



UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE LA MIXTECA

“SOBRE LA DISTRIBUCIÓN DE ESTADOS CUÁNTICOS PARA LA
ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER FRACCIONARIA”

TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE:

INGENIERO EN FÍSICA APLICADA

PRESENTA:

YERI JONATAN MENDOZA GARCÍA

DIRECTOR DE TESIS:

DR. HUGO DAVID SÁNCHEZ CHÁVEZ

CODIRECTOR DE TESIS:

DR. LEONARDO FLORES CANO

HUAJUAPAN DE LEÓN, OAXACA, AGOSTO DE 2021

A mis padres

Agradecimientos

Quiero agradecer a la Universidad Tecnológica de la Mixteca y su personal por la prestación de instalaciones e infraestructura para nuestra formación profesional y por facilitar un ambiente saludable para la misma. A su cuerpo académico por su compromiso con la educación y por compartir su conocimiento con los alumnos de la institución.

Agradezco de forma especial al Dr. Leonardo Flores Cano por brindar sus conocimientos para la realización de este trabajo y por su infinita paciencia. Gracias al Dr. Hugo David Sánchez Chávez por ser parte esencial de este trabajo. A mis sinodales, Dr. Ricardo Rosas Rodríguez, Dr. Adolfo Maceda Méndez y al Dr. Maxwell Gustavo Jiménez Escamilla por su apoyo desde un principio para la realización del trabajo, por tomarse su tiempo para la revisión del mismo, sus comentarios y aportes .

Gracias a mis compañeros, amigos, por su amistad y cariño durante este tiempo en la carrera.

Agradezco enormemente a mis padres por su apoyo incondicional. Por brindarnos a mis hermanos y a mí la oportunidad de completar nuestros estudios.

Gracias a aquellas personas que de una u otra manera formaron parte de este trayecto.

Resumen

Se presenta un análisis de la distribución de los estados cuánticos para la ecuación de Schrödinger fraccionaria para el caso de un pozo de potencial infinito. Para ello, se procedió a corroborar los resultados manejados por Laskin en algunos de sus trabajos para el pozo de potencial unidimensional, para luego realizar la generalización a 3D y así, mostrar que la dependencia de los valores de energía del sistema siguen una ley de potencias establecida por α , valor del cual depende el operador manejado en el trabajo. Con la generalización se procedió a calcular el número de modos $N(E)$ permitidos para la partícula en cuestión.

Índice general

Agradecimientos	III
Resumen	V
Índice de figuras	XI
1. Aspectos preliminares	1
1.1. Introducción	1
1.2. Planteamiento del problema	2
1.3. Justificación	3
1.4. Hipótesis	3
1.5. Objetivos	3
1.5.1. Objetivo general	3
1.5.2. Objetivos específicos	4
1.6. Metas	4
1.7. Limitaciones de la tesis	4
2. Marco teórico	5
2.1. Cálculo fraccionario	5
2.1.1. Operadores fraccionarios	6
2.1.1.1. Operadores de Riemann-Liouville	6
2.1.1.2. Operador de Caputo	8
2.1.1.3. Operador de Grünwald-Letnikov	10
2.1.1.4. Operador de Riesz	10

2.1.1.5.	Operador de Hausdorff	12
2.1.2.	Características de los operadores fraccionarios	13
2.2.	Geometría fractal	14
2.2.1.	Fractales	14
2.2.2.	Medidas fraccionarias	17
2.2.2.1.	Medida de Hausdorff	18
2.2.2.2.	Dimensión de Hausdorff	20
2.2.2.3.	Dimensión de conteo de cajas	21
2.2.3.	Relación con el cálculo fraccionario	22
2.3.	Ecuaciones diferenciales fraccionarias	25
2.3.1.	Ecuación parabólica: difusión anómala	25
2.3.1.1.	Procesos subdifusivos	27
2.3.1.2.	Procesos superdifusivos	28
2.3.2.	Método de transformadas	29
2.3.2.1.	Transformada de Fourier	30
2.3.2.2.	Transformada de Mellin	32
2.3.2.3.	Transformada de Laplace	32
2.4.	Mecánica cuántica	33
Estado		34
Principio de superposición		36
Significado físico de la función psi		37
2.4.1.	Ecuación de Schrödinger	38
2.4.2.	Pozo de potencial y otros casos	39
2.5.	Mecánica cuántica fraccionaria	41
2.5.1.	Formulación	42
2.5.2.	Partícula libre	47
3.	Ejemplos de la ecuación de Schrödinger fraccionaria existentes	49

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	IX
4. Análisis de la distribución de estados cuánticos para el pozo de potencial	57
4.1. Pozo de potencial unidimensional	59
4.2. Generalización al caso del pozo 3D	61
4.3. Densidad de estados	62
5. Resultados y discusión	65
6. Conclusiones	69
Bibliografía	70
A. Pozo de potencial y partícula libre	79
A.1. Ecuación de Schrödinger	79
A.2. Pozo de potencial unidimensional	80
A.3. Partícula libre unidimensional	82
B. Pozo de potencial para la ecuación de Schrödinger fraccionaria	83
B.1. Pozo de potencial unidimensional	83
B.2. Pozo de potencial tridimensional	86
C. Modelo de Kroning-Penney	89

Índice de figuras

2.1.	<i>Conjuntos fractales</i>	15
2.2.	<i>Curva de Koch donde $D = 1,262$. (a) Construcción de la curva de Koch F. En cada iteración, el tercio de en medio de cada intervalo se reemplaza con otros dos lados de un triángulo equilátero. (b) Copo de nieve obtenido a partir de curvas de Koch.</i>	16
2.3.	<i>Gráfica de $\mathcal{H}^D(A)$ contra D para un conjunto A. La dimensión de Hausdorff es el valor de D al cual ocurre el salto de ∞ a 0.</i>	21
2.4.	<i>Movimiento de un punto que experimenta movimiento Browniano.</i>	26
2.5.	<i>Trayectorias de vuelos de Lévy (derecha) de índice $\mu = 1,5$ y caminata aleatoria (izquierda) con el mismo número de pasos (7000).</i>	29
2.6.	<i>Pozo de potencial unidimensional y su solución.</i>	40
4.1.	<i>Esquema de Rayleigh para el conteo del número de valores permitidos para n_x, n_y y n_z donde $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$ es menor que r^2.</i>	63
C.1.	<i>Comparación entre el potencial real en un sólido y el modelo de Kroning-Penney.</i>	89
C.2.	<i>Esquema de los valores permitidos y los valores prohibidos de energía</i>	91
C.3.	<i>Relación de dispersión de una onda de Bloch</i>	92

Capítulo 1

Aspectos preliminares

1.1. Introducción

Desde la concepción del cálculo, los avances de la ciencia han ido en aumento. Gracias a esta herramienta hemos podido dar pasos enormes hacia la resolución de problemas que aquejan al mundo, tanto de las matemáticas como de la física.

Desde la segunda mitad del siglo XX el cálculo fraccionario ha sido tomado en cuenta para la modelación de fenómenos caóticos, en donde los modelos de cálculo de orden entero no podían ser usados de forma contundente. Se han encontrado aplicaciones en campos de la ciencia y la ingeniería incluyendo flujo de fluidos, reología, transporte difusivo, conexiones eléctricas, teoría electromagnética y probabilidad [1]. Su uso ha sido exitoso para la descripción de cinética anómala, transporte, caos y en el caso de la difusión anómala en presencia o ausencia de una velocidad externa o campo de fuerza, es una de las herramientas más fuertes para su modelación [2].

Esta herramienta guarda una profunda relación con los sistemas dinámicos y caóticos, por tal motivo, se ha venido extendiendo su uso para la modelación de procesos de tal naturaleza.

La dinámica caótica puede ser considerada como el fenómeno físico que une la evolución regular de los sistemas con el azar [3]. Entre estos sistemas podemos encontrar los procesos de difusión presentes en la naturaleza como el movimiento Browniano.

La generalización de la ecuación de difusión, obteniendo una ecuación con derivadas de orden

fraccionario, genera una distribución de Lévy. Esto demuestra que los vuelos de Lévy pueden ser considerados como una generalización natural del movimiento Browniano; la base para esta generalización es la teoría de distribuciones de probabilidad estables desarrollada por Lévy [4]. El uso de la herramienta del cálculo fraccionario como forma alternativa de descripción en la mecánica cuántica está en pleno comienzo. La aproximación de Feynman y Hibbs [5] usando integrales de trayectoria sobre trayectorias Brownianas para hacer la aproximación de la ecuación de Schrödinger estándar (no fraccionaria) fue el primer intento exitoso de aplicación del concepto de fractalidad, el cual fue introducido por Mandelbrot [6].

En años recientes, Laskin introdujo la generalización de la ecuación de Schrödinger, siguiendo el mismo procedimiento de Feynman, a través de integrales de trayectoria sobre trayectorias de los vuelos de Lévy, introduciendo así una nueva extensión del concepto de fractalidad [7–10]. A partir de los trabajos de Laskin, numerosos artículos fueron apareciendo, en dichos artículos se hacía uso de las ecuaciones establecidas por Laskin para la solución de los problemas clásicos de la mecánica cuántica estándar como son la partícula libre, el pozo de potencial, y penetración de barrera, para así poder hacer las comparaciones correspondientes en los resultados para cada caso.

Trabajos como el de Weyl sobre el crecimiento asintótico de los eigenvalores del laplaciano en dominios limitados con condiciones de frontera de Dirichlet y Neumann para la ecuación de onda de Helmholtz bidimensional, introduciendo una función de conteo, nos muestran que la cantidad de estados (para el caso de la ecuación de Schrödinger) presentes en la cavidad depende tanto del área de la cavidad, así como de la dimensión en la cual se está desarrollando [11].

En este trabajo se pretende analizar la distribución de los estados cuánticos en el espacio fase para el caso del pozo de potencial haciendo uso de la ecuación de Schrödinger fraccionaria, pretendiendo así encontrar una conexión entre el orden del operador de la ecuación de Schrödinger fraccionaria y su distribución de estados cuánticos.

1.2. Planteamiento del problema

La dinámica de un sistema complejo como dinámica de un sistema caótico o la propagación de ondas en medios fractales, está asociada a ecuaciones diferenciales de orden fraccionario.

En la búsqueda de formas alternativas para la modelación del comportamiento de fenómenos naturales que no siguen patrones de orden entero, se pretende explorar la posibilidad de modelar sistemas cuánticos a través de la ecuación de Schrödinger fraccionaria y sus estados cuánticos asociados.

1.3. Justificación

Existen trabajos en teoría cuántica donde se supone que, si el espacio es fractal, se puede modelar el sistema mediante una ecuación de Schrödinger fraccionaria, lo cual es de interés para las teorías de branas¹ donde se postula el plegamiento del espacio en escalas muy por debajo de las atómicas [12, 13]. También se ha establecido una conexión con la dinámica en los modelos del origen del universo dado el plegamiento complejo del espacio tiempo. El trabajo podría ayudar en la comprensión de los modelos cuánticos que se podrían plantear.

1.4. Hipótesis

Es posible modelar mediante la ecuación de Schrödinger fraccionaria sistemas cuánticos en un medio de geometría fractal. Se obtendrá una descripción más detallada del comportamiento del fenómeno si se incluye información del medio donde se desarrolla.

1.5. Objetivos

1.5.1. Objetivo general

Establecer una conexión entre el orden del operador de la ecuación de Schrödinger fraccionaria y la distribución posiblemente fractal de sus estados cuánticos.

¹En cosmología de branas, el término “brana” se utiliza para referirse a los objetos similares al universo cuatri-dimensional que se mueven en un “bulk” (sustrato) de mayor dimensión.

1.5.2. Objetivos específicos

- Resolver ecuación de Schrödinger fraccionaria.
- Analizar la distribución de estados cuánticos obtenida de la solución.

1.6. Metas

- Revisión y comprensión de la literatura correspondiente a la geometría fractal y el cálculo fraccionario.
- Revisión y comprensión de la literatura correspondiente a la base para la formulación de la mecánica cuántica fraccionaria.
- Aprender y aplicar cálculo fraccionario para la solución de la ecuación de Schrödinger fraccionaria.
- Obtener la solución de la ecuación de Schrödinger fraccionaria y obtener la distribución de estados.

1.7. Limitaciones de la tesis

Este trabajo abarca las soluciones a la ecuación de Schrödinger en su versión generalizada (o fraccionaria) para el caso en que se aplican condiciones de frontera cero usando un operador Laplaciano fraccional en el operador Hamiltoniano. Aunque el operador originalmente establecido en la formulación de la mecánica cuántica fraccionaria se establece vía integración global, un operador modificado a partir de las condiciones de frontera establecidas en el problema, puede producir resultados adecuados para la solución del problema. Este trabajo se limita a la solución del problema de eigenvalores haciendo uso de este operador diferente.

Capítulo 2

Marco teórico

Casi al mismo tiempo en que el cálculo de orden entero fue concebido, un grupo de matemáticos empezó por indagar qué sucedería en el caso en que el orden de dicho cálculo no fuese entero. Este problema en principio fue meramente un ejercicio matemático, donde el objetivo era mostrar el cómo sería el procedimiento para la realización de dicho cálculo y fue donde matemáticos como Euler, Lacroix, Laplace y Fourier tuvieron alguna injerencia para su desarrollo.

No fue sino hasta los años 1823 – 1826 cuando Abel hizo uso del cálculo fraccionario para la resolución del problema de la tautócrona, y aunque sus investigaciones no fueron enfocadas a generalizar la diferenciación, jugaron un papel importante en el desarrollo de estas ideas. De 1832 a 1837 aparecieron los trabajos de Liouville, que lo hicieron por derecho el creador de la teoría de la integro-diferenciación fraccional [14].

2.1. Cálculo fraccionario

El cálculo fraccionario es la rama del cálculo que generaliza los operadores de derivada e integral de una función a un orden arbitrario α (real o complejo) [15]. En el cálculo infinitesimal, tradicionalmente se suele asociar el concepto del orden de los operadores derivada (D) e integral (J) de una función $f(x)$ a un entero positivo [16].

