEMOSTRACIÓN:

Como

$$-\alpha v^2 - 2\beta v = - \left( \sqrt{\alpha} v + \frac{\beta}{\sqrt{\alpha}} \right)^2 + \frac{\beta^2}{\alpha},$$

tenemos que

$$\int_{\mathbb{R}} \exp \{-\alpha v^2 - 2\beta v\} dv = \exp \left\{ \frac{\beta^2}{\alpha} \right\} \int_{\mathbb{R}} \exp \left\{ - \left( \sqrt{\alpha} v + \frac{\beta}{\sqrt{\alpha}} \right)^2 \right\} dv,$$

por lo que haciendo el cambio de variable  $w = \sqrt{\alpha} v + \frac{\beta}{\sqrt{\alpha}}$  y usando la integral de Gauss concluimos que

$$\int_{\mathbb{R}} \exp \{-\alpha v^2 - 2\beta v\} dv = \exp \left\{ \frac{\beta^2}{\alpha} \right\} \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \int_{\mathbb{R}} \exp \{-w^2\} dw = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\alpha}} \exp \left\{ \frac{\beta^2}{\alpha} \right\}$$

□

Por tanto, tomando

$$\alpha = \frac{A_v^2 + 4a}{4a} \quad \text{y} \quad \beta = \frac{1}{4a} (A_z A_v z - A_v x - 4a \xi_0),$$

el Lema B.3 asegura que

$$I_3(x, z, t) = \frac{2\sqrt{\pi a}}{\sqrt{4a + A_v^2}} \exp \left\{ \frac{(A_z A_v z - A_v x - 4a \xi_0)^2}{4a(4a + A_v^2)} \right\}.$$

En consecuencia, la densidad  $n(t, x)$  es igual a

$$\frac{e^{-\frac{1}{4a}x^2 - x_0^2 - \xi_0^2}}{\pi \sqrt{4a + A_v^2}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{4a + A_v^2}{4a}z^2 + \frac{A_z x + 4a x_0}{2a}z + \frac{(A_z A_v z - (A_v x + 4a \xi_0))^2}{4a(4a + A_v^2)}} dz.$$

Desarrollando los argumentos de las exponenciales y denotando

$$e(t) = \frac{1}{4a(t) + A_z(t)^2 + A_v(t)^2},$$

se obtiene

$$n(t, x) = \frac{1}{\pi \sqrt{4a + A_v^2}} \exp \left\{ -\frac{1}{4a + A_v^2} x^2 + \frac{4a \xi_0^2 + 2A_v \xi_0 x}{4a + A_v^2} - x_0^2 - \xi_0^2 \right\} I_4(t, x),$$

donde

$$I_4(t, x) = \int_{\mathbb{R}} \exp \left\{ -\frac{1}{e(4a + A_v^2)} z^2 - \frac{2(A_z A_v \xi_0 - A_z x - x_0(4a + A_v^2))}{4a + A_v^2} z \right\} dz.$$

Usando de nuevo el Lema B.3 con

$$\alpha = \frac{-1}{e(4a + A_v^2)}, \quad \beta = \frac{A_z A_v \xi_0 - A_z x - x_0(4a + A_v^2)}{4a + A_v^2}$$

podemos deducir el valor de  $I_4$ , lo que implica que desarrollando el cuadrado del exponente, agrupando en torno a las potencias de  $x$  y simplificando valiéndonos de la definición de  $e$  tenemos que la densidad local asociada a WFP con dato inicial maxwelliano es

$$n(t, x) = \frac{(e(t))^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}}} \exp \left\{ -e(t) \left( x - (A_z(t)x_0 + A_v(t)\xi_0) \right)^2 \right\},$$

que haciendo  $x_0 = \xi_0 = 0$  y ajustando adecuadamente los coeficientes en la definición de  $e$ , nos conduce a los valores de  $n$  en (3.19) (teniendo en cuenta los valores de  $A_z$ ,  $A_v$ ,  $B_z$  y  $B_v$ ) para la partícula libre y (3.22) para el oscilador armónico.

### B.3. Densidad de corriente asociada a la solución de la ecuación de Wigner–Fokker–Planck

La densidad de corriente es el momento de primer orden respecto de la velocidad:

$$J(t, x) = \int_{\mathbb{R}^d} \xi W(x, \xi, t) d\xi.$$

Vamos a calcularla de manera análoga a la densidad  $n(t, x)$ . Como en el caso anterior, denotamos  $A = A_z z + A_v v$  y  $B = B_z z + B_v v$ . Entonces

$$J(t, x) = \frac{1}{(2\pi)^d (4ac - b^2)^{\frac{d}{2}}} \int_{\mathbb{R}^{2d}} W_I(z, v) \exp \left\{ \frac{-c|x - A|^2}{4ac - b^2} \right\} I_5(x, z, v, t) d(z, v),$$

donde

$$I_5(x, z, v, t) = \int_{\mathbb{R}^d} \xi \exp \left\{ \frac{b(x - A)(\xi - B)}{4ac - b^2} - \frac{a|\xi - B|^2}{4ac - b^2} \right\} d\xi.$$

Haciendo el cambio de variable

$$\xi = B + \sqrt{\frac{4ac - b^2}{a}} \left( \tilde{\xi} + \frac{b(x - A)}{2\sqrt{a(4ac - b^2)}} \right)$$

se deduce que  $I_5$  vale

$$\left( \frac{4ac - b^2}{a} \right)^{\frac{d}{2}} e^{\frac{b^2|x - A|^2}{4a(4ac - b^2)}} \int_{\mathbb{R}^d} \left[ \sqrt{\frac{4ac - b^2}{a}} \left( \tilde{\xi} + \frac{b(x - A)}{2\sqrt{a(4ac - b^2)}} \right) + B \right] e^{-|\tilde{\xi}|^2} d\tilde{\xi}.$$