Mientras los operadores de orden entero tienen interpretaciones físicas y geométricas, los ope-

radores de orden fraccionario no tienen aún una clara interpretación ni física ni geométrica.

2.1.1. Operadores fraccionarios

La definición general de un operador coincide con la definición de función (mapeo). Dados dos conjuntos X y Y , un operador (A) entre ellos dos es una asociación que a cada elemento de X le asigna un elemento único de Y .

Aunque no existe forma única alguna para la definición de los operadores fraccionarios, estos comparten la característica de que cuando $\alpha \rightarrow n$, estos operadores retoman su forma conocida en el cálculo de orden entero.

Entre los operadores más importantes se encuentran los operadores de Riemann-Liouville, el operador de Caputo, el operador de Riesz, entre otros.

2.1.1.1. Operadores de Riemann-Liouville

La idea de una integración fraccionaria está conectada con la ecuación integral de Abel

$$\frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^x \frac{\varphi(t)dt}{(x-t)^{1-\alpha}} = f(x), \quad x > 0, \quad (2.1.1)$$

donde $0 < \alpha < 1$. Su solución lleva a la construcción de la derivación fraccionaria como una operación inversa de la integración fraccionaria [14].

Sea $\Omega = [a, b]$ ($-\infty < a < b < \infty$) un intervalo finito sobre \mathbb{R} . Las integrales fraccionarias de Riemann-Liouville $I_{a+}^\alpha f$ y $I_{b-}^\alpha f$ de orden $\alpha \in \mathbb{C}(\Re(\alpha) > 0)$ están definidas como [14, 15]:

$$(I_{a+}^\alpha f)(x) := \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x \frac{f(t)dt}{(x-t)^{1-\alpha}} \quad (x > a; \Re(\alpha) > 0) \quad (2.1.2)$$

y

$$(I_{b-}^\alpha f)(x) := \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_x^b \frac{f(t)dt}{(t-x)^{1-\alpha}} \quad (x < b; \Re(\alpha) > 0), \quad (2.1.3)$$

donde $\Gamma(\alpha)$ es la función Gamma. Estas integrales se conocen como integrales fraccionarias por el lado izquierdo y por el lado derecho, respectivamente. Cuando $\alpha = n \in \mathbb{N}$, las definiciones

(2.1.2) y (2.1.3) coinciden con las integrales n -ésimas de la forma:

$$\begin{aligned} (I_{a+}^n f)(x) &= \int_a^x dt_1 \int_a^{t_1} dt_2 \cdots \int_a^{t_{n-1}} f(t_n) dt_n \\ &= \frac{1}{(n-1)!} \int_a^x (x-t)^{n-1} f(t) dt; \quad (n \in \mathbb{N}), \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

$$\begin{aligned} (I_{b-}^n f)(x) &= \int_x^b dt_1 \int_{t_1}^b dt_2 \cdots \int_{t_{n-1}}^b f(t_n) dt_n \\ &= \frac{1}{(n-1)!} \int_x^b (t-x)^{n-1} f(t) dt; \quad (n \in \mathbb{N}). \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

Para una función $f(x)$ dada en un intervalo $[a, b]$, a las expresiones

$$(D_{a+}^\alpha f)(x) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dx} \int_a^x \frac{f(t) dt}{(x-t)^\alpha} \quad (2.1.6)$$

y

$$(D_{b-}^\alpha f)(x) = -\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dx} \int_x^b \frac{f(t) dt}{(t-x)^\alpha} \quad (2.1.7)$$

se les conoce como derivadas fraccionarias de orden α , $0 < \alpha < 1$, por el lado izquierdo y por el lado derecho, respectivamente.

Cuando $\alpha \geq 1$, usando $\alpha = [\alpha] + \{\alpha\}$, donde $[\alpha]$ es la parte entera del número α y $\{\alpha\}$ la parte fraccionaria, $0 \leq \{\alpha\} < 1$, se tiene que

$$\begin{aligned} (D_{a+}^\alpha f)(x) &:= \left(\frac{d}{dx} \right)^n (I_{a+}^{n-\alpha} f)(x); \quad (n = [\Re(\alpha)] + 1; x > a) \\ &= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \left(\frac{d}{dx} \right)^n \int_a^x \frac{f(t) dt}{(x-t)^{\alpha-n+1}}, \end{aligned} \quad (2.1.8)$$

$$\begin{aligned} (D_{b-}^\alpha f)(x) &:= \left(-\frac{d}{dx} \right)^n (I_{b-}^{n-\alpha} f)(x); \quad (n = [\Re(\alpha)] + 1; x < b) \\ &= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \left(-\frac{d}{dx} \right)^n \int_x^b \frac{f(t) dt}{(t-x)^{\alpha-n+1}}, \end{aligned} \quad (2.1.9)$$

donde $[\Re(\alpha)]$ representa la parte entera de $\Re(\alpha)$. Cuando $\alpha = n \in \mathbb{N}$, las definiciones (2.1.8) y (2.1.9) coinciden con las integrales n -ésimas de la forma

$$\begin{aligned} (D_{a+}^0 f)(x) &= (D_{b-}^0 f)(x) = f(x), \\ (D_{a+}^n f)(x) &= f^{(n)}(x), \\ (D_{b-}^n f)(x) &= (-1)^{(n)} f^{(n)}(x). \end{aligned} \quad (2.1.10)$$

Si $\Re(\alpha) = 0$ ($\alpha \neq 0$), las integrales y derivadas fraccionarias de orden puramente imaginario se definen mediante

$$I_{a+}^{i\theta} = \frac{1}{\Gamma(1+i\theta)} \frac{d}{dx} \int_a^x (x-t)^{i\theta} f(t) dt, \quad (2.1.11)$$

$$I_{b-}^{i\theta} = \frac{1}{\Gamma(1+i\theta)} \frac{d}{dx} \int_x^b (t-x)^{i\theta} f(t) dt, \quad (2.1.12)$$

y

$$\left(D_{a+}^{i\theta} f\right)(x) = \frac{1}{\Gamma(1-i\theta)} \frac{d}{dx} \int_a^x \frac{f(t) dt}{(x-t)^{i\theta}} \quad (\theta \in \mathbb{R} \setminus 0; x > a), \quad (2.1.13)$$

$$\left(D_{b-}^{i\theta} f\right)(x) = -\frac{1}{\Gamma(1-i\theta)} \frac{d}{dx} \int_x^b \frac{f(t) dt}{(t-x)^{i\theta}} \quad (\theta \in \mathbb{R} \setminus 0; x < b). \quad (2.1.14)$$

2.1.1.2. Operador de Caputo

Sea $[a, b]$ un intervalo finito de la línea real \mathbb{R} , y sean $D_{a+}^\alpha[f(t)](x) \equiv (D_{a+}^\alpha f)(x)$ y $D_{b-}^\alpha[f(t)](x) \equiv (D_{b-}^\alpha f)(x)$ las derivadas fraccionarias de Riemann-Liouville de orden $\alpha \in \mathbb{C}$ ($\Re(\alpha) \geq 0$) definidas por (2.1.8) y (2.1.9) respectivamente. Las derivadas fraccionarias $({}^C D_{a+}^\alpha f)(x)$ y $({}^C D_{b-}^\alpha f)(x)$ de orden $\alpha \in \mathbb{C}$ $\Re(\alpha) \geq 0$ sobre $[a, b]$ son definidas por medio de las anteriores derivadas fraccionarias de Riemann-Liouville mediante [15, 17, 18]

$$({}^C D_{a+}^\alpha f)(x) := \left(D_{a+}^\alpha \left[f(t) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f^{(k)}(a)}{k!} (t-a)^k \right] \right) (x) \quad (2.1.15)$$

y

$$({}^C D_{b-}^\alpha f)(x) := \left(D_{b-}^\alpha \left[f(t) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f^{(k)}(b)}{k!} (b-t)^k \right] \right) (x), \quad (2.1.16)$$

respectivamente, donde

$$n = [\Re(\alpha)] + 1 \text{ para } \alpha \notin \mathbb{N}_0; \quad n = \alpha \text{ para } \alpha \in \mathbb{N}_0. \quad (2.1.17)$$

Estas derivadas se denominan derivadas fraccionarias de Caputo de orden α del lado izquierdo y del lado derecho, respectivamente.

En particular, cuando $0 < \Re(\alpha) < 1$, las relaciones (2.1.15) y (2.1.16) toman las formas siguientes

$$({}^C D_{a+}^\alpha f)(x) = (D_{a+}^\alpha [f(t) - f(a)])(x), \quad (2.1.18)$$

$$({}^C D_{b-}^\alpha f)(x) = (D_{b-}^\alpha [f(t) - f(b)])(x). \quad (2.1.19)$$

Si $\alpha \notin \mathbb{N}_0$ y $y(x)$ es una función para la cual las derivadas fraccionarias de Caputo $({}^C D_{a+}^\alpha f)(x)$ y $({}^C D_{b-}^\alpha f)(x)$ de orden $\alpha \in \mathbb{C}(\Re(\alpha) \geq 0)$ existen en conjunto con las derivadas fraccionarias de Riemann-Liouville $(D_{a+}^\alpha f)(x)$ y $(D_{b-}^\alpha f)(x)$, entonces, están conectadas una con otra mediante las siguientes relaciones

$$({}^C D_{a+}^\alpha f)(x) = (D_{a+}^\alpha f)(x) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f^{(k)}(a)}{\Gamma(k - \alpha + 1)} (x - a)^{k-\alpha}; \quad (n = [\Re(\alpha)] + 1) \quad (2.1.20)$$

y

$$({}^C D_{b-}^\alpha f)(x) = (D_{b-}^\alpha f)(x) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f^{(k)}(b)}{\Gamma(k - \alpha + 1)} (b - x)^{k-\alpha}; \quad (n = [\Re(\alpha)] + 1). \quad (2.1.21)$$

En particular, cuando $0 < \Re(\alpha) < 1$, tenemos

$$({}^C D_{a+}^\alpha f)(x) = (D_{a+}^\alpha f)(x) - \frac{f(a)}{\Gamma(1 - \alpha)} (x - a)^{-\alpha}, \quad (2.1.22)$$

$$({}^C D_{b-}^\alpha f)(x) = (D_{b-}^\alpha f)(x) - \frac{f(b)}{\Gamma(1 - \alpha)} (b - x)^{-\alpha}. \quad (2.1.23)$$

Si $\alpha \notin \mathbb{N}_0$, entonces las derivadas fraccionarias de Caputo (2.1.15) y (2.1.16) coinciden con las derivadas fraccionarias de Riemann-Liouville (2.1.8) y (2.1.9) en los siguientes casos:

$$({}^C D_{a+}^\alpha f)(x) = (D_{a+}^\alpha f)(x), \quad (2.1.24)$$

si $f(a) = f'(a) = \dots = f^{(n-1)}(a) = 0$ ($n = [\Re(\alpha)] + 1$); y

$$({}^C D_{b-}^\alpha f)(x) = (D_{b-}^\alpha f)(x), \quad (2.1.25)$$

si $f(b) = f'(b) = \dots = f^{(n-1)}(b) = 0$ ($n = [\Re(\alpha)] + 1$).

En particular, cuando $0 < \Re(\alpha) < 1$, tenemos

$$({}^C D_{a+}^\alpha f)(x) = (D_{a+}^\alpha f)(x), \text{ cuando } f(a) = 0, \quad (2.1.26)$$

$$({}^C D_{b-}^\alpha f)(x) = (D_{b-}^\alpha f)(x), \text{ cuando } f(b) = 0. \quad (2.1.27)$$

Si $\alpha = n \in \mathbb{N}_0$ y la derivada usual $f^{(n)}(x)$ de orden n existe, entonces $({}^C D_{a+}^n f)(x)$ coincide con $f^{(n)}(x)$, mientras que $({}^C D_{b-}^n f)(x)$ coincide con $f^{(n)}(x)$ multiplicada por la constante $(-1)^n$:

$$({}^C D_{a+}^n f)(x) = f^{(n)}(x) \text{ y } ({}^C D_{b-}^n f)(x) = (-1)^n f^{(n)}(x) \quad (n \in \mathbb{N}). \quad (2.1.28)$$

Las derivadas fraccionarias de Caputo $({}^C D_{a+}^\alpha f)(x)$ y $({}^C D_{b-}^\alpha f)(x)$ están definidas para funciones $f(x)$ para las cuales las derivadas fraccionarias de Riemann-Liouville del lado derecho de (2.1.15) y (2.1.16) existen.

2.1.1.3. Operador de Grünwald-Letnikov

Una función $f(x)$, la cual es diferenciable a orden n , admite la fórmula

$$f^n(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{(\Delta_h^n f)(x)}{h^n}, \quad (2.1.29)$$

donde $(\Delta_h^n f)(x)$ es una diferencia finita de orden $n \in \mathbb{N}_0$ de la función $f(x)$ con tamaño de paso $h \in \mathbb{R}$ y centrado en el punto $x \in \mathbb{R}$. Esta igualdad puede ser usada para definir una derivada fraccionarias reemplazando n por $\alpha > 0$ ($\alpha \in \mathbb{R}$) en (2.1.29). Esta aproximación es natural desde el punto de vista del desarrollo del análisis matemático y fue sugerida por Grünwald y Letnikov [14].

Para un intervalo finito $[a, b]$, las derivadas fraccionarias de orden $\alpha > 0$ del lado izquierdo y lado derecho de Grünwald-Letnikov están definidas como [15, 17, 19]

$$f_{a+}^\alpha(x) = \lim_{h \rightarrow +0} \frac{(\Delta_{h,a+}^\alpha f)(x)}{h^\alpha} \quad (2.1.30)$$

y

$$f_{b-}^\alpha(x) = \lim_{h \rightarrow +0} \frac{(\Delta_{h,b-}^\alpha f)(x)}{h^\alpha}, \quad (2.1.31)$$

donde

$$(\Delta_{h,a+}^\alpha f)(x) = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{x-a}{h} \rfloor} (-1)^k \binom{\alpha}{k} f(x - kh) \quad (x \in \mathbb{R}; h > 0; \alpha > 0), \quad (2.1.32)$$

$$(\Delta_{h,b-}^\alpha f)(x) = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{b-x}{h} \rfloor} (-1)^k \binom{\alpha}{k} f(x + kh) \quad (x \in \mathbb{R}; h > 0; \alpha > 0). \quad (2.1.33)$$

Las series en (2.1.32) y (2.1.33) convergen absoluta y uniformemente para cada $\alpha > 0$ y para cada función limitada $f(x)$.