Esta expresión se puede descomponer en dos integrales. La primera es nula ya que la aplicación  $\tilde{\xi} \mapsto -|\tilde{\xi}|^2 \exp\{\tilde{\xi}\}$  es una función impar, luego

$$I_5(x, z, v, t) = \left( \frac{(4ac - b^2)\pi}{a} \right)^{\frac{d}{2}} \left( B + \frac{b}{2a}(x - A) \right) \exp \left\{ \frac{b^2 |x - A|^2}{4a(4ac - b^2)} \right\},$$

y la corriente asociada a la ecuación de WFP con condición inicial genérica  $W_I$  es

$$J(t, x) = \frac{1}{(4\pi a)^{\frac{d}{2}}} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \left( B + \frac{b}{2a}(x - A) \right) \exp \left\{ -\frac{1}{4a}|x - A|^2 \right\} W_I(z, v) d(z, v).$$

A continuación calcularemos esta densidad de corriente en el caso unidimensional para una condición inicial maxwelliana centrada en la posición  $x_0$  y en la velocidad  $\xi_0$  (cf. (B.8)) y, al igual que antes, en el sistema normalizado de unidades establecido en el Capítulo 3. Usando la fórmula general de la densidad de corriente y manteniendo la notación para  $A$  y  $B$  tenemos que  $J$  viene dada por

$$\frac{1}{(4\pi^3 a)^{\frac{1}{2}}} \int_{\mathbb{R}^2} \left( B + \frac{b}{2a}(x - A) \right) \exp \left\{ -\frac{(x - A)^2}{4a} - (z - x_0)^2 - (v - \xi_0)^2 \right\} d(z, v).$$

Para dar una expresión explícita de  $J$  desarrollando el argumento de la exponencial y escribimos esta última igualdad de la siguiente manera:

$$J(t, x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi^3 a}} \exp \left\{ -\frac{1}{4a}x^2 - x_0^2 - \xi_0^2 \right\} (I_6(t, x) + I_7(t, x) + I_8(t, x)),$$

lo que nos permitirá calcular la densidad de corriente a partir de  $I_6$ ,  $I_7$  e  $I_8$ . Comenzamos con  $I_6$ :

$$I_6(t, x) = \frac{bx}{2a} \int_{\mathbb{R}} \exp \left\{ -\left( \frac{A_z^2}{4a} + 1 \right) z^2 + \left( \frac{A_z x}{2a} + 2x_0 \right) z \right\} I_9(x, z, t) dz,$$

donde

$$I_9(x, z, t) = \int_{\mathbb{R}} \exp \left\{ -\left( \frac{A_v^2}{4a} + 1 \right) v^2 - \left( \frac{A_z A_v z}{2a} - \frac{A_v x}{2a} - 2\xi_0 \right) v \right\} dv.$$

Si aplicamos el Lema B.3 con

$$\alpha = \frac{A_v^2 + 4a}{4a} \quad \text{y} \quad \beta = \frac{1}{4a} (A_z A_v z - A_v x - 4a \xi_0)$$

obtenemos el valor de  $I_9$ . Insertándolo en la expresión de  $I_6$  se deduce que el valor de esta integral es

$$\frac{b\sqrt{\pi} x}{\sqrt{a(4a + A_v^2)}} \int_{\mathbb{R}} e^{\frac{(A_z A_v z - A_v x - 4a \xi_0)^2}{4a(4a + A_v^2)} - \left( \frac{A_z^2}{4a} + 1 \right) z^2 + \left( \frac{A_z x}{2a} + 2x_0 \right) z} dz.$$

Ya hemos calculado esta integral en el apartado referente a la densidad local (tras proporcionar la expresión de  $I_3$ ), y su valor es

$$\pi\sqrt{4a + A_v^2} \exp\left\{\frac{1}{4a}x^2 + x_0^2 + \xi_0^2\right\} n(t, x),$$

por lo que

$$I_6(t, x) = \frac{bx}{\sqrt{a}}\pi^{3/2} \exp\left\{\frac{1}{4a}x^2 + x_0^2 + \xi_0^2\right\} n(t, x).$$

Calculamos a continuación  $I_7$ , que se puede escribir de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} I_7(t, x) &= \frac{2\sqrt{\pi a}}{\sqrt{4a + A_v^2}} \left(B_z - \frac{b}{2a}A_z\right) \exp\left\{\frac{(A_v x + 4a\xi_0)^2}{4a(4a + A_v^2)}\right\} \\ &\times \int_{\mathbb{R}} z \exp\left\{-\frac{1}{e(4a + A_v^2)}z^2 - \frac{2z(A_z A_v \xi_0 - A_z x - x_0(4a + A_v^2))}{(4a + A_v^2)}\right\} dz. \end{aligned}$$

Para ello usaremos el siguiente resultado (análogo al Lema B.3):

**Lema B.4**

Si  $\alpha > 0$ , entonces para cualquier  $\beta \in \mathbb{R}$  se tiene que

$$\int_{\mathbb{R}} z \exp\{-\alpha z^2 - 2\beta z\} dz = -\frac{\beta\sqrt{\pi}}{\alpha^{3/2}} \exp\left\{\frac{\beta^2}{\alpha}\right\}.$$

DEMOSTRACIÓN:

Ajustando cuadrados en el exponente llegamos a

$$\int_{\mathbb{R}} z \exp\{-\alpha z^2 - 2\beta z\} dz = \exp\left\{\frac{\beta^2}{\alpha}\right\} \int_{\mathbb{R}} z \exp\left\{-\left(\sqrt{\alpha}z + \frac{\beta}{\sqrt{\alpha}}\right)^2\right\} dz.$$

Haciendo ahora el cambio de variable

$$z = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \left(w - \frac{\beta}{\sqrt{\alpha}}\right),$$

teniendo en cuenta la imparidad de la función  $w \mapsto w \exp\{-w^2\}$  y usando la integral de Gauss concluimos que la integral que queremos calcular vale

$$\exp\left\{\frac{\beta^2}{\alpha}\right\} \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \left(w - \frac{\beta}{\sqrt{\alpha}}\right) \exp\{-w^2\} dw = -\frac{\beta\sqrt{\pi}}{\alpha^{3/2}} \exp\left\{\frac{\beta^2}{\alpha}\right\}.$$