2.1.1.4. Operador de Riesz

El Laplaciano ordinario se define como la segunda derivada ordinaria de una función de una variable o la suma de las segundas parciales ordinarias de una función de varias variables en un espacio cartesiano físico o abstracto. Físicamente, el Laplaciano ordinario describe un proceso de difusión ordinario en un medio isotrópico mediado por caminantes aleatorios inactivos que

pisan sitios vecinos o cercanos a una cuadrícula idealizada, pero sin poder realizar saltos largos. En las ciencias físicas, el Laplaciano ordinario aparece como una contribución a una ley de conservación o ecuación debido a un flujo difusivo de especies según la ley de Fick, un flujo térmico conductivo según la ley de Fourier o un estrés viscoso según la ecuación constitutiva de Newton. Una suposición implícita es que la velocidad de transporte de un campo de interés en una determinada ubicación está determinada por una variable de campo apropiada en esa ubicación, independiente de la estructura global del campo transportado.

El Laplaciano fraccionario, también llamado derivada fraccionaria de Riesz, describe un proceso de difusión inusual debido a desplazamientos aleatorios ejecutados por puentes que pueden cambiar a sitios vecinos o cercanos, y también realizar excursiones a sitios remotos a través de vuelos de Lévy. Se han observado o alegado vuelos literales o conceptuales en una variedad de aplicaciones, incluido el movimiento de fluidos turbulentos y el transporte de material en medios fracturados. En el contexto de la mecánica, el Laplaciano fraccionario describe el movimiento de una cadena o conjunto de partículas que están conectadas por resortes elásticos no solo a sus vecinos más cercanos, sino también a todas las demás partículas. La constante de resorte disminuye con la separación de partículas, mientras que la matriz de partículas puede describir una configuración ordinaria o fractal.

Un concepto físico clave que surge de la noción del Laplaciano fraccionario es el flujo difusivo fraccionario. El flujo generalizado asociado al Laplaciano fraccionario provee expresiones para la razón de transporte en una cierta ubicación como una integral de una variable de campo apropiada sobre un dominio de influencia apropiado. El flujo difusivo fraccionario en una cierta ubicación se ve afectado por el estado del campo en todo el espacio. Así, el Laplaciano fraccionario en un contexto abstracto más general, describe la contribución a una ley de conservación de un proceso no local que se ve afectado no solo por las condiciones locales, sino también por el estado global de un campo de interés en un momento dado [20].

Estas operaciones de integración y derivación fraccionarias en espacios Euclidianos n -dimensionales \mathbb{R}^n ($n \in \mathbb{N}$) son potencias fraccionales $(-\Delta)^{\alpha/2}$ del operador Laplaciano. Para $\alpha \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ y funciones suficientemente buenas¹ $f(x) = f(x_1, \dots, x_n)$ [14, 15, 21]

¹Una función suficientemente buena se refiere, por ejemplo, a funciones que son continuamente diferenciables hasta el orden n y tal que $f^{(k)}(x) \in L_1(\mathbb{R}^1)$, $k = 0, 1, 2, \dots, n$ [14].

$$(-\Delta)^{\alpha/2} f = \mathcal{F}^{-1} |\mathbf{x}|^{-\alpha} \mathcal{F} f = \begin{cases} I^\alpha f, & \Re(\alpha) > 0, \\ D^{-\alpha} f, & \Re(\alpha) < 0, \end{cases} \quad (2.1.34)$$

donde

$$\mathcal{F}\{f(x)\} = F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{i\omega x} dx. \quad (2.1.35)$$

Los operadores I^α y D^α definidos en (2.1.34) para $\Re(\alpha) > 0$ son llamados integración y diferenciación fraccionarias de Riesz, respectivamente. La integración fraccionarias de Riesz I^α se realiza en la forma de potencial de Riesz definido como una convolución de Fourier de la forma

$$(I^\alpha f)(x) = \int_{\mathbb{R}^n} k_\alpha(x-t) f(t) dt \quad (\Re(\alpha) < 0), \quad (2.1.36)$$

donde $k_\alpha(x)$ es una función, llamada kernel de Riez y está dada por

$$k_\alpha(x) := \frac{1}{\gamma_n(\alpha)} \begin{cases} |x|^{\alpha-n}, & \alpha - n \neq 0, 2, 4, \dots, \\ |x|^{\alpha-n} \ln\left(\frac{1}{|x|}\right), & \alpha - n = 0, 2, 4, \dots, \end{cases} \quad (2.1.37)$$

y la constante $\gamma_n(\alpha)$ es de la forma

$$\gamma_n(\alpha) := \begin{cases} 2^\alpha \pi^{n/2} \Gamma\left(\frac{\alpha}{2}\right) / \Gamma\left(\frac{n-\alpha}{2}\right), & \alpha - n \neq 0, 2, 4, \dots, \\ (-1)^{(n-\alpha)/2} 2^{\alpha-1} \pi^{n/2} \Gamma\left(1 + \frac{\alpha-n}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\alpha}{2}\right), & \alpha - n = 0, 2, 4, \dots. \end{cases} \quad (2.1.38)$$

2.1.1.5. Operador de Hausdorff

En décadas recientes, la derivada fraccionarias ha sido ampliamente usada en el análisis y modelado de la difusión anómala. Como formalismo de modelado alternativo, Chen introduce el concepto de la derivada de Hausdorff de una función $g(t)$ con respecto a una medida fractal t^α [22]

$$\frac{\partial g(t)}{\partial t^\alpha} = \lim_{t' \rightarrow t} \frac{g(t) - g(t')}{t^\alpha - t'^\alpha}. \quad (2.1.39)$$

Chen hace uso de esta derivada para obtener una ecuación lineal del transporte de difusión anómala subyacente al proceso de difusión anómala.

La derivada de Hausdorff (2.1.39) difiere de la derivada fraccionarias estándar en que no involucra la convolución integral y es de naturaleza local. Además, el símbolo de la derivada de

Hausdorff difiere del de la derivada fraccionarias estándar en que el índice α aparece solo una vez.

Los conceptos físicos elementales como la velocidad en un espacio-tiempo fractal (x^β, t^α) puede ser redefinida como

$$\hat{v} = \frac{d\hat{x}}{d\hat{t}} = \frac{dx^\beta}{dt^\alpha}, \quad \hat{t}, \hat{x} \forall S^{\alpha, \beta}, \quad (2.1.40)$$

donde $S^{\alpha, \beta}$ representa el tejido espacio-temporal con índices de escala α y β . La definición tradicional de velocidad no tiene sentido en el espacio-tiempo fractal no diferenciable. Feynman [5] observó que las trayectorias de las partículas en mecánica cuántica son a menudo continuas pero no diferenciables caracterizadas por dimensiones fractales del espacio tiempo.

Como las derivadas fraccionarias, la derivada de Hausdorff existe bajo un espacio-tiempo métrico fractal. Por ejemplo, $\hat{v} = dt^{1/2}/dt^{1/3}|_{t=0}$ existe, mientras que $\hat{v} = dt^{1/2}/dt|_{t=0}$ no existe.

2.1.2. Características de los operadores fraccionarios

El cálculo fraccionario es una herramienta que se ha empleado recientemente para modelar sistemas biológicos complejos con comportamiento no lineal y memoria a largo plazo.

El núcleo de la interpretación más útil del cálculo fraccionario es el concepto de memoria. En general, cuando la salida de un sistema en cada momento t depende solo de la entrada en el momento t , se dice que tales sistemas son sistemas sin memoria. Por otro lado, cuando el sistema tiene que recordar los valores anteriores de la entrada para determinar el valor actual de la salida, dichos sistemas se denominan sistemas con memoria [23].

Suponiendo que $Y(t)$ es una cantidad cuyo valor en términos de $f(t)$ puede obtenerse de la siguiente manera:

$$Y(t) = \int_0^t \frac{(t - \tau)^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)} f(\tau) d\tau, \quad (2.1.41)$$

es decir, la salida $Y(t)$ se puede ver como una suma ponderada que almacena la entrada anterior de la función $f(t)$. Según la definición anterior, dicho sistema es un sistema con memoria y en tales sistemas, la memoria decae a una velocidad $w(t) = t^{\alpha-1}/\Gamma(\alpha)$.

Aplicando la derivada de Caputo de orden α a ambos lados de la ecuación (2.1.41) conduce a

$${}_0^C D_t^\alpha Y(t) = f(t). \quad (2.1.42)$$

Como resultado, la ecuación diferencial que rige la memoria del sistema $Y(t)$ es descrita por una derivada fraccionaria. Por lo tanto, la derivada fraccionaria es un buen candidato para explicar el sistema con memoria. Desde el punto de vista físico, la memoria y su definición en un sistema dependerá de una comprensión profunda del fenómeno.

No hay reglas y métodos para seleccionar el tipo de operador fraccionario en un modelado. Aquella definición cuyo resultado sea más consistente con los datos experimentales podría ser la adecuada [23].

2.2. Geometría fractal

La geometría Euclidiana no es capaz de describir muchas de las formas presentes en la naturaleza al ser estas irregulares y/o fragmentadas. El desafío por estudiar estas formas llevó a Mandelbrot a concebir y desarrollar una nueva geometría de la naturaleza que permitiera describirlas identificando una serie de formas a las que llamó *fractales*.

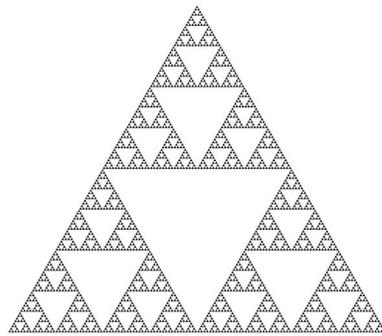
2.2.1. Fractales

Mandelbrot acuñó el término *fractal* a partir del adjetivo latino *fractus*. El verbo correspondiente, *frangere*, significa “romper en pedazos”; además de fragmentado, *fractus* también significa “irregular” [6].

Cuando se trabaja en el espacio Euclídeo R^E , tanto la dimensión topológica D_T , como la dimensión de Hausdorff-Besicovitch D toman valores comprendidos entre 0 y E . Mientras D_T es siempre entero, D no necesariamente lo es.

Algunos fractales pueden tener valores de D enteros (menores que E pero estrictamente mayores que D_T). Ejemplo de ello es el movimiento Browniano, donde $D_T = 1$ y $D = 2$. Así entonces, a D se le conoce como *dimensión fractal*. Así como las diferencias en la dimensión topológica reflejan diferencias en la forma topológica, las diferencias en la dimensión fractal reflejan diferencias de forma fractal [6].

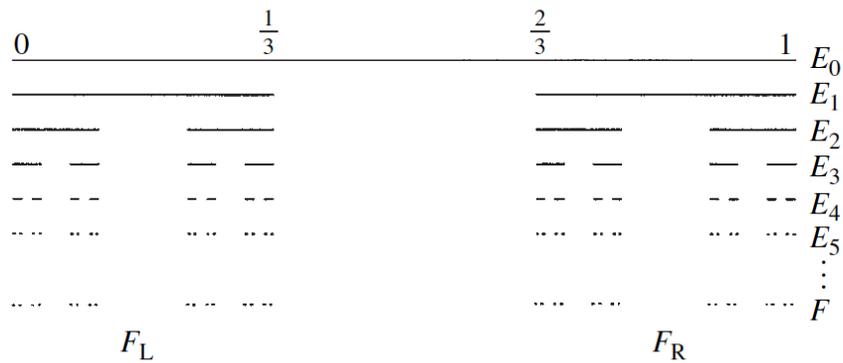
La siguiente figura muestra ejemplos clásicos de conjuntos fractales.



(a) *Triángulo de Sierpinski*



(b) *Helecho*



(c) *Conjunto de Cantor*

Figura 2.1: *Conjuntos fractales*

Así, cuando se hace referencia al conjunto F como un fractal, se le atribuyen las siguientes características (Figura 2.2) [6, 24]:

- F es demasiado irregular para ser descrito en términos de la geometría tradicional (Euclidiana).
- F es a menudo auto-similar, es decir, está formado por copias más pequeñas de la misma figura (hay fractales con auto-similitud aproximada o estadística).
- La dimensión de Hausdorff-Besicovitch (dimensión fractal) D de F es estrictamente mayor que su dimensión topológica D_T .
- F se define mediante un simple algoritmo recursivo.

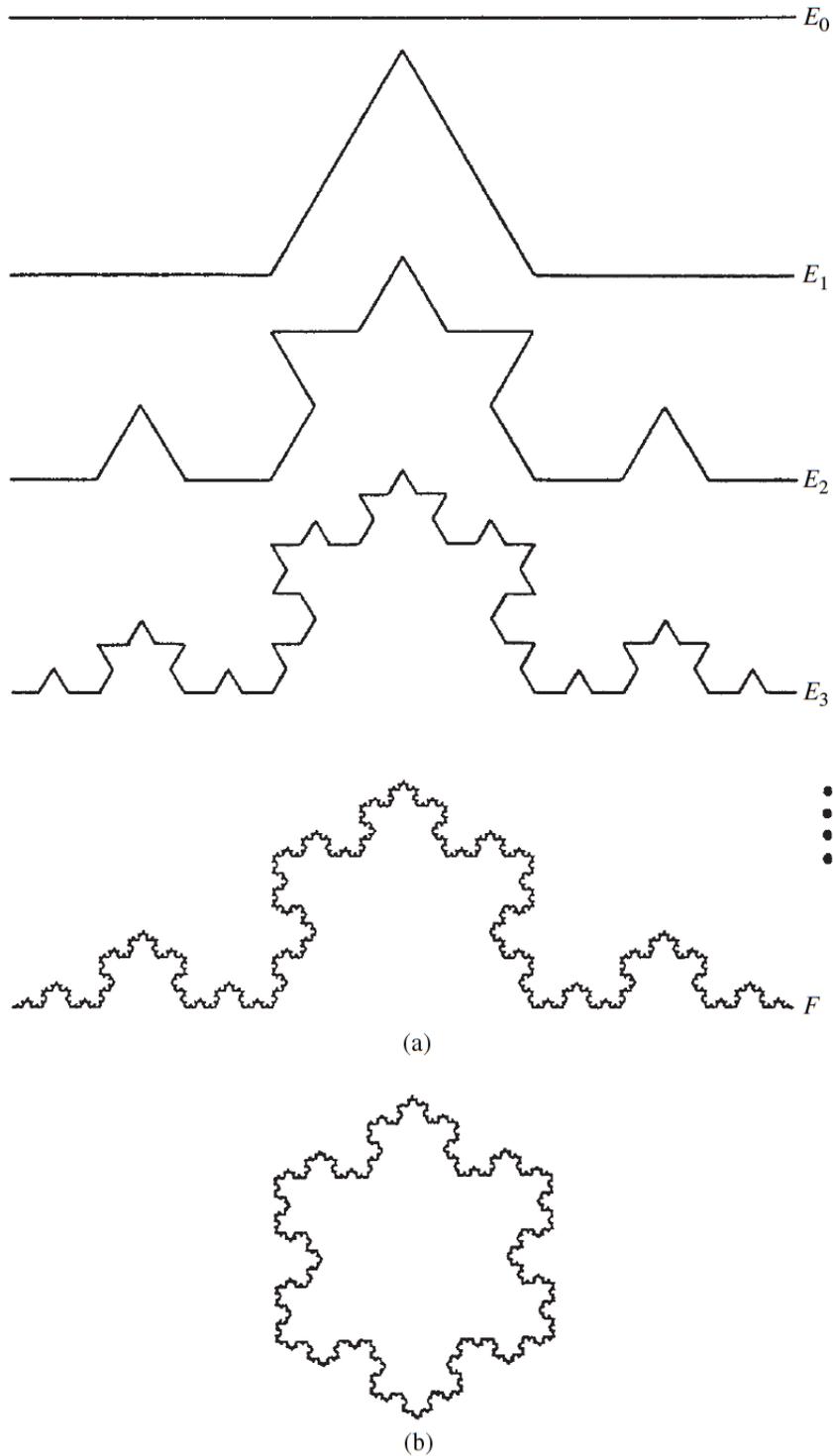


Figura 2.2: Curva de Koch donde $D = 1,262$. (a) Construcción de la curva de Koch F . En cada iteración, el tercio de en medio de cada intervalo se reemplaza con otros dos lados de un triángulo equilátero. (b) Copo de nieve obtenido a partir de curvas de Koch.

Los fractales naturales son figuras naturales que pueden ser representadas por un conjunto fractal (por ejemplo, el movimiento Browniano es un fractal natural representado por curvas Brownianas, las cuales son conjuntos fractales). Este tipo de fractales muestran auto-similaridad estadística y esta auto-similaridad se extiende solo a un rango de escalas.

2.2.2. Medidas fraccionarias

En el estudio las matemáticas de los fractales se encontrará con medidas de una u otra forma. Una medida es una forma de atribuir un “tamaño” numérico a los conjuntos, de modo que si un conjunto se descompone en un número finito o contable de piezas de manera razonable, entonces el tamaño del conjunto es la suma de los tamaños de las piezas [24].

A μ se le conoce como una medida sobre \mathbb{R}^n si μ asigna un número no negativo, posiblemente ∞ , a cada subconjunto de \mathbb{R}^n tal que [21, 24]

(a) $\mu(\emptyset) = 0$;

(b) $\mu(A) \leq \mu(B)$ si $A \subset B$;

(c) si A_1, A_2, \dots , es una secuencia contable (o finita) de conjuntos, entonces

$$\mu \left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i \right) \leq \sum_{i=1}^{\infty} \mu(A_i),$$

cuya igualdad es

$$\mu \left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i \right) = \sum_{i=1}^{\infty} \mu(A_i)$$

si los A_i son conjuntos de Borel² disjuntos.

Llamando $\mu(A)$ a la medida del conjunto A y pensando en $\mu(A)$ como el tamaño de A medido de alguna manera. La condición (a) nos dice que el conjunto vacío tiene una medida cero, la condición (b), que cuanto mayor sea el conjunto, mayor es la medida y la condición (c), que si un conjunto es una unión de un número contable de piezas (que pueden superponerse), entonces la suma de las medidas de las piezas es menor o igual a la medida del conjunto. Si un conjunto

²Un conjunto de Borel es cualquier conjunto obtenido mediante uniones e intersecciones numerables de conjuntos cerrados o abiertos en la topología considerada.

se descompone en un número contable de conjuntos de Borel disjuntos, entonces la medida total de las piezas es igual a la medida del conjunto [24].

La medida de Lebesgue³ sobre \mathbb{R}^n es una extensión a una gran clase de conjuntos de volumen n -dimensional. Considerando el paralelepípedo generalizado

$$A = \{(x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n : a_i \leq x_i \leq b_i\}.$$

El hipervolumen del paralelepípedo se define mediante

$$V_n(A) = (b_1 - a_1)(b_2 - a_2) \cdots (b_n - a_n).$$

Así, la medida de Lebesgue n -dimensional se define como

$$\mu_L(A, n) = \inf \left\{ \sum_{i=1}^{\infty} V_n(A_i) : A \subset \bigcup_{i=1}^{\infty} A_i \right\} \quad (2.2.1)$$

donde el ínfimo se toma sobre todas las cubiertas de A por conjuntos contables de paralelepípedos [21, 24].

2.2.2.1. Medida de Hausdorff

El estudio más profundo de las propiedades geométricas de los conjuntos a menudo requieren un análisis que va más allá de lo que puede expresarse en términos de la medida de Lebesgue. Existen grandes conjuntos de medida cero, la medida de Hausdorff permite diferenciar entre conjuntos de medida cero. La medida de Hausdorff puede ser considerada como una generalización de las medidas de Lebesgue [21].

Sea A un subconjunto del espacio Euclídeo n -dimensional \mathbb{R}^n , el diámetro de $A_i \subset A$ se define como

$$\text{diám}(A_i) = \sup \{d(x, y) : x, y \in A_i\}.$$

Para la métrica

$$d(x, y) = |x - y| = \left(\sum_{i=1}^n |x_i - y_i|^2 \right)^{1/2},$$

el diámetro es

$$\text{diám}(A_i) = \sup \{|x - y| : x, y \in A_i\}.$$

³La medida de Lebesgue es la forma estándar de asignar una longitud, área o volumen a los subconjuntos de un espacio euclídeo [25].

Considerando que A es un subconjunto de \mathbb{R}^n y teniendo en cuenta que una cubierta⁴ δ de un conjunto A es una colección contable (o finita) de conjuntos $\{A_i\}$ de diámetro a lo más δ que cubren A , es decir,

$$A \subset \bigcup_{i=1}^{\infty} A_i, \quad \text{diám}(A_i) \leq \delta, \quad \forall i.$$

Para un número $D > 0$ y cada $\delta > 0$, se define [21, 24]

$$\mathcal{H}_\delta^D(A) = \inf \left\{ \sum_{i=1}^{\infty} [\text{diám}(A_i)]^D : A \subset \bigcup_{i=1}^{\infty} A_i, \quad \text{diám}(A_i) \leq \delta \right\}. \quad (2.2.2)$$

Se observan todas las cubiertas de A , los conjuntos de diámetro como máximo δ , y se busca minimizar la suma de las potencias D -ésimas de los diámetros. A medida que δ disminuye, las cubiertas se vuelven mas finas, ciñéndose mejor al conjunto. Por lo tanto, el ínfimo $\mathcal{H}_\delta^D(A)$ disminuye, o al menos no aumenta, a medida que $\delta \rightarrow 0$ y se aproxima a un límite. Así

$$\mathcal{H}^D(A) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \mathcal{H}_\delta^D(A). \quad (2.2.3)$$

El límite existe para algún subconjunto A de \mathbb{R}^n , aunque el valor límite puede ser (y usualmente es) 0 o ∞ . Al valor $\mathcal{H}^D(A)$ se le conoce como *medida de Hausdorff D -dimensional de A* [24].

Si A es un subconjunto Borel de \mathbb{R}^n , entonces

$$\mathcal{H}^D(A) = \omega^{-1}(n) \mu_L(A, n),$$

donde $\omega(n)$ es una constante que depende solamente de la dimensión n , de la forma

$$\omega(n) = \frac{\pi^{n/2}}{2^n \Gamma(n/2 + 1)}.$$

La constante $\omega(n)$ es el volumen de la bola n -dimensional de diámetro 1.

Se define una medida $\mu_H(A, D)$ tal que esta medida n -dimensional de los subconjuntos de Borel A de \mathbb{R}^n es igual a la medida de Lebesgue n -dimensional

$$\mu_H(A, n) = \mu_L(A, n).$$

Se consideran cubiertas de A a familias contables de conjuntos arbitrarios con diámetro de al menos δ y se toma el ínfimo de la suma de $\omega(D)[\text{diám}(A_i)]^D$ para $D > 0$ y $\delta > 0$. Así

$$\mu_H^{(\delta)}(A, D) = \inf \left\{ \sum_{i=1}^{\infty} \omega(D) [\text{diám}(A_i)]^D : A \subset \bigcup_{i=1}^{\infty} A_i, \quad \text{diám}(A_i) \leq \delta \right\},$$

⁴Una colección de subconjuntos A de un espacio X es un recubrimiento, cubrimiento o cubierta de X , si y solo si: la unión de los elementos de la colección A contiene a X [26].

donde

$$\omega(D) = \frac{\pi^{D/2}}{2^n \Gamma(D/2 + 1)}. \quad (2.2.4)$$

Para un subconjunto A de \mathbb{R}^n , existe el límite

$$\mu_H(A, D) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \mu_H^{(\delta)}(A, D),$$

así,

$$\mu_H(A, D) = \omega(D) \mathcal{H}^D(A).$$

2.2.2.2. Dimensión de Hausdorff

De la variedad de dimensiones fractales, la dimensión de Hausdorff es la más antigua y probablemente la más importante. Posee la ventaja de estar definida para cualquier conjunto y se basa en las medidas con las que es matemáticamente conveniente trabajar. Una desventaja es que a menudo es difícil de calcular o estimar mediante métodos computacionales. Sin embargo, para una comprensión adecuada de las matemáticas de los fractales, la familiaridad con la medida y dimensión de Hausdorff es esencial [24].

Para un conjunto de Borel A de \mathbb{R}^n , existe un único D tal que

$$\mathcal{H}^D(A) = \infty$$

para $D' < D$, y

$$\mathcal{H}^D(A) = 0$$

para $D' > D$. Existe entonces un valor crítico de D para el cual el valor de $\mathcal{H}^D(A)$ salta de ∞ a 0. La gráfica de $\mathcal{H}^D(A)$ contra D (Figura 2.3) muestra que hay un valor crítico de D en el cual $\mathcal{H}^D(A)$ “salta” de ∞ a 0. Este valor crítico se llama *dimensión de Hausdorff* (o *dimensión de Hausdorff-Besicovitch*) de A , se escribe $\dim_H A$ y está definido para algún conjunto $A \in \mathbb{R}^n$ [24].

Formalmente, la *dimensión de Hausdorff* $\dim_H(A)$ de un conjunto de Borel A de \mathbb{R}^n se define por

$$\begin{aligned} H(A) &= \inf\{D \geq 0 : \mathcal{H}^D(A) = 0\} \\ &= \sup\{D : \mathcal{H}^D(A) = \infty\}, \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

así

$$\mathcal{H}^D(A) = \begin{cases} \infty & 0 \leq D < \dim_H(A) \\ 0 & D > \dim_H(A). \end{cases} \quad (2.2.6)$$

A $D = \dim_H(A)$ también se le conoce como dimensión fractal.

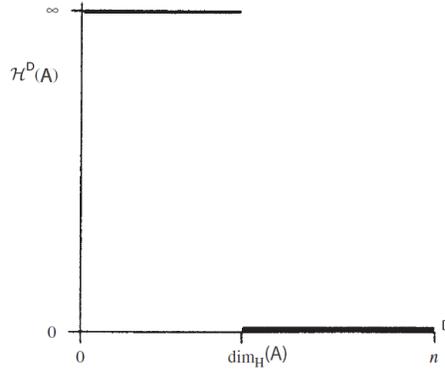


Figura 2.3: Gráfica de $\mathcal{H}^D(A)$ contra D para un conjunto A . La dimensión de Hausdorff es el valor de D al cual ocurre el salto de ∞ a 0 .

2.2.2.3. Dimensión de conteo de cajas

Existen otras clases de cubiertas que definen medidas que conducen a la dimensión de Hausdorff. Se pueden usar cubiertas de bolas esféricas B_i . Usando

$$\mathcal{B}_\delta^D(A) = \inf \left\{ \sum_{i=1}^{\infty} [\text{diám}(B_i)]^D : A \subset \bigcup_{i=1}^{\infty} B_i, \text{diám}(A_i) \leq \delta \right\}, \quad (2.2.7)$$

donde $\{B_i\}$ es una cubierta δ de A , se obtiene

$$\mathcal{B}^D(A) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \mathcal{B}_\delta^D(A).$$

Se define una dimensión al cual la medida \mathcal{B}_δ^D haga el salto de infinito a cero. Dado que cualquier cubierta δ de A por bolas es una cubierta permisible en la definición (2.2.2),

$$\mathcal{B}_\delta^D \leq \mathcal{H}_\delta^D.$$

Si $\{A_i\}$ es una cubierta δ de A , entonces $\{B_i\}$ es una cubierta 2δ de A por bolas B_i tal que cada B_i es una bola de radio $[\text{diám}(A_i)] \leq \delta$ que contiene a A_i . Así,

$$\sum_i [\text{diám}(B_i)]^D \leq \sum_i [2 \text{diám}(A_i)]^D = 2^D \sum_i [\text{diám}(A_i)]^D.$$

Tomando el ínfimo, se obtiene

$$\mathcal{B}_{2\delta}^D(A) \leq 2^D \mathcal{H}_\delta^D(A).$$

Tomando el límite $\delta \rightarrow 0$, se obtiene

$$\mathcal{H}^D(A) \leq \mathcal{B}^D(A) \leq 2^D \mathcal{H}(A).$$

Así, los valores de D al cual las medidas \mathcal{H}^D y \mathcal{B}^D realizan el salto de infinito a cero son los mismos.