□

Utilizando este resultado con

$$\alpha = -\frac{1}{e(4a + A_v^2)} \quad \text{y} \quad \beta = \frac{1}{4a + A_v^2} (A_z A_v \xi_0 - A_z x - x_0(4a + A_v^2))$$

y simplificando, obtenemos la siguiente expresión para  $I_7$ :

$$I_7(t, x) = 2\sqrt{a}\pi e^{\frac{3}{2}} \left( B_z - \frac{b}{2a} A_z \right) (-A_z A_v \xi_0 + A_z x + x_0(4a + A_v^2)) \\ \times \exp \left\{ \frac{(A_v x + 4a\xi_0)^2}{4a(4a + A_v^2)} + \frac{e}{4a + A_v^2} (A_z A_v \xi_0 - A_z x - x_0(4a + A_v^2))^2 \right\}.$$

Para concluir tan solo falta calcular  $I_8$ :

$$I_8(t, x) = \left( B_v - \frac{b}{2a} A_v \right) \int_{\mathbb{R}} v \exp \left\{ - \left( \frac{A_v^2}{4a} + 1 \right) v^2 + \left( \frac{A_v x}{2a} + 2\xi_0 \right) v \right\} I_{10} dv,$$

donde

$$I_{10}(x, v, t) = \int_{\mathbb{R}} \exp \left\{ - \left( \frac{A_z^2}{4a} + 1 \right) z^2 - \left( \frac{A_z A_v v}{2a} - \frac{A_z x}{2a} - 2x_0 \right) z \right\} dz.$$

Obsérvese que  $I_8$  e  $I_{10}$  son análogas a  $I_7$  e  $I_9$  respectivamente, donde se identifican  $z \leftrightarrow v$ ,  $A_z \leftrightarrow A_v$ ,  $B_z \leftrightarrow B_v$  y  $x_0 \leftrightarrow \xi_0$ . Por tanto, los cálculos ya realizados implican

$$I_8(t, x) = 2\sqrt{a}\pi e^{\frac{3}{2}} \left( B_v - \frac{b}{2a} A_v \right) (-A_z A_v x_0 + A_v x + \xi_0(4a + A_z^2)) \\ \times \exp \left\{ \frac{(A_z x + 4ax_0)^2}{4a(4a + A_z^2)} + \frac{e}{4a + A_z^2} (A_z A_v x_0 - A_v x - \xi_0(4a + A_z^2))^2 \right\}.$$

Ya podemos reconstruir  $J$ , que vendrá como suma de tres expresiones. Si usamos el valor de  $I_6$ , la primera de ellas se puede escribir como

$$\frac{1}{2\sqrt{\pi^3 a}} \exp \left\{ -\frac{1}{4a} x^2 - x_0^2 - \xi_0^2 \right\} \frac{bx}{\sqrt{a}} \pi^{3/2} \exp \left\{ \frac{1}{4a} x^2 + x_0^2 + \xi_0^2 \right\} n(t, x),$$

que depende de la densidad local ya conocida, por lo que el primer sumando de  $J$  es

$$\frac{e^{\frac{2}{2}}}{\sqrt{\pi}} \frac{b}{2a} x \exp \left\{ -e(x - (A_z x_0 + A_v \xi_0))^2 \right\}.$$

De la misma manera podemos calcular la segunda componente

$$\frac{1}{2\sqrt{\pi^3 a}} \exp \left\{ -\frac{1}{4a} x^2 - x_0^2 - \xi_0^2 \right\} I_7(t, x),$$

que conduce a

$$\frac{e^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \left( B_z - \frac{b}{2a} A_z \right) (A_z x + x_0(4a + A_v^2) - A_z A_v \xi_0) \exp \{ \cdot \},$$

donde el argumento de la exponencial viene dado por

$$-e(x^2 - 2(A_z x_0 + A_v \xi_0)x + A_z^2 x_0^2 + A_v^2 \xi_0^2 + 2A_z A_v x_0 \xi_0) = -e(x - (A_z x_0 + A_v \xi_0))^2,$$

tras largas pero sencillas simplificaciones, lo que nos proporciona la expresión definitiva del segundo sumando de la corriente:

$$\frac{e^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} \left( B_z - \frac{b}{2a} A_z \right) (A_z x + x_0(4a + A_v^2) - A_z A_v \xi_0) e^{-e^{(x - (A_z x_0 + A_v \xi_0))^2}}.$$

Finalmente, si intercambiamos  $A_z \leftrightarrow A_v$ ,  $B_z \leftrightarrow B_v$  y  $x_0 \leftrightarrow \xi_0$  podemos conocer el último término:

$$\frac{e^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \left( B_v - \frac{b}{2a} A_v \right) (A_v x + \xi_0(4a + A_z^2) - A_z A_v x_0) e^{-e^{(x - (A_z x_0 + A_v \xi_0))^2}}.$$

Estamos ya en condiciones de escribir la densidad de corriente. Sustituyendo, reagrupando y usando la definición de  $e(t)$  tenemos que la densidad de corriente asociada a WFP con condición inicial maxwelliana es

$$J(t, x) = \frac{e(t)^{3/2}}{\sqrt{\pi}} (f_x(t) x + f_{x_0}(t) x_0 + f_{\xi_0}(t) \xi_0) \exp \left\{ -e^{(x - (A_z x_0 + A_v \xi_0))^2} \right\},$$

donde  $f$ ,  $f_{x_0}$  y  $f_{\xi_0}$  son funciones que dependen exclusivamente del tiempo, y están dadas por

$$\begin{aligned} f_x(t) &= A_z(t) B_z(t) + A_v(t) B_v(t) + 2b(t), \\ f_{x_0}(t) &= (4a(t) + A_v(t)^2) B_z(t) - (2b(t) + A_v(t) B_v(t)) A_z(t), \\ f_{\xi_0}(t) &= 4a(t) + A_z(t)^2 B_v(t) - (2b(t) + A_z(t) B_z(t)) A_v(t). \end{aligned}$$

Finalmente, si elegimos  $x_0 = \xi_0 = 0$  se deducen las fórmulas para  $J$  que presentamos en (3.19) y (3.22), sin más que tener en cuenta los valores de  $A_z$ ,  $A_v$ ,  $B_z$  y  $B_v$  en el caso de la partícula libre y la definición apropiada de  $g(t)$  en el caso del oscilador armónico. A modo de conclusión, presentamos en la siguiente página un esquema con los resultados obtenidos.

SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE WIGNER CON CONDICIÓN INICIAL ARBITRARIA  $W_I$ :

$$W(x, \xi, t) = \int_{\mathbb{R}^2} W_0 \left( x - (A_z(t)z + A_v(t)v), \xi - (B_z(t)z + B_v(t)v), t \right) W_I(z, v) d(z, v), \quad W_0(x, \xi, t) = (4\pi^2 d(t))^{-\frac{d}{2}} \exp \left\{ -\frac{c(t)}{d(t)} |x|^2 + \frac{b(t)}{d(t)} x \xi - \frac{a(t)}{d(t)} |\xi|^2 \right\}.$$

y los coeficientes vienen dados por:

<p>Partícula libre: <math>V = 0</math></p> $a(t) = \frac{1}{4\lambda^2} \left\{ D_{pp} + 4\lambda^2 D_{qq} + 4\lambda D_{pq} + (1 - e^{-2\lambda t}) \left( \frac{D_{pp}}{4\lambda} (e^{-2\lambda t} - 3) - 2D_{pq} \right) \right\},$ $b(t) = \frac{1}{4\lambda^2} (1 - e^{-2\lambda t}) (4\lambda D_{pq} + D_{pp} (1 - e^{-2\lambda t})),$ $c(t) = \frac{D_{pp}}{4\lambda} (1 - e^{-4\lambda t}).$	<p>Oscilador armónico: <math>V(x) = \frac{\omega_0^2}{2} x^2</math></p> $a(t) = \frac{1}{(\lambda_+ - \lambda_-)^2} \left\{ \hat{a}(t) (\lambda_+ e^{\lambda_+ t} - \lambda_- e^{\lambda_- t})^2 + \hat{c}(t) (e^{\lambda_+ t} - e^{\lambda_- t})^2 + \hat{b}(t) (\lambda_+ e^{2\lambda_+ t} + \lambda_- e^{2\lambda_- t} - 2\lambda e^{2\lambda t}) \right\} e^{-4\lambda t},$ $b(t) = -\frac{1}{(\lambda_+ - \lambda_-)^2} \left\{ \omega_0^2 \hat{a}(t) (\lambda_+ e^{2\lambda_+ t} + \lambda_- e^{2\lambda_- t} - 2\lambda e^{2\lambda t}) + \hat{c}(t) (\lambda_- e^{2\lambda_+ t} + \lambda_+ e^{2\lambda_- t} - 2\lambda e^{2\lambda t}) + \hat{b}(t) (2\omega_0^2 (e^{2\lambda_+ t} + e^{2\lambda_- t}) + (\lambda_+ + \lambda_-)^2 e^{2\lambda t}) \right\} e^{-4\lambda t},$ $c(t) = \frac{1}{(\lambda_+ - \lambda_-)^2} \left\{ \hat{a}(t) (e^{\lambda_+ t} - e^{\lambda_- t})^2 + \hat{c}(t) (\lambda_+ e^{\lambda_+ t} - \lambda_- e^{\lambda_- t})^2 + \omega_0^2 \hat{b}(t) (\lambda_+ e^{2\lambda_+ t} + \lambda_- e^{2\lambda_- t} - 2\lambda e^{2\lambda t}) \right\} e^{-4\lambda t},$ $\hat{a}(t) = \frac{\lambda_+}{2\lambda_-} \left[ D_{qq} + \frac{\lambda_-}{\omega_0^2} \left( \frac{\lambda_-}{\omega_0^2} D_{pp} + 2D_{pq} \right) \right] (e^{2\lambda_- t} - 1) + \frac{\lambda_-}{2\lambda_+} \left[ D_{qq} + \frac{\lambda_+}{\omega_0^2} \left( \frac{\lambda_+}{\omega_0^2} D_{pp} + 2D_{pq} \right) \right] (e^{2\lambda_+ t} - 1),$ $\hat{b}(t) = \frac{1}{\lambda} (2\omega_0^2 D_{qq} + D_{pp} + 4\lambda D_{pq}) (e^{2\lambda t} - 1) - \left( \frac{\omega_0^2}{\lambda_+} D_{qq} + \frac{\lambda_+}{\omega_0^2} D_{pp} + 2D_{pq} \right) (e^{2\lambda_+ t} - 1) - \left( \frac{\omega_0^2}{\lambda_-} D_{qq} + \frac{\lambda_-}{\omega_0^2} D_{pp} + 2D_{pq} \right) (e^{2\lambda_- t} - 1),$ $\hat{c}(t) = \frac{\omega_0^2}{2} \left\{ \left( \frac{\omega_0^2}{\lambda_+} D_{qq} + \frac{\lambda_+}{\omega_0^2} D_{pp} + 2D_{pq} \right) (e^{2\lambda_+ t} - 1) + \left( \frac{\omega_0^2}{\lambda_-} D_{qq} + \frac{\lambda_-}{\omega_0^2} D_{pp} + 2D_{pq} \right) (e^{2\lambda_- t} - 1) \right\} - \frac{\omega_0^2}{2\lambda} (2\omega_0^2 D_{qq} + D_{pp} + 4\lambda D_{pq}) (e^{2\lambda t} - 1).$
--	---

DENSIDADES LOCAL Y DE CORRIENTE ASOCIADAS A DICHA SOLUCIÓN CON CONDICIÓN INICIAL GAUSSIANA EN EL CASO UNIDIMENSIONAL:

$$n(t, x) = \frac{(e(t))^{1/2}}{\pi^{1/2}} \exp \left\{ -e(t) (x - (A_z(t)x_0 + A_v(t)\xi_0))^2 \right\}, \quad J(t, x) = \frac{e(t)^{3/2}}{\sqrt{\pi}} (f_x(t)x + f_{x_0}(t)x_0 + f_{\xi_0}(t)\xi_0) \exp \left\{ -e(t) (x - (A_z(t)x_0 + A_v(t)\xi_0))^2 \right\},$$

donde hemos denotado

$$e(t) = \frac{1}{4a(t) + A_z(t)^2 + A_v(t)^2}, \quad f_x(t) = A_z(t) B_z(t) + A_v(t) B_v(t) + 2b(t), \quad f_{x_0}(t) = (4a(t) + A_v(t)^2) B_z(t) - (2b(t) + A_v(t) B_v(t)) A_z(t), \quad f_{\xi_0}(t) = 4a(t) + A_z(t)^2 B_v(t) - (2b(t) + A_z(t) B_z(t)) A_v(t).$$