Sea A un subconjunto no vacío y acotado de \mathbb{R}^n y sea $N_\delta(A)$ el número más pequeño de conjuntos de diámetro a lo más δ , que recubren A , la dimensión por conteo de cajas de A se define como [21, 24]

$$\dim_B(A) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\ln N_\delta(A)}{\ln(1/\delta)}, \quad (2.2.8)$$

así, de esta última definición se tiene que

$$N_\delta(A) \delta^D = cte,$$

para pequeñas δ , donde $D = \dim_B(A)$.

2.2.3. Relación con el cálculo fraccionario

Se puede formular el análisis sobre fractales como una generalización del cálculo sobre variedades suaves al cálculo sobre fractales. Usualmente el punto de partida para la teoría del análisis sobre fractales es un laplaciano sobre fractales, que resulta no ser un operador diferencial en el sentido habitual, pero tiene muchas de las propiedades deseadas [27, 28].

También se trabaja con la integración sobre fractales [29, 30]. El análisis en fractales y el dominio fractal de integración puede ser usado para describir fenómenos dinámicos, los cuales ocurren en objetos modelados por fractales [21].

Sea A un subconjunto no vacío del espacio Euclidiano n -dimensional \mathbb{R}^n , y sea $\{A_i\}$ una familia de subconjuntos contables de diámetro de a lo más δ que cubre A , i.e.,

$$A \subset \bigcup_{i=1}^{\infty} A_i, \quad \text{diám}(A_i) \leq \delta \quad \forall i.$$

El punto de partida es la noción de una función característica de subconjuntos A_i , la cual está definida por

$$\chi_{A_i}(x) = \begin{cases} 1, & x \in A_i, \\ 0, & x \notin A_i. \end{cases} \quad (2.2.9)$$

Una función $f(x)$, definida sobre un conjunto A , se denomina función simple si existe un número finito de conjuntos disjuntos $\{A_k\}$ tal que

$$f(x) = \begin{cases} f_k, & x \in A_k, \\ 0, & x \notin \bigcup_{k=1}^{\infty} A_k. \end{cases} \quad (2.2.10)$$

La función simple $f(x)$ sobre A puede ser representada por

$$f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} f_i \chi_{A_i}(x), \quad (2.2.11)$$

donde las $f_i \in \mathbb{R}$ son constantes.

Una función simple $f = f(x)$ sobre un conjunto A es integrable si $\mathcal{H}^D(A_i) < \infty$ para cada i para el cual $f_i \neq 0$.

La integral de Lebesgue-Stieltjes sobre funciones continuas (2.2.11) puede ser definida [29] por

$$\int_A f(x) d\mu_H(x) = \sum_{i=1}^{\infty} f_i \mu_H(A_i, D). \quad (2.2.12)$$

Por lo tanto,

$$\int_A f(x) d\mu_H(x) = \omega(D) \lim_{\text{diám}(A_i) \rightarrow 0} \sum_{A_i} f(x_i) [\text{diám}(A_i)]^D. \quad (2.2.13)$$

Es posible dividir el subconjunto $A \subset \mathbb{R}^n$ en una colección de cubos δ en \mathbb{R}^n de la forma

$$A_{i_1, \dots, i_n} = \{(x_1, \dots, x_n) \in A : i_k \delta \leq x_k \leq (i_k + 1)\delta, \quad i_k \in \mathbb{N}\}.$$

Entonces

$$d\mu_B(x) = \lim_{\text{diám}(A_{i_1, \dots, i_n}) \rightarrow 0} \omega(D) [\text{diám}(A_i)]^D. \quad (2.2.14)$$

El conjunto A también puede ser parametrizado por coordenadas polares con $r = d(x, 0) = |x|$ y ángulo Ω . Usando esta parametrización, puede considerarse una cubierta esféricamente

simétrica $A_{r,\Omega}$ alrededor de un centro en el origen. En el límite, la función $\omega(D)$ [diám $(A_{r,\Omega})$]^D da

$$d\mu_B(r, \Omega) = \lim_{\text{diam}(A_{r,\Omega}) \rightarrow 0} \omega(D) [\text{diám}(A_{r,\Omega})]^D = d\Omega^{D-1} r^{D-1} dr. \quad (2.2.15)$$

Esta restricción de cubierta esféricamente simétrica puede no proporcionar el valor correcto de la medida de Hausdorff y dimensión de Hausdorff. El ínfimo en la ecuación para la medida de Hausdorff debe ser tomado sobre todas las posibles cubiertas. Usando una cubierta ϵ esféricamente simétrica de A , se obtiene una medida $d\mu_B(r, \Omega)$ y una dimensión $\dim_B(A) \geq \dim_H(A)$ [21].

Considerando que $f(x)$ es simétrico con respecto a algún centro $x_0 \in A$, i.e., $f(x) = cte$ para todo x tal que $d(x, x_0) = |x - x_0| = r$ para valores arbitrarios de r . Para desplazar el centro de simetría se puede llevar a cabo la transformación

$$A \rightarrow A' = T_{-x_0}A : x \rightarrow x' = x - x_0. \quad (2.2.16)$$

Dado que A no es un espacio lineal, (2.2.16) no necesita ser un mapa de A sobre sí mismo, y (2.2.16) preserva la medida. Entonces la integral sobre un espacio métrico D-dimensional puede ser representado [29] en la forma

$$\int_A f d\mu_B = \frac{2\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2)} \int_0^\infty f(r) r^{D-1} dr. \quad (2.2.17)$$

Esta integral es conocida en el cálculo fraccionario como integral de Riemann-Liouville del lado derecho [14], y está definida por (2.1.3). Para $x = 0$, la ecuación (2.1.3) da

$$(I_-^D f)(0) = \frac{1}{\Gamma(D)} \int_0^\infty t^{D-1} f(t) dt. \quad (2.2.18)$$

Así entonces, (2.2.17) puede ser representada como

$$\int_A f d\mu_B = \frac{2\pi^{D/2}\Gamma(D)}{\Gamma(D)} (I_-^D f)(0). \quad (2.2.19)$$

Esta ecuación conecta la integral sobre fractales con la integral de orden fraccionaria. Como resultado, la integral fraccionaria puede ser considerada como una integral sobre un fractal hasta un factor numérico $\Gamma(D/2)/[2\pi^{D/2}\Gamma(D)]$. Este resultado permite aplicar las herramientas del cálculo fraccionaria para la distribución fractal de partículas [21].

2.3. Ecuaciones diferenciales fraccionarias

Las ecuaciones diferenciales relacionan funciones, generalmente cantidades físicas, con sus derivadas, las cuales representan sus razones de cambio.

Actualmente se pueden describir y modelar muchos fenómenos físicos con una ecuación diferencial ordinaria. Sin embargo, en muchos casos, el cálculo clásico no puede describir fenómenos más complejos. Es por esta razón que, recientemente se ha analizado el comportamiento de estos sistemas no lineales por medio del cálculo fraccionario [1].

Las derivadas de orden no entero proveen un excelente instrumento para la descripción de memoria y propiedades hereditarias de varios materiales y procesos. Esta es la principal ventaja de las derivadas fraccionarias en comparación con los modelos clásicos de orden entero, en los cuales estos efectos se descuidan. Las ventajas de las derivadas fraccionarias aparecen en el modelado de las propiedades mecánicas y eléctricas de los materiales reales, así como en la descripción de las propiedades reológicas de las rocas, y en muchos otros campos.

Un gran campo que requiere del uso de derivadas de orden no entero es la teoría de los fractales. El desarrollo de esta teoría ha abierto nuevas perspectivas para la teoría de derivadas fraccionarias, especialmente en el modelado de procesos dinámicos en estructuras autosimilares y porosas.

El modelado matemático y la simulación de sistemas y procesos, basados en la descripción de sus propiedades en términos de derivadas fraccionarias, naturalmente conduce a ecuaciones diferenciales de orden fraccionario y a la necesidad de resolverlas [17].

2.3.1. Ecuación parabólica: difusión anómala

La difusión es un fenómeno común en la naturaleza. Es un mecanismo que transporta materia o alguna otra cantidad física de un lugar a otro en un espacio determinado.

El proceso que da origen a la difusión es un proceso estocástico o aleatorio, lo cual se aprecia en el fenómeno denominado movimiento Browniano (Figura 2.4). Este movimiento se observa en las partículas que se hallan en un medio fluido (líquido o gas), como resultado de choques contra las moléculas de dicho fluido [31]. Dicho movimiento consiste en el desplazamiento irregular e impredecible de pequeñas partículas suspendidas en la superficie de un fluido, y fue explicado

en 1905 por Albert Einstein en su artículo “Sobre el movimiento de pequeñas partículas suspendidas en líquidos en reposo exigido por la teoría cinético-molecular del calor”. La misma explicación fue desarrollada independientemente por Smoluchowski, quien fue responsable de gran parte del desarrollo sistemático y de la verificación experimental de la teoría del movimiento Browniano [32].

En su trabajo, Einstein utilizó la hipótesis atómica de la materia y las caminatas aleatorias para encontrar la relación existente entre el movimiento Browniano y la ecuación de difusión. Uno de sus principales resultados, fue que el desplazamiento cuadrado promedio recorrido por una partícula suspendida en la superficie de un fluido, crece de forma lineal con el tiempo, es decir,

$$\langle r^2(t) \rangle \propto t. \quad (2.3.1)$$

Entre los fenómenos naturales cuya dinámica está descrita por los procesos difusivos normales, encontramos la propagación de calor en medios homogéneos, el movimiento de fluidos incompresibles en medios porosos homogéneos, reacciones químicas en solución y el movimiento de impurezas y partículas cargadas en sólidos cristalinos [4].

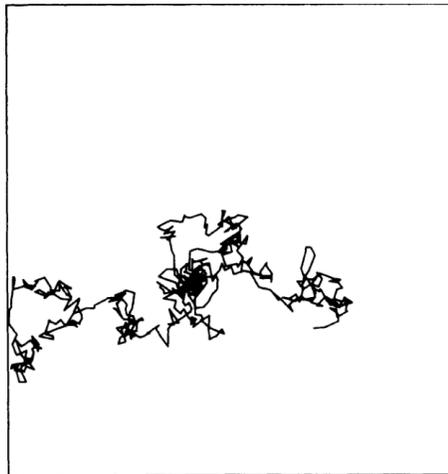


Figura 2.4: *Movimiento de un punto que experimenta movimiento Browniano.*

Sin embargo, desde la segunda mitad del siglo XX se han encontrado muchos sistemas tanto físicos como biológicos, donde el desplazamiento cuadrado promedio recorrido por la sustancia

que se difunde no crece de forma lineal, es decir,

$$\langle r^2(t) \rangle \propto t^\gamma, \quad \gamma \neq 1. \quad (2.3.2)$$

Estos procesos difusivos se dividen en forma natural en dos grandes partes: *superdifusión* para $\gamma > 1$ y *subdifusión* para $\gamma < 1$, ambos son casos particulares de lo que la comunidad científica nombró *difusión anómala*.

2.3.1.1. Procesos subdifusivos

La dinámica subdifusiva se caracteriza por el fuerte efecto de memoria en el nivel de la función de distribución de probabilidad (PDF por sus siglas en inglés) $P(x, t)$, es decir, a diferencia de un proceso de Markov, el estado actual del sistema depende de los estados anteriores. Una caminata aleatoria estándar tiene incrementos espaciales y temporales constantes, Δx y Δt . Este proceso dará lugar al proceso de difusión estándar en el límite a largo plazo, es decir, después de un número suficiente de pasos, y la variable aleatoria asociada $x(t) = N^{-1/2} \sum x_i$, donde x_i es la posición después del i -ésimo paso, será distribuido por una Gaussiana debido al teorema de límite central. Las caminatas aleatorias de tiempo continuo (CTRW por sus siglas en inglés) son una generalización de las caminatas aleatorias estándar, en el que tanto la longitud de salto como el tiempo de espera se distribuyen de acuerdo a dos PDFs, $\lambda(x)$ y $\psi(t)$. Así entonces, una CTRW se basa en un concepto probabilístico. El propagador para este tipo de procesos en ausencia de fuerza externa está dada en términos de la expresión en el espacio Fourier-Laplace [33]

$$P(k, u) = \frac{1 - \psi(u)}{u[1 - \psi(k, u)]}. \quad (2.3.3)$$

La subdifusión es descrita clásicamente en términos de una CTRW con una PDF de tiempo de espera de cola larga de la forma asintótica

$$\psi(t) \sim \frac{\tau^\alpha}{t^{1+\alpha}}, \quad 0 < \alpha < 1, \quad (2.3.4)$$

para $t \gg \tau$.

Para el caso libre de fuerzas, con el comportamiento asintótico

$$\psi(u) \equiv \mathcal{L}\{\psi(t); u\} = \int_0^\infty \psi(t)e^{-ut} dt \sim 1 - (u\tau)^\alpha \quad (2.3.5)$$

de la transformada de Laplace $\mathcal{L}\{\psi(t); u\}$ de $\psi(t)$ y la expansión análoga de una PDF típica de salto de corto alcance, $\lambda(k) \sim 1 - \sigma k^2$ ($k \rightarrow 0$) para la transformada de Fourier de $\lambda(x)$, se obtiene

$$P(k, u) \simeq \frac{1/u}{1 + u^{-\alpha} K_\alpha k^2}, \quad (2.3.6)$$

donde $K_\alpha \equiv \sigma/\tau^\alpha$ es la constante de difusión anómala.