Los coeficientes  $A_z$ ,  $A_v$ ,  $B_z$ ,  $B_v$  vienen dados por:

<p>Partícula libre: <math>V = 0</math></p> $A_z(t) = 1, \quad A_v(t) = \frac{1 - e^{-2\lambda t}}{2\lambda},$ $B_z(t) = 0, \quad B_v(t) = e^{-2\lambda t}.$	<p>Oscilador armónico: <math>V(x) = \frac{\omega_0^2}{2} x^2</math></p> $A_z(t) = \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} (\lambda_+ e^{-\lambda_- t} - \lambda_- e^{-\lambda_+ t}), \quad A_v(t) = \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} (e^{-\lambda_- t} - e^{-\lambda_+ t}),$ $B_z(t) = \frac{\omega_0^2}{\lambda_+ - \lambda_-} (e^{-\lambda_+ t} - e^{-\lambda_- t}), \quad B_v(t) = \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} (\lambda_+ e^{-\lambda_+ t} - \lambda_- e^{-\lambda_- t}).$
---	--



# Índice alfabético

---

- Cuantización de Weyl, 123
- Densidad de corriente asociada a la función de onda, 38, 67, 82
- Densidad de corriente asociada a la función de Wigner, 29, 84, 124
- Densidad local asociada a la función de onda, 38, 67, 82
- Densidad local asociada a la función de Wigner, 28, 84, 124
- Descomposición de Madelung de una función de onda, 7, 65, 103
- Ecuación de Doebner–Goldin linealizable, 83
- Ecuación de Liouville–Von Neumann, 122
- Ecuación de Schrödinger puramente logarítmica, 83, 91
- Ecuación de Schrödinger–Langevin, 7, 102
- Ecuación de Schrödinger–Langevin generalizada, 104
- Ecuación de Wigner–Fokker–Planck, 4, 28
- Ecuación en la forma de Lindblad, 3
- Ecuación maestra de Caldeira–Leggett, 2
- Ecuación maestra de Caldeira–Leggett, versión cinética, 32
- Ecuación maestra de Diósi en forma de operadores, 3
- Ecuación maestra de Diósi para  $\rho$ , 26
- Ecuación SLC, 9, 82
- Ecuación SLD, 8, 38
- Entalpía de un sistema, 42, 115
- Familia de Doebner–Goldin, 9, 83
- Hipótesis sobre los parámetros de WFP, 27
- Operador de densidad de un sistema cuántico, 122
- Potencial cuántico de Bohm, 30, 70
- Reinterpretación del término de fricción, 105
- Relaciones de clausura del modelo SLD, 35
- Sistema de Schrödinger–Langevin con entalpía, 115
- Sistema hidrodinámico asociado a WFP, 29, 84
- Sistema hidrodinámico de flujo potencial asociado a SLD, 37, 91
- Solución exacta de WFP para el oscilador armónico, 58, 134
- Solución exacta de WFP para la partícula libre, 57, 131
- Tensor de energía cinética asociado a la función de Wigner, 29, 124
- Tensor de esfuerzos asociado a WFP, 30, 85
- Teorema de existencia de argumento para funciones independientes del tiempo, 72
- Teorema de existencia de argumento para la solución de una ecuación de Schrödinger, 76
- Teorema de existencia de solución de SLG, 106

- Teorema de existencia de solución para SLP con entalpía, 116
- Teorema de existencia y unicidad de solución para SLC, 98
- Transformación Gauge que conecta SLC con Schrödinger logarítmica, 83
- Transformada de Wigner, 27
  
- Velocidad media asociada a la función de Wigner, 29
- Velocidad osmótica, 30

# Bibliografía

---

- [1] Adams, A.: *Sobolev spaces*. Academic Press (2005).
- [2] Ambegaokar, V.: Quantum brownian motion and its classical limit. Comunicación presentada en el Congreso del Deutsche Bunsen–Geellschaft für Physikali-che Chemize: “Rate processes in dissipative systems: 50 years after Kramers”, Tutzing, septiembre de 1990.
- [3] Amrouche, C., Ciarlet, P. G., Ciarlet, P. Jr.: Vector and scalar potentials, Poincaré’s theorem and Korn’s inequality. *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I* **345**, 603–608 (2007).
- [4] Amrouche, C., Girault, V.: Decomposition of vector spaces and application to the Stokes problem in arbitrary dimension. *Chekoslov. Math. J.* **44**, 109–140 (1994).
- [5] Ankerhold, J.: Quantum dynamics with strong friction: the quantum Smoluchowski equation and beyond. *Acta Physica Polonica B* **34(7)**, 3569–3579 (2003).
- [6] Ankerhold, J., Grabert, H., Pechukas, P.: Quantum brownian motion with large friction. *Chaos* **15**, 026106 (2005).
- [7] Antonelli, P., Marcati, P.: On the finite energy weak solutions to a system in Quantum Fluid Dynamics. *Comm. Math. Phys.* **287**, 657–686 (2009).
- [8] Arnold, A., Carrillo, J. A., Gamba, I., Shu, C.-W.: Low and high field limits for the Vlasov- and Wigner–Poisson–Fokker–Planck systems. *Transp. Theory Stat. Phys.* **30**, 2-3 (2001).
- [9] Arnold, A., Dharmo, E., Mancini, C.: The Wigner–Poisson–Fokker–Planck system: global-in-time solutions and dispersive effects. *Annales de l’IHP (C)-Analyse non lineaire* **24**, 645–676 (2007).
- [10] Arnold, A., Fagnola, F., Neumann, L.: Quantum Fokker–Planck models: the Lindblad and Wigner approaches. *Quantum Probability and related Topics - Proceedings of the 28th Conference (Series: QP-PQ: Quantum Probability and*

- White Noise Analysis - Vol. 23), J.C. García, R. Quezada, S.B. Sontz (Eds.), World Scientific 2008.
- [11] Arnold, A., López, J. L., Markowich, P. A., Soler, J.: An analysis of quantum Fokker–Planck models: a Wigner function approach. *Rev. Mat. Iberoamericana* **20**, 771–814 (2004).
- [12] Auberson, G., Sabatier, P. C.: On a class of homogeneous nonlinear Schrödinger equations. *J. Math. Phys.* **35**, 4028–4040 (1994).
- [13] Babin, A., Figotin, A.: Some mathematical problems in a neoclassical theory of electric charges. *Discrete Cont. Dynam. Systems A* **27**, 1283–1326 (2010).
- [14] Bacciagaluppi, G.: Nelsonian mechanics revisited. *Found. Phys. Lett.* **12**, 1–16 (1999).
- [15] Benatti, F., Narnhofer, H.: Entropy behaviour under completely positive maps. *Lett. Math. Phys.* **15**, 325–334 (1988).
- [16] Bialynicki–Birula, I., Mycielski, J.: Nonlinear wave mechanics. *Ann. Phys.* **100**, 62–93 (1976).
- [17] Bialynicki–Birula, I., Mycielski, J.: Gaussons: solitons of the logarithmic Schrödinger equation. *Physica Scripta* **20**, 539–544 (1979).
- [18] Bohm, D.: A suggested interpretation of the quantum theory in terms of hidden variables I & II. *Phys Rev.* **85(2)**, 166–179; 180–193 (1952).
- [19] Bokanowski, O., López, J. L., Soler, J.: On an exchange interaction model for quantum transport: the Schrödinger–Poisson–Slater system. *Math. Models Meth. Appl. Sci.* **13(10)**, 1–16 (2003).
- [20] Brezis, H.: *Análisis funcional. Teoría y aplicaciones*. Alianza Editorial (1984).
- [21] Caldeira, A. O., Leggett, A. J.: Path integral approach to quantum Brownian motion. *Physica A* **121**, 587–616 (1983).
- [22] Cañizo, J. A., López, J. L., Nieto, J.: Global  $L^1$  theory and regularity of the 3D nonlinear Wigner–Poisson–Fokker–Planck system. *J. Diff. Equ.* **198**, 356–373 (2004).
- [23] Cazenave, T.: *An introduction to nonlinear Schrödinger equations*. Textos de Métodos Matemáticos 22, Rio de Janeiro (1989).
- [24] Cazenave, T.: Stable solutions of the logarithmic Schrödinger equation. *Nonlinear Analysis T. M. A.* **7**, 1127–1140 (1983).
- [25] Cazenave, T., Haraux, A.: Equations d’évolution avec non linéarité logarithmique. *Annals Fac. Sci. Univ. Toulouse* **2**, 21–55 (1980).

- [26] Cazenave, T., Haraux, A.: *Introduction aux problèmes d'évolution semi-linéaires*. Mathématiques et Applications #1. Ellipses, Paris (1990).
- [27] Carrillo, J.A., Soler, J.: On the VPFP equation with measures in Morrey spaces as initial data. *J. Math. Anal. Appl.* **207**, 475–495 (1997).
- [28] Chebotarev, A. M., Fagnola, F.: Sufficient conditions for conservativity of quantum dynamical semigroups. *J. Funct. Anal.* **118**, 131–153 (1995).
- [29] Cid, C., Dolbeault, J.: Defocusing nonlinear Schrödinger equation: confinement, stability and asymptotic stability. Technical report (2001).
- [30] Colliander, J., Keel, M., Staffilani, G., Takaoka, H., Tao, T.: Global well-posedness for Schrödinger equations with derivative. *SIAM J. Math. Anal.* **33**, 649–669 (2001).
- [31] Cufaro Petroni, N., De Martino, S., De Siena, S., Illuminati, F.: Stochastic-hydrodynamic model of halo formation in charged particle beams. *Phys. Rev. ST Accel. Beams* **6**, 034206 (2003).
- [32] Davidson, M. P.: A model for the stochastic origins of Schrödinger's equation. *J. Math. Phys.* **20**, 1865–1869 (1979).
- [33] Davidson, M. P.: Comments on the nonlinear Schrödinger equation. *Il Nuovo Cimento B* **V116B**, 1291–1296 (2001).
- [34] De Broglie, L.: Wave mechanics and the atomic structure of matter and radiation. *J. Phys.* **8(5)**, 225–241 (1927).
- [35] De Martino, S., Falanga, M., Godano, C., Lauro, G.: Logarithmic Schrödinger-like equation as a model for magma transport. *Europhys. Lett.* **63**, 472–475 (2003).
- [36] De Martino, S., Lauro, G.: Soliton-like solutions for a capillary fluid. *Proceedings of the 12th Conference on WASCOM*, 148–152 (2003).
- [37] Degond, P., Gallego, S., Méhats, F.: Isothermal quantum hydrodynamics. Derivation, asymptotic analysis and simulation. *Multiscale. Model. Simul* **6(1)**, 246–272 (2007).
- [38] Degond, P., Méhats, F., Ringhofer, C.: Quantum energy-transport and drift-diffusion models. *J. Stat. Phys.* **118**, 625–665 (2005).
- [39] Dekker, H.: Quantization of the linearly damped harmonic oscillator. *Phys. Rev. A* **16(5)**, 2126–2134 (1977).
- [40] Dekker, H., Valsakumar, M. C.: A fundamental constraint on quantum mechanical diffusion coefficients. *Phys. Lett.* **104A(2)**, 67–71 (1984).
- [41] Diósi, L.: Caldeira-Leggett master equation and medium temperatures. *Physica A* **199**, 517–526 (1993).