Así, de la ecuación (2.3.6) se obtiene la ecuación de difusión fraccionaria

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = {}_0D_t^{1-\alpha} K_\alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t), \quad (2.3.7)$$

donde ${}_0D_t^{1-\alpha} \equiv \frac{\partial}{\partial t} {}_0D_t^{-\alpha}$ es el operador diferencial fraccionario de Riemann-Liouville.

2.3.1.2. Procesos superdifusivos

El movimiento Browniano puede generalizarse a vuelos de Lévy. Los vuelos de Lévy son procesos de Markov con amplias distribuciones de longitud de salto con el comportamiento asintótico de la ley de potencia inversa

$$\lambda(x) \sim \frac{\sigma^\mu}{|x|^{1+\mu}}, \quad (2.3.8)$$

tal que su varianza diverja, $\bar{x}^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda(x) x^2 dx = \infty$. Esta forma libre de escala da lugar a las trayectorias características de los vuelos de Lévy como se muestra en la figura (2.5): en contraste con la naturaleza de “relleno de área” de una caminata aleatoria regular (Gaussiana), un vuelo de Lévy tiene una dimensión fractal con exponente μ , y consiste en una agrupación auto-similar de estancias locales, interrumpida por saltos largos, en cuyo final comienza un nuevo grupo, y así sucesivamente [33]. Esto sucede en todas las escalas de longitud, es decir, el acercamiento a un grupo a su vez revela grupos interrumpidos por largas estancias. Por lo tanto, los vuelos de Lévy combinan íntimamente las propiedades de salto local derivadas de la parte central de la distribución de longitud de salto alrededor de la longitud de salto cero con saltos de gran distancia fuertemente no locales, es decir, crea correlaciones espaciales que decaen lentamente, característica de procesos no Gaussianos con varianza divergente. Las trayectorias Gaussianas también son autosimilares, pero su varianza finita prohíbe la existencia de saltos largos que separen los grupos locales.

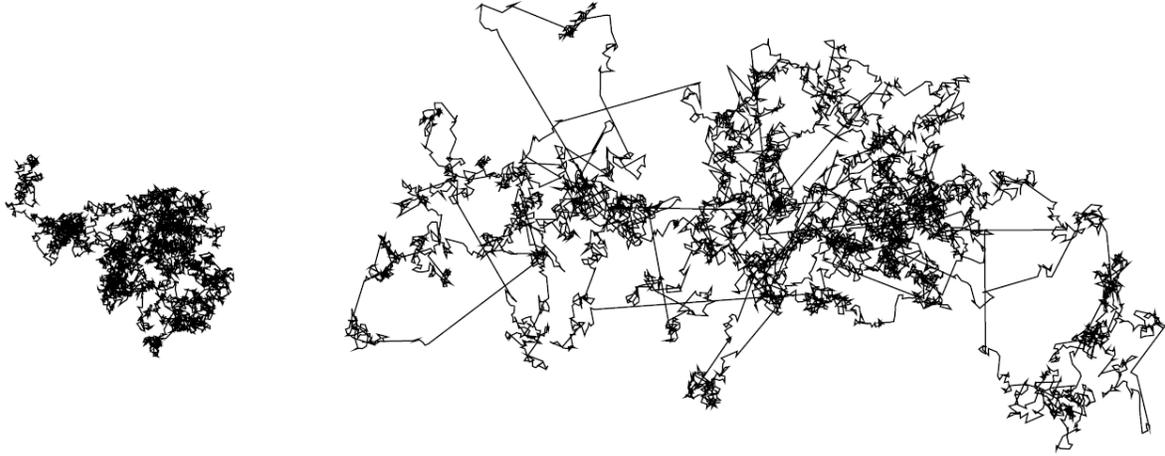


Figura 2.5: Trayectorias de vuelos de Lévy (derecha) de índice $\mu = 1,5$ y caminata aleatoria (izquierda) con el mismo número de pasos (7000).

En ausencia de fuerza, se describen los vuelos de Lévy con una PDF con tiempo de espera muy marcado $\psi(t)$ ($\alpha = 1$) con un tiempo de espera característico τ y $\psi(u) \sim 1 - u\tau$. La transformada de Fourier $\lambda(k) = \exp(-\sigma^\mu |k|^\mu) \sim 1 - \sigma^\mu |k|^\mu$ de una PDF de Lévy de longitud de salto estable $\lambda(x)$ con forma asintótica (2.3.8) por medio de la ecuación (2.3.3) produce una ecuación dinámica en el espacio de Fourier-Laplace, en la que aparece la expresión $|k|^\mu P(k, u)$ en lugar del término estándar $k^2 P(k, u)$ de la difusión Gaussiana.

Definiéndose la derivada fraccionaria en el espacio a través de $\mathcal{F} \left\{ \frac{d^\mu g(x)}{d|x|^\mu} \right\} \equiv -|k|^\mu g(k)$ para $1 < \mu < 2$, se obtiene la ecuación de difusión fraccionaria de Lévy

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = K^\mu \frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu} P(x, t), \quad (2.3.9)$$

siendo $K^\mu \equiv \sigma^\mu / \tau$ la constante de difusión generalizada con dimensión $\text{cm}^\mu \text{s}^{-1}$ [33].

Así, los vuelos de Lévy corresponden a la ecuación de difusión fraccionaria espacial (2.3.9).

2.3.2. Método de transformadas

Hay muchas clases de problemas que son difíciles de solucionar en sus representaciones originales. Una transformada integral “mapea” una ecuación de su dominio original a otro dominio adecuado. La manipulación y la solución de la ecuación en el dominio objetivo son mucho

más fáciles que la manipulación y la solución en el dominio original. La solución luego es remapeada al dominio original con la transformada inversa.

Las soluciones exactas (de forma cerrada) de ecuaciones integrales juegan un papel importante en la comprensión adecuada de las características cualitativas de muchos fenómenos y procesos en diversas áreas de las ciencias naturales.

Las bases de cada función tienen que ser ortogonales. Una transformada integral solamente cambia la representación de una función de una base ortogonal a otra. Cada punto en la representación de la función transformada en el dominio objetivo corresponde a la contribución de una función de base ortogonal dada a la expansión. El proceso de expandir una función de su representación “estándar” a una suma de funciones base ortonormales, adecuadamente escaladas, es llamado factorización espectral. Como las transformadas integrales están basadas en el concepto de la factorización espectral sobre bases ortonormales, hacen que funciones arbitrariamente complicadas puedan ser representadas como las sumas de funciones mucho más simples. Las transformadas integrales se utilizan en la solución de varias ecuaciones diferenciales e integrales [34].

Es conocido que las transformaciones integrales clásicas tienen la forma

$$(K\phi)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} k(x, \xi)\phi(\xi)d\xi = g(x), \quad (2.3.10)$$

donde $k(x, \xi)$ es alguna función dada (kernel de la transformada), $\phi(\xi)$ es la función original dada en un cierto espacio, y $g(x)$ es la transformada de la función $\phi(\xi)$. Entre las transformadas integrales más importantes están la transformada de Fourier, la transformada de Mellin y la transformada de Laplace. Las transformadas integrales están conectadas entre sí por cambios de variables y funciones, y tienen amplias aplicaciones [14].

2.3.2.1. Transformada de Fourier

La transformada de Fourier de una función $\varphi(x)$ de una variable real $-\infty < x < \infty$, se define como

$$(\mathcal{F}\varphi)(x) = \mathcal{F}\{\varphi(x); x\} = \hat{\varphi}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixt}\varphi(t)dt, \quad (2.3.11)$$

en ocasiones es útil escribirlo en la forma

$$(\mathcal{F}\varphi)(x) = \frac{d}{dx} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ixt} - 1}{it} \varphi(t) dt. \quad (2.3.12)$$

La transformada inversa de Fourier está dada por la fórmula

$$(\mathcal{F}^{-1}g)(t) = \hat{g}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixt} g(t) dt, \quad (2.3.13)$$

que tiene leves diferencias respecto a (2.3.11). Las integrales (2.3.11) y (2.3.13) convergen absolutamente para funciones $\varphi, g \in L_1(\mathbb{R}^1)$ y en la norma del espacio $L_2(\mathbb{R}^1)$ para $\varphi, g \in L_2(\mathbb{R}^1)$. La transformada de Fourier de la función $\varphi(x) \in L_1(\mathbb{R}^1)$ es una función continua acotada que tiende a cero cuando $|x| \rightarrow \infty$ por el teorema de Riemann-Lebesgue.

La razón de disminución de $(\mathcal{F}\varphi)(x)$ al infinito está relacionada con la suavidad de la función $\varphi(x)$. Esta conexión está dada por las relaciones

$$\mathcal{F}\{D^n \varphi(t); x\} = (-ix)^n (\mathcal{F}\varphi)(x), \quad (2.3.14)$$

$$D^n (\mathcal{F}\varphi)(x) = \mathcal{F}\{(it)^n \varphi(t); x\}, \quad (2.3.15)$$

donde $D^n = \frac{d^n}{dx^n}$, $n = 1, 2, \dots$. Estas ecuaciones son válidas para funciones suficientemente “buenas” en el sentido de la convergencia absoluta [14].

La relación (2.3.14) es ventajosa en la manipulación de las ecuaciones diferenciales parciales.

La aplicación de la transformada de Fourier al operador de convolución

$$h * \varphi = (h * \varphi)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} h(x-t) \varphi(t) dt, \quad (2.3.16)$$

se tiene especialmente en cuenta. Si $h(x), \varphi(x) \in L_1(\mathbb{R}^1)$, entonces $h * \varphi(x) \in L^1(\mathbb{R}^1)$ y el resultado

$$\mathcal{F}\{(h * \varphi)(t); x\} = (\mathcal{F}h)(x) (\mathcal{F}\varphi)(x), \quad (2.3.17)$$

llamado *el teorema de convolución de Fourier* es correcto.

Las transformadas de Fourier aparecen frecuentemente en el estudio de las ondas y la extracción de información derivada de las ondas, particularmente, cuando la información de fase aparece involucrada.

2.3.2.2. Transformada de Mellin

La transformada de Mellin de una función $\varphi(x)$, $x > 0$, se define como sigue

$$\varphi^*(s) = \mathcal{M}\{\varphi(t); s\} = \int_0^{\infty} t^{s-1} \varphi(t) dt, \quad (2.3.18)$$

y su inversa está dada por la fórmula

$$\varphi(x) = \mathcal{M}^{-1}\{\varphi(s); x\} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \varphi^*(s) x^{-s} ds, \quad \gamma = \Re(s). \quad (2.3.19)$$

Estas relaciones se derivan de (2.3.11) y (2.3.13) si se reemplaza $\varphi(t)$ por $\varphi(e^t)$ y ix por s . Reemplazando $h(t)$ y x por $h(e^t)$ y $\ln x$ respectivamente, se obtiene la relación de convolución de Mellin

$$(h \circ \varphi)(x) = \int_0^{\infty} h\left(\frac{x}{t}\right) \varphi(t) \frac{dt}{t}, \quad (2.3.20)$$

de la convolución de Fourier (2.3.16). El teorema de convolución (2.3.17) con respecto a (2.3.20) toma la forma

$$(h \circ \varphi)^*(s) = h^*(s) \varphi^*(s). \quad (2.3.21)$$

Su definición para derivadas está dado como

$$\mathcal{M}\{\varphi^{(n)}(t); s\} = (-1)^n \frac{\Gamma(s)}{\Gamma(s-n)} \mathcal{M}\{\varphi(t); s-n\}, \quad (2.3.22)$$

donde $s \in \mathcal{C}$, $\Re(s-n) > 0$, y puede ser probada integrando por partes y usando la definición (2.3.18).

La transformada de Mellin puede ser considerada como una versión multiplicativa de la transformada bilateral de Laplace y está íntimamente relacionada con la teoría de las series de Dirichlet, y es usada habitualmente en teoría de números y la teoría de series asintóticas [14].

2.3.2.3. Transformada de Laplace

La transformada de Laplace de una función $\varphi(x)$, $0 < x < \infty$, se define⁵ como

$$\mathcal{L}\varphi = (\mathcal{L}\varphi)(p) = \mathcal{L}\{\varphi(t), p\} = \int_0^{\infty} e^{-pt} \varphi(t) dt, \quad (2.3.23)$$

⁵Esto se define ocasionalmente como la transformada de Laplace unilateral; la integral desde $-\infty$ a $+\infty$ se denomina transformada de Laplace bilateral.

y su inversa está dada por la fórmula

$$(\mathcal{L}^{-1}g)(x) = \mathcal{L}^{-1}\{g(p); x\} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{px} g(p) dp, \quad \gamma = \Re(p) > p_0. \quad (2.3.24)$$

Haciendo uso de la transformada de Mellin (2.3.18) se pueden obtener otras formas para la transformada inversa de Laplace [14]

$$(\mathcal{L}^{-1}g)(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \frac{x^{-s}}{\Gamma(1-s)} g^*(1-s) ds, \quad \Re(s) = \gamma < 1. \quad (2.3.25)$$

La integral

$$(h * \varphi) = (h * \varphi)(x) = \int_0^x h(X-t)\varphi(t) dt, \quad (2.3.26)$$

es la relación de convolución para la transformada de Laplace. El teorema de convolución (2.3.17) con respecto a (2.3.26) produce la forma

$$\mathcal{L}(h * \varphi)(p) = (\mathcal{L}h)(p)(\mathcal{L}\varphi)(p). \quad (2.3.27)$$

La transformada de Laplace se puede obtener de la transformada de Fourier (2.3.11) restringiendo funciones con la condición $\varphi(t) = 0$ para $t < 0$, y reemplazando la variable ix por una variable compleja p [14].

Probablemente la principal aplicación de las transformadas de Laplace se tiene en la conversión de las ecuaciones diferenciales en formas más simples que pueden resolverse con mayor facilidad. Para ello, se tiene la siguiente relación

$$(\mathcal{L}\varphi^{(n)})(p) = p^n (\mathcal{L}\varphi)(p) - \sum_{k=0}^{n-1} p^{n-k-1} \varphi^{(k)}(0), \quad (2.3.28)$$

la cual es fácilmente demostrable por integración por partes siempre que exista la integral correspondiente [14].