- [42] Diósi, L.: On high-temperature Markovian equation for quantum Brownian motion. *Europhys. Lett.* **22**, 1–3 (1993).
- [43] Doebner, H. D., Goldin, G. A.: On a general nonlinear Schrödinger equation admitting diffusion currents. *Phys. Lett. A* **162**, 397–401 (1992).
- [44] Doebner, H. D., Goldin, G. A., Nattermann, P.: A family of nonlinear Schrödinger equations: linearizing transformations and resulting structure. Antoine, J.-P. *et al.* (ed.) *Quantization, Coherent States and Complex Structures*, 27–31. Plenum (1996).
- [45] Fényes, I.: Eine wahrscheinlichkeitstheoretische begründung und interpretation der Quantenmechanik. *Z. Phys.* **132**, 81–103 (1952).
- [46] Feynman, R. P., Vernon, F. L.: The theory of a general quantum system interacting with a linear dissipative system. *Annals of Physics* **21**, 118 (1963).
- [47] Gamba, I., Gualdani, M. P., Sharp, R.: An adaptable discontinuous Galerkin scheme for the Wigner–Fokker–Planck equation. *Commun. Math. Sci.* **7** (3), 635–664 (2009).
- [48] Gao, S.: Dissipative quantum dynamics with a Lindblad functional. *Phys. Rev. Lett.* **79**(17), 3101–3104 (1997).
- [49] Garbaczewski, P.: Modular Schrödinger equation and dynamical duality. *Phys. Rev. E* **78**, 031101 (2008).
- [50] Gardner, C.: The quantum hydrodynamic model for semiconductor devices. *SIAM J. Appl. Math.* **54**, 409–427 (1994).
- [51] Gérard, P., Markowich, P. A., Mauser, N. J., Poupaud, F.: Homogenization limits and Wigner transforms. *Comm. Pure and Appl. Math.* **50**, 321–377 (1997).
- [52] Gilbarg, D., Trudinger, N.: *Elliptic Partial Differential Equations of Second Order*. Springer Berlin Heidelberg New York (1983).
- [53] Gisin, N.: Microscopic derivation of a class of non-linear dissipative Schrödinger-like equations. *Physica* **111A**, 364–370 (1982).
- [54] Goldin, G., Shtelen, V.: On gauge transformations of Bäcklund type and higher order nonlinear Schrödinger equations. *J. Math. Phys.* **43**(5), 2180–2186 (2002).
- [55] Grabert, H., Schramm, P., Ingold, G.: Quantum Brownian motion: the functional integral approach. *Phys. Rep.* **168**(3), 115–207 (1988).
- [56] Grabert, H., Talkner, P., Weiss, U.: Quantum Theory of the damped harmonic oscillator. *Z. Phys. B–Condensed Matter* **55**, 87–94 (1984).

- [57] Gross, E.: Structure of a quantized vortex in boson system. *Il Nuovo Cimento* **20(3)**, 454–477 (1961).
- [58] Grubin, H., Kreskovsky: Quantum moment balance equations and resonant tunnelling structures. *Solid. State Electr.* **32**, 1071–1075 (1989).
- [59] Guerra, F.: Structural aspects of stochastic mechanics and stochastic field theory. *Phys. Rep.* **77**, 263–312 (1981).
- [60] Guerra, F., Pusterla, M.: A nonlinear Schrödinger equation and its relativistic generalization from basic principles. *Lett. Nuovo Cimento* **34**, 351–356 (1982).
- [61] Guerrero, P.: *Analysis of dissipaton and diffusion mechanisms modeled by nonlinear PDEs in developmental biology and quantum mechanics*. Tesis doctoral (2010).
- [62] Guerrero, P., López, J. L., Montejo-Gómez, J., Nieto, J.: A wavefunction approach to stochastic-mechanical Fokker-Planck dissipation. Prepublicación (2011).
- [63] Guerrero, P., López, J. L., Montejo-Gómez, J., Nieto, J.: Wellposedness of a nonlinear, logarithmic Schrödinger of Doebner-Goldin type modeling quantum dissipation. *Sometido a Journal of nonlinear Sciences* (2010).
- [64] Guerrero, P., López, J. L., Nieto, J.: Global  $H^1$  solvability of the 3D logarithmic Schrödinger equation. *Nonlinear Analysis: Real World Applications* **11**, 79–87 (2010).
- [65] Haake, F., Reibold, R.: Strong damping and low-temperature anomalies for the harmonic oscillator. *Phys. Rev. A* **32(4)**, 2462–2475 (1985).
- [66] Hu, B. L., Paz, J. P., Zhang, Y.: Quantum Brownian motion in a general environment: exact master equation with nonlocal dissipation and colored noise. *Phys. Rev. D* **45(8)**, 2843–2861 (1992).
- [67] Hushwater, V.: Comment on “Inequivalence between the Schrödinger equation and the Madelung hydrodynamic equations”. [arXiv:1005.2420v4](https://arxiv.org/abs/1005.2420v4)
- [68] Iche, G., Nozieres, P.: Quantum brownian motion of a heavy particle: an adiabatic expansion. *Physica* **91A**, 485–506 (1978).
- [69] Isar, A., Sandulescu, A., Scheid, W.: Purity and decoherence in the theory of a damped harmonic oscillator. *Phys. Rev. E* **60(6)**, 6371–6381 (1999).
- [70] Jüngel, A.: *Transport Equations for Semiconductors*. Lecture Notes in Physics 773, Springer-Verlag (2009).
- [71] Jüngel, A., Mariani, M. C., Rial, D.: Local existence of solutions to the transient quantum hydrodynamic equations. *Math. Models Meth. Appl. Sci.* **12**, 485–495 (2002).

- [72] Jüngel, A., Mathes, D.: A derivation of the isothermal quantum hydrodynamic equations using entropy minimization. *Z. Angew. Math. Mech* **85**, 806–814 (2005).
- [73] Kostin, M. D.: On the Schrödinger-Langevin equation. *J. Chem. Phys.* **57**, 3589–3591 (1972).
- [74] Kostin, M. D.: Friction and dissipative phenomena in quantum mechanics. *J. Stat. Phys.* **12**, 145–151 (1975).
- [75] Lauro, G.: A note on a Korteweg fluid and the hydrodynamic form of the logarithmic Schrödinger equation. *Geophys. and Astrophys. Fluid Dynamics* **102**, 373–380 (2008).
- [76] Li, H., Lin, C-K.: Semiclassical limit and well-posedness of nonlinear Schrödinger–Poisson. *EJDE* **93**, 1–17 (2003).
- [77] Lieb, E. H., Loss, M.: *Analysis*. Graduate Studies in Mathematics, AMS (2001).
- [78] Lindblad, G.: On the generators of quantum dynamical semigroups. *Comm. Math. Phys.* **48**, 119–130 (1976).
- [79] Lions, P. L., Paul, T.: Sur les mesures de Wigner. *Rev. Mat. Iberoam.* **9**, 553–618 (1993).
- [80] López, J. L.: Nonlinear Ginzburg–Landau–type approach to quantum dissipation. *Phys. Rev. E.* **69**, 026110 (2004).
- [81] López, J. L., Montejo–Gámez, J.: A hydrodynamic approach to multidimensional dissipation–based Schrödinger models from quantum Fokker–Planck dynamics. *Physica D* **238**, 622–644 (2009).
- [82] López, J. L., Montejo–Gámez, J.: On a rigorous interpretation of the quantum Schrödinger–Langevin operator with applications. *Sometido a Communications in Mathematical Physics* (2011).
- [83] López, J. L., Nieto, J.: Global solutions of the mean–field, very high temperature Caldeira–Leggett master equation. *Quart. Appl. Math.* **64**, 189–199 (2006).
- [84] López, J. L., Soler, J.: Asymptotic behavior to the 3D Schrödinger/Hartree–Poisson and Wigner–Poisson systems. *Math. Models Meth. Appl. Sci.* **10(6)**, 923–943 (2000).
- [85] Madelung, E.: Quantentheorie in hydrodynamischer. *Z. Phys.* **40**, 326 (1927).
- [86] Manfredi, G., Haas, H.: Self-consistent fluid model for a quantum electron gas. *Phys. Rev. B* **64**, 075316 (2001).