2.4. Mecánica cuántica

La investigación en física, realizada a finales del siglo XIX y en la primera mitad del siglo XX, reveló una naturaleza excepcionalmente peculiar de las leyes que rigen el comportamiento de las micropartículas: átomos, electrones, etc. Sobre la base de esta investigación, se fundó una

nueva teoría física llamada mecánica cuántica [35].

Mecánica cuántica es la descripción del comportamiento de la materia y la luz en todos los detalles y, en particular, de lo que pasa en una escala atómica [36]. Desde un punto de vista más amplio, la mecánica cuántica debería ser tratada como el fundamento teórico de la teoría moderna de la estructura y propiedades de la materia. En comparación con la física clásica, la mecánica cuántica considera las propiedades de la materia en un nivel más profundo y más fundamental. En los primeros años del desarrollo de la mecánica cuántica, en las primeras campañas de interpretación estadística, los físicos aún no se habían liberado de la concepción del electrón como un punto de masa clásico. Se habló del electrón como una partícula con valores de coordenadas y velocidad definidos pero desconocidos. Las relaciones de Heisenberg se interpretaron como relaciones de inexactitud, pero no como relaciones de incertidumbre de las correspondientes nociones. El cuadrado del módulo de la función de onda se interpretó como una densidad de probabilidad de que una partícula haya dado coordenadas (de modo que las coordenadas siempre se consideraron definidas). Se dio una interpretación similar al cuadrado del módulo de la función de onda en el espacio de momentos.

Ambas probabilidades (en el espacio de coordenadas y el espacio de momentos) se consideran simultáneamente, como si los valores definidos de coordenadas y momentos fueran compatibles. La imposibilidad real, expresada por las relaciones de Heisenberg, de su medición simultánea apareció como una especie de paradoja o capricho de la naturaleza según el cual no se podía saber todo lo existente. Todas estas dificultades se desvanecen si se admite la naturaleza dual onda-partícula del electrón en toda su extensión, si se acepta el verdadero significado de esta dualidad y si se entiende claramente a qué conjunto estadístico se refieren las probabilidades de la mecánica cuántica [37].

Estado

El concepto de estado es uno de los fundamentales e iniciales en la mecánica cuántica. Dirac introduce el concepto de estado como: "...Tomemos cualquier sistema atómico, compuesto de partículas o cuerpos con propiedades especificadas (masa, momento de inercia, etc.) interactuando de acuerdo con las leyes de fuerza especificadas. Habrá varios movimientos posibles de

las partículas o cuerpos consistentes con las leyes de la fuerza. Cada uno de estos movimientos se denomina estado del sistema” [38].

La información sobre el estado de un microsistema se obtiene realizando mediciones, esto es, cuando el sistema interactúa con un instrumento de medición, que es un sistema macroscópico. Por ello, los resultados de las mediciones realizadas en microsistemas se expresan necesariamente en términos desarrollados para caracterizar cuerpos macroscópicos (coordenadas, momento, momento angular, energía, y similares). Estas características se llaman variables dinámicas.

Las propiedades de las micropartículas difieren radicalmente de las de los cuerpos macroscópicos. Por esta razón, las variables dinámicas atribuidas a macrocuerpos no pueden atribuirse a micropartículas. Pero cuando una micropartícula interactúa con un instrumento, se comporta como si se caracterizara por al menos una parte de las variables dinámicas anteriormente mencionadas [39].

La naturaleza peculiar de las propiedades de las micropartículas se muestra en que las mediciones no producen valores definidos para todas las variables, como se puede ver con la relación de incertidumbre de Heisenberg:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.4.1)$$

El principio de incertidumbre muestra hasta qué punto podemos usar los conceptos de la mecánica clásica para micropartículas, particularmente, con qué grado de precisión podemos hablar de las trayectorias de las micropartículas. El movimiento en una trayectoria se caracteriza por valores bien definidos de las coordenadas y la velocidad en cada instante. Reescribiendo la relación (2.4.1) como

$$\Delta x \cdot \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m}, \quad (2.4.2)$$

podemos ver que cuanto mayor es la masa de una partícula, menor es la incertidumbre de sus coordenadas y su velocidad, y en consecuencia, mayor es la precisión con la que podemos aplicar el concepto de una trayectoria a la partícula y mayor es la precisión con la que podemos aplicar los conceptos de la mecánica clásica a su movimiento. Esta declaración es un caso particular de una más general conocida como el principio de correspondencia. De acuerdo con este principio, en el proceso límite $\hbar \rightarrow 0$, las leyes y relaciones de la mecánica cuántica se transforman en las leyes y relaciones de la mecánica clásica. En la práctica, esto significa que cuanto

menor sea el papel de los efectos proporcionales a la constante de Planck \hbar , el comportamiento del sistema está más cerca de ser considerado clásico [39].

El principio de correspondencia permite encontrar análogos cuánticos a las cantidades clásicas. Para caracterizar el estado en el que se encuentra un microsistema considerado, es natural tomar los valores de las variables dinámicas teniendo un valor definido en el estado dado. El conjunto de todas las variables dinámicas que tienen valores definidos en un estado dado se denomina conjunto completo.

Cuando hablamos de variables dinámicas en general (es decir, sin especificar qué variables x , p_x , E , etc.) los designamos por el símbolo Q .

Al conjunto de los valores numéricos que puede tener una variable dinámica determinada se le conoce como su espectro. Si estos valores forman una secuencia continua, se dice que la cantidad dada tiene un espectro continuo de valores. Si estos valores forman una secuencia discreta, la cantidad dada tiene un espectro discreto de valores. En el caso general, el espectro de valores de una variable dinámica puede incluir partes continuas y discretas.

A los diferentes valores de la variable Q se les designa por el símbolo q . Si el valor dado pertenece a un espectro discreto, se escribe como q_n . La ausencia del subíndice indica que el valor dado pertenece a un espectro continuo.

Dado que las leyes del mundo microscópico difieren radicalmente de las observadas para cuerpos macroscópicos, los estados y las variables dinámicas tienen que caracterizarse por una cantidad matemática de naturaleza diferente a la utilizada en la física clásica. Por ello, para cada variable dinámica, hay un operador lineal correspondiente. El estado de un sistema se caracteriza por una determinada función compleja, denominada función de onda o función psi o amplitud de probabilidad. Dirac introdujo un tipo especial de vector para caracterizar un estado, lo llamó un vector estado [39].

Principio de superposición

Un principio fundamental de la mecánica cuántica es el principio de superposición de estados. La esencia de este principio consiste en la siguiente declaración. Suponiendo que el sistema puede estar en el estado ψ_1 en el cual la cantidad Q tiene el valor definido q_1 o en el estado ψ_2

donde la misma cantidad tiene el valor definido q_2 . Por lo tanto, existe el estado $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ (donde c_1 y c_2 son números complejos arbitrarios) en el cual la medición de la cantidad Q produce el resultado q_1 o el resultado q_2 .

Se desprende del principio de superposición que la superposición de los estados ψ_1 y ψ_2 donde Q tiene valores definidos conduce a un nuevo estado ψ en el cual Q es indefinido.

Un resultado similar se obtiene sobre la superposición de más de dos estados. Si existen los estados $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ en los cuales la cantidad Q tiene valores definidos q_1, q_2, \dots, q_n , el estado

$$\psi = \sum_{m=1}^n c_m \psi_m, \quad (2.4.3)$$

(donde c_m son números complejos arbitrarios) también existe, y la medición de la cantidad Q en este estado produce uno de los valores q_1, q_2, \dots, q_n .

El comportamiento de las cantidades ψ_m correspondientes a los estados del sistema descrito en la ecuación (2.4.3) es similar al comportamiento de los vectores. En efecto, multiplicando los vectores $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \dots, \vec{a}_n$ de idéntica naturaleza por números reales c_1, c_2, \dots, c_n y sumándolos, obtenemos un nuevo vector de la misma naturaleza, es decir, $\vec{a} = \sum c_m \vec{a}_m$. Esta analogía es la razón por la cual Dirac trató las cantidades correspondientes a los estados de un sistema como vectores en un espacio especial [39].

Significado físico de la función psi

En la representación de coordenadas, la función psi es una función de las coordenadas de las partículas que forman un sistema y del tiempo. Considerando un sistema que consiste de una sola partícula, tenemos en este caso, $\psi = \psi(x, y, z, t)$. Una interpretación correcta de la función psi fue proporcionada por el físico alemán Max Born en 1926. Postuló que el cuadrado de la magnitud de la función psi, es decir, la cantidad $|\psi|^2 = \psi^* \psi$ (donde ψ^* es el complejo conjugado de ψ) determina la densidad de la probabilidad de encontrar la partícula en varios puntos del espacio. Si multiplicamos $|\psi(x, y, z, t)|^2$ por el elemento de volumen $dV = dx dy dz$ tomado del punto x, y, z obtenemos la probabilidad de que la partícula sea detectada dentro de los límites de dV en la medición realizada en el instante t :

$$dP = |\psi|^2 dV = \psi^* \psi dV. \quad (2.4.4)$$

Similarmente, para un sistema conformado por dos partículas, la cantidad

$$dP = |\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, t)|^2 dV_1 dV_2, \quad (2.4.5)$$

(donde x_1, y_1, z_1 son las coordenadas de la primera partícula, x_2, y_2, z_2 son las coordenadas de la segunda partícula, $dV_1 = dx_1 dy_1 dz_1$ y $dV_2 = dx_2 dy_2 dz_2$) proporciona la probabilidad de que la primera partícula sea detectada dentro de los límites del volumen dV_1 y la segunda partícula dentro de los límites de dV_2 en la medición realizada en el instante t .

Dado que una partícula con autenticidad, es decir, con una probabilidad de la unidad, debe estar en algún lugar, la suma de las probabilidades (2.4.4) sobre todo el espacio debe ser la unidad. Esto nos conduce a la condición de normalización de la función psi [40]:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dV = 1. \quad (2.4.6)$$

2.4.1. Ecuación de Schrödinger

En 1926, el físico austriaco Erwin Schrödinger presentó su famosa ecuación como un desarrollo de las ideas de De Broglie de las propiedades ondulatorias de la materia. Asoció con el movimiento de una micropartícula una función compleja de las coordenadas y del tiempo, la cual llamó función de onda y la designó con la letra griega “psi” (ψ o Ψ), la cual conocemos como función psi [40].

La función psi caracteriza el estado de una micropartícula. La forma de la función es obtenida de la solución de la ecuación de Schrödinger que aparece como:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}, t). \quad (2.4.7)$$

donde m es masa de la partícula, V la energía potencial de la partícula, i la unidad imaginaria y ∇^2 es el operador Laplaciano.

La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo describe un sistema que evoluciona en el tiempo y es de importancia central en la teoría de la mecánica cuántica no relativista.

Su versión independiente del tiempo predice que las funciones de onda pueden tener la forma de ondas estacionarias, denominados estados estacionarios [41]:

$$E\psi(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}). \quad (2.4.8)$$

o

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (2.4.9)$$

donde

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V, \quad (2.4.10)$$

es el operador Hamiltoniano.

La ecuación de Schrödinger permite encontrar la función ψ de un estado dado y consecuentemente, determinar la probabilidad de una partícula de estar en diferentes puntos del espacio. Pero esto está lejos de agotar el significado de la ecuación. Las reglas para la cuantización de la energía se siguen directamente de la ecuación (2.4.9) y de las condiciones impuestas sobre la función ψ . De acuerdo a su significado, la función ψ debe ser de un solo valor, continua y finita (excepto, tal vez, por puntos especiales). Además debe tener una derivada continua y finita. La colección de estos requisitos se denomina condiciones estándar.

La ecuación de Schrödinger incluye la energía total E de la partícula como parámetro. En la teoría de ecuaciones diferenciales se demuestra que las ecuaciones de la forma (2.4.9) tienen soluciones que satisfacen las condiciones estándar no a cualquier valor del parámetro (es decir de la energía E), pero solo ciertos valores seleccionados. Estos valores seleccionados se conocen como eigenvalores de la cantidad (de E en este caso). Las soluciones correspondientes a los eigenvalores de E son llamados eigenfunciones del problema. A la colección de eigenvalores se le conoce como espectro de la cantidad [40].

2.4.2. Pozo de potencial y otros casos

Un problema con un potencial, aunque bastante artificial, considera un potencial unidimensional de la forma:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & |x| > L/2, \\ 0, & |x| \leq L/2. \end{cases} \quad (2.4.11)$$

La ecuación de eigenvalores es

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0. \quad (2.4.12)$$

La solución ψ para cada una de las regiones de la figura 2.6(a) está dada como ψ_I , ψ_{II} y ψ_{III} . Por las condiciones de frontera, sabemos que $\psi_I = \psi_{III} = 0$, y para la región II, las soluciones permitidas son de la forma

$$\psi_{II} = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (2.4.13)$$

donde

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (2.4.14)$$

Evaluando en las fronteras, donde $\psi(x) = 0$, obtenemos

$$Ae^{-ikL/2} + Be^{ikL/2} = 0. \quad (2.4.15)$$

$$Ae^{ikL/2} + Be^{-ikL/2} = 0. \quad (2.4.16)$$

Esto se cumple si

$$k_n = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.4.17)$$

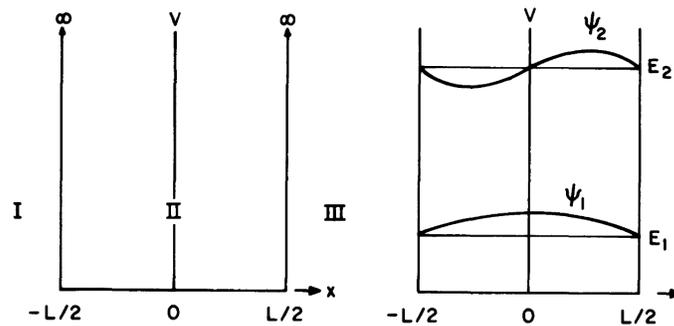
Así, las soluciones a la ecuación de Schrödinger tienen la forma (Apéndice A.2):

$$\psi_n = \begin{cases} \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right), & n = 1, 3, 5, \dots \\ \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (2.4.18)$$

y los valores de energía están definidos por

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2. \quad (2.4.19)$$

La figura 2.6(b) muestra los primeros dos niveles de energía y funciones de onda de una partícula inmersa en este potencial [41].