- [87] Markowich, P.A.: On the equivalence of the Schrödinger and the quantum Liouville equations. *Math. Models Meth. Appl. Sci.* **11**, 459–469 (1989).
- [88] Markowich, P.A., Ringhofer, C., Schmeiser, C.: *Semiconductor Equations*. Springer, Viena (1990).
- [89] Na, K., Wyatt, R. E.: Decoherence demystified: the hydrodynamic viewpoint. eprint arXiv:quant-ph/0201108v1 (2002).
- [90] Nassar, A.B.: Fluid formulation of a generalised Schrödinger–Langevin equation. *J. Phys. A: Math. Gen* **18**, L509–L511 (1985).
- [91] Nattermann, P., Scherer, W.: Nonlinear gauge transformations and exact solutions of the Doebner–Goldin equation. Doebner, H. D. *et al.* (ed.) *Nonlinear, Deformed and Irreversible Quantum Systems*, 188–199. World Scientific (1995).
- [92] Nelson, E.: Derivation of the Schrödinger equation from Newtonian Mechanics. *Phys. Rev.* **150**, 1079–1085 (1966).
- [93] Nelson, E.: *Dynamical theories of Brownian Motion*. Princeton University Press (1967).
- [94] Ozawa, T.: On the nonlinear Schrödinger equations of derivative type. *Indiana Univ. Math. J.* **45**, 137–163 (1996).
- [95] Pazy, A.: *Semigroups of linear operators and applications to partial differential equations*. Applied Mathematical Sciences 44, Springer, New York (1983).
- [96] Pechukas, P., Ankerhold, J., Grabert, H.: Quantum Smoluchowski equation. *Ann. Phys. (Leipzig)* **9–10**, 794–803 (2000).
- [97] Pitaevskii, L.P.: Vortex line in an imperfect Bose gas. *Soviet Physics JETP-USSR* **13(2)**, 451–454 (1961).
- [98] Pollak, E., Zhang, S.: Quantum dynamics for dissipative systems: A numerical study of the Wigner–Fokker–Planck equation. *J. Chem. Phys.* **118(10)**, 4357–4364 (2003).
- [99] Risken, H.: *The Fokker–Planck equation*. Springer Verlag (1989).
- [100] Rudin, W.: *Real and complex analysis*. McGraw–Hill, New York (1966).
- [101] Sánchez, O., Soler, J.: Long-time dynamics of the Schrödinger–Poisson–Slater system. *J. Stat. Phys.* **114**, 179–204 (2004).
- [102] Sanin, A. L., Smirnovsky, A. A.: Oscillatory motion in confined potential systems with dissipation in the context of the Schrödinger–Langevin–Kostin equation. *Phys. Lett. A* **372**, 21–27 (2007).

- 
- [103] Sparber, C., Carrillo, J. A., Dolbeault, J., Markowich, P. A.: On the long time behavior of the quantum Fokker–Planck equation. *Monatsh. Math.* **141**(3), 237–257 (2004).
- [104] Stockburger, J., Grabert, H.: Non–Markovian quantum state diffusion. *Chem. Phys.* **268**, 249–256 (2001).
- [105] Strocio, M. A.: Moment–equation representation of the dissipative quantum Liouville equation. *Superlattices and microstructures* **2**, 83–87 (1986).
- [106] Tanimura, Y.: Stochastic Liouville, Langevin, Fokker–Planck, and master equation approaches to quantum dissipative systems. *J. Phys. Soc. Japan* **75**(8), 082001 (2006).
- [107] Teismann, H.: Square–integrable solutions to a family of nonlinear Schrödinger equations from nonlinear quantum theory. *Reports Math. Phys.* **56**, 291–310 (2005).
- [108] Unruh, W. G., Zurek, W. H.: Reduction of a wave packet in quantum Brownian motion. *Phys. Rev. D* **40**(4), 1071–1094 (1989).
- [109] Vacchini, B.: Completely positive quantum dissipation. *Phys. Rev. Lett.* **84**(7), 1374–1377 (2000).
- [110] Von Neumann, J.: *Fundamentos matemáticos de la mecánica cuántica*. Textos universitarios, 9. Consejo Superior de Investigaciones Científicas (1991).
- [111] Wallstrom, T. C.: Inequivalence between the Schrödinger equation and the Madelung hydrodynamic equations. *Phys. Rev. A* **49**, 1613–1617 (1994).
- [112] Weiss, U.: *Quantum dissipative systems*, World Scientific, Singapore, 1993.
- [113] Weyl, H.: *Quantenmechanik und Gruppentheorie*. *Zeitschrift für Physik* **46**, 1–46 (1927).
- [114] Wigner, E.: On the quantum correction for thermodynamic equilibrium. *Phys. Rev.* **40**, 749–759 (1932).
- [115] Yan, Y.: Quantum Fokker–Planck theory in a non–Gaussian–Markovian medium. *Phys. Rev. A* **58**(4), 2721–2732 (1998).
- [116] Zerbe, C., Hänggi, P.: Brownian parametric quantum oscillator with dissipation. *Phys. Rev. E* **52**(2), 1533–1543 (1995).



Universidad de Granada