(a) Pozo de potencial.

(b) Primeros dos niveles de energía y funciones de onda.

Figura 2.6: Pozo de potencial unidimensional y su solución.

Para el caso de la partícula libre, la ecuación de Schrödinger unidimensional está dada por

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, \quad (2.4.20)$$

y las funciones de onda que satisfacen dicha ecuación tienen la forma (Apéndice A.3) [39]

$$\psi(x, t) = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}. \quad (2.4.21)$$

2.5. Mecánica cuántica fraccionaria

La mecánica clásica y la mecánica cuántica se basan en la suposición de que la función Hamiltoniana tiene la forma

$$H(\vec{p}, \vec{r}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}), \quad (2.5.1)$$

donde \vec{p} y \vec{r} son el momento y el espacio coordenado de una partícula con masa m y $V(\vec{r})$ es la energía potencial. En la mecánica cuántica \vec{p} y \vec{r} deben ser operadores \hat{p} y \hat{r} . Así la función Hamiltoniana $H(\vec{p}, \vec{r})$ se transforma en el operador Hamiltoniano $\hat{H}(\hat{p}, \hat{r})$,

$$\hat{H}(\hat{p}, \hat{r}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{r}), \quad (2.5.2)$$

donde $\hat{V}(\hat{r})$ es el operador de energía potencial.

La dependencia cuadrática del momento en (2.5.1) y (2.5.2) es un hecho físico empírico. Sin embargo, en el intento de comprender los fundamentos detrás de este hecho plantea la pregunta, ¿hay otras formas del término cinemático en (2.5.1) y (2.5.2) que no contradicen los principios fundamentales de la mecánica clásica y la mecánica cuántica? Laskin observó que un enfoque conveniente de la física teórica para responder a esta pregunta es el enfoque por integrales de trayectoria de Feynman [5].

En el año 2000, N. Laskin desarrolló una nueva extensión del concepto de fractalidad. Las integrales de trayectoria sobre las trayectorias de Lévy fueron definidas y la mecánica cuántica junto con la mecánica estadística fraccionaria fueron desarrolladas a través de esta nueva aproximación de integrales de trayectoria fraccionarias. Esta aproximación por integrales de trayectoria se definieron sobre trayectorias de los vuelos de Lévy, mostrando así que, si la fractalidad de las trayectorias Brownianas conducen a la mecánica cuántica y estadística estándar, la fractalidad

de las trayectorias de Lévy conducen a la mecánica cuántica y mecánica estadística fraccionarias [7–9].

La mecánica cuántica fraccionaria es la teoría de la mecánica cuántica basada en la ecuación de Schrödinger fraccionaria [42].

Históricamente, el primer ejemplo de un objeto físico fraccionario fue el movimiento Browniano, cuyas trayectorias no son diferenciables, curvas auto-similares cuya dimensión fractal es diferente de la dimensión topológica [6].

En física cuántica, el primer intento exitoso de aplicar el concepto de fractalidad fue el enfoque de Feynman a la mecánica cuántica por integrales de trayectoria [5].

La mecánica cuántica en el tratamiento de Feynman por integrales de trayectoria es la teoría de funcionales sobre la medida funcional generada por el movimiento Browniano (procesos estocásticos de Wiener). Laskin desarrolló un nuevo concepto de fractalidad en física cuántica. Construyó una nueva integral de trayectoria fraccionaria y formuló la mecánica cuántica fraccionaria como una integral de trayectoria sobre trayectorias de los vuelos de Lévy. Así, la mecánica cuántica fraccionaria en el tratamiento de integrales de trayectoria es la teoría de funcionales sobre la medida funcional generada por los procesos estocásticos de Lévy [7].

Los procesos estocásticos de Lévy son la generalización natural del movimiento Browniano [32]. Los fundamentos de la generalización son la teoría de las distribuciones de probabilidad estables desarrolladas por Lévy [43].

Los procesos de Lévy α -estables son caracterizados por el índice de Lévy α , $0 < \alpha \leq 2$. Cuando $\alpha = 2$ se tiene el movimiento Browniano (caso Gaussiano).

En el caso Gaussiano, el enfoque por integrales de trayectoria de la mecánica cuántica permite reproducir la ecuación de Schrödinger estándar. En el caso general, se obtiene la generalización fraccionaria de la ecuación de Schrödinger [7].

2.5.1. Formulación

Para una partícula que al tiempo inicial t_a se encuentra en el punto x y se mueve al punto x al tiempo t_b , se dice simplemente que la partícula va de a a b y su trayectoria $x(t)$ tendrá la propiedad $x(t_a) = x_a$ y $x(t_b) = x_b$. Se obtiene entonces una amplitud cuántica, a menudo

llamado kernel de propagación, la cual puede escribir como $K_F(x_b t_b | x_a t_a)$, que se usará para ir del punto a al punto b . Será la suma de la contribución de todas las trayectorias que van entre estos puntos extremos. Si se tiene una partícula cuántica moviéndose en el potencial $V(x)$ entonces la amplitud $K_F(x_b t_b | x_a t_a)$ puede escribirse como

$$K_F(x_b t_b | x_a t_a) = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}_{Feynman} x(\tau) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} d\tau V(x(\tau)) \right\}, \quad (2.5.3)$$

donde $V(x(\tau))$ es la energía potencial como un funcional de la trayectoria de la partícula $x(\tau)$, y la medida de la integral de trayectoria de Feynman está definido como

$$\begin{aligned} \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}_{Feynman} x(\tau) \cdots &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots dx_{N-1} \left(\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m} \right)^{-N/2} \\ &\times \prod_{j=1}^N \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \epsilon} (x_j - x_{j-1})^2 \right\} \cdots, \end{aligned} \quad (2.5.4)$$

donde m es la masa de la partícula cuántica, \hbar es la constante de Plank, $x_0 = x_a$, $x_N = x_b$ y $\epsilon = (t_b - t_a)/N$. La medida de la integral de trayectoria de Feynman es generada por el proceso del movimiento Browniano. Así, la ecuación (2.5.4) implica que

$$(x_j - x_{j-1}) \propto \left(\frac{\hbar}{m} \right)^{1/2} (\Delta t)^{1/2},$$

esta es la relación entre el desplazamiento espacial y la escala de tiempo. Esto implica que la dimensión fractal de la trayectoria de Feynman es $d_{\text{fractal}}^{(\text{Feynman})} = 2$.

La ecuación (2.5.4) conduce a la mecánica cuántica estándar [5].

La integral de trayectoria fraccionaria propuesta por Laskin es: [7–9]

$$K_L(x_b t_b | x_a t_a) = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x(\tau) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} d\tau V(x(\tau)) \right\}, \quad (2.5.5)$$

donde $V(x(\tau))$ es la energía potencial como un funcional de la trayectoria de la partícula de Lévy, y la medida de la integral de trayectoria fraccionaria se define como

$$\begin{aligned} \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x(\tau) \cdots &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots dx_{N-1} \hbar^{-N} \\ &\times \left(\frac{i D_\alpha \epsilon}{\hbar} \right)^{-N/\alpha} \prod_{j=1}^N L_\alpha \\ &\times \left\{ \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\hbar}{i D_\alpha \epsilon} \right)^{1/\alpha} |x_j - x_{j-1}| \right\} \cdots, \end{aligned} \quad (2.5.6)$$

donde D_α es el coeficiente de difusión cuántica fraccionaria, su dimensión física en el sistema CGS es $[D_\alpha] = \text{erg}^{1-\alpha} \text{cm}^\alpha \text{s}^{-\alpha}$, \hbar es la constante de Plank, $x_0 = x_a$, $x_N = x_b$, $\epsilon = (t_b - t_a)/N$, y la función de distribución de Lévy es expresada en términos de la función de Fox H [44]

$$\hbar^{-1} \left(\frac{D_\alpha t}{\hbar} \right)^{-1/\alpha} L_\alpha \left\{ \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\hbar}{D_\alpha t} \right)^{1/\alpha} |x| \right\} = \frac{1}{\alpha |x|} H_{2,2}^{1,1} \left[\frac{1}{\hbar} \left(\frac{\hbar}{D_\alpha t} \right)^{1/\alpha} |x| \left| \begin{matrix} (1,1/\alpha) & (1,1/2) \\ (1,1) & (1,1/2) \end{matrix} \right. \right] \quad (2.5.7)$$

donde α es el índice de Lévy.

La medida funcional en (2.5.6) es generada por los procesos estocásticos de los vuelos de Lévy.

De (2.5.6) se obtiene que

$$|x_j - x_{j-1}| \propto (\hbar^{\alpha-1} D_\alpha)^{1/\alpha} (\Delta t)^{1/\alpha},$$

lo cual implica que $d_{fractal}^{(\text{Lévy})} = \alpha$.

Se calcula el kernel de la partícula libre $K_L^{(0)}(x_b t_b | x_a t_a)$, y se comparan con el kernel de Feynman para la partícula libre $K_F^{(0)}(x_b t_b | x_a t_a)$. Para la partícula libre $V(x) = 0$, las ecuaciones (2.5.5) y (2.5.6) conducen a

$$\begin{aligned} K_L^{(0)}(x_b t_b | x_a t_a) &= \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x(\tau) \cdot 1 \\ &= \hbar^{-1} \left(\frac{i D_\alpha (t_b - t_a)}{\hbar} \right)^{-1/\alpha} \\ &\quad \times L_\alpha \left\{ \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\hbar}{i D_\alpha (t_b - t_a)} \right)^{1/\alpha} |x_b - x_a| \right\}. \end{aligned} \quad (2.5.8)$$

Cuando $\alpha = 2$, la distribución de Lévy se transforma en una Gaussiana, y los procesos de los vuelos de Lévy se transforman en los procesos del movimiento Browniano. Así, la ecuación (2.5.8), junto con la definición (2.5.7) y las propiedades de la función de Fox $H_{2,2}^{1,1}$ cuando $\alpha = 2$ [45], se transforma en el kernel de Feynman para la partícula libre [5]

$$K_F^{(0)}(x_b t_b | x_a t_a) = \left(\frac{2\pi i \hbar (t_b - t_a)}{m} \right)^{-1/2} \exp \left\{ \frac{i m (x_b - x_a)^2}{2 \hbar (t_b - t_a)} \right\}. \quad (2.5.9)$$

Así, (2.5.8) incluye como caso particular al propagador de Feynman cuando $\alpha = 2$.

En términos de la integral de Fourier (representación del momento), el kernel fraccionario $K_L^{(0)}(x_b t_b | x_a t_a)$ se escribe como

$$K_L^{(0)}(x_b t_b | x_a t_a) = \frac{1}{2\pi \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp \left\{ i \frac{p(x_b - x_a)}{\hbar} - i \frac{D_\alpha (t_b - t_a) |p|^\alpha}{\hbar} \right\}, \quad (2.5.10)$$

mientras que (2.5.9) tiene la forma

$$K_F^{(0)}(x_b t_b | x_a t_a) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp \left\{ i \frac{p(x_b - x_a)}{\hbar} - i \frac{p^2(t_b - t_a)}{2m\hbar} \right\}. \quad (2.5.11)$$

De (2.5.10) se observa que la energía E_p de la partícula cuántica fraccionaria con momento p está dada por

$$E_p = D_\alpha |p|^\alpha. \quad (2.5.12)$$

La comparación de (2.5.10) y (2.5.11) permite concluir que cuando $\alpha = 2$, entonces $D_2 = 1/2m$. Así, la ecuación (2.5.12) se transforma en $E_p = p^2/2m$.

Haciendo uso de (2.5.10) se puede definir la medida funcional fraccionaria en la representación del espacio fase como

$$\begin{aligned} \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} Dx(\tau) \int Dp(\tau) \cdots &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots dx_{N-1} \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} dp_1 \cdots dp_N \exp \left\{ i \frac{p_1(x_1 - x_a)}{\hbar} - i \frac{D_\alpha \epsilon |p_1|^\alpha}{\hbar} \right\} \\ &\times \cdots \times \exp \left\{ i \frac{p_N(x_b - x_{N-1})}{\hbar} - i \frac{D_\alpha \epsilon |p_N|^\alpha}{\hbar} \right\} \cdots \end{aligned} \quad (2.5.13)$$

donde $\epsilon = (t_b - t_a)/N$. Luego, el kernel $K_L(x_b t_b | x_a t_a)$ definido por (2.5.5) puede escribirse como

$$\begin{aligned} K_L(x_b t_b | x_a t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots dx_{N-1} \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} dp_1 \cdots dp_N \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N p_j (x_j - x_{j-1}) \right\} \\ &\times \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} D_\alpha \epsilon \sum_{j=1}^N |p_j|^\alpha - \frac{i}{\hbar} \epsilon \sum_{i=1}^N V(x_j) \right\}. \end{aligned}$$

En el límite continuo $N \rightarrow \infty$ y $\epsilon \rightarrow 0$, se obtiene

$$\begin{aligned} K_L(x_b t_b | x_a t_a) &= \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} Dx(\tau) \int Dp(\tau) \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} d\tau [p(\tau) \dot{x}(\tau) - H_\alpha(p(\tau), x(\tau))] \right\} \end{aligned} \quad (2.5.14)$$

donde la integral de trayectoria del espacio fase $\int_{x_a}^{x_b} Dx(\tau) \int Dp(\tau) \cdots$ está dada por la ecuación (2.5.13), \dot{x} denota la derivada temporal, H_α es el Hamiltoniano fraccionario

$$H_\alpha(p, x) = D_\alpha |p|^\alpha + V(x) \quad (2.5.15)$$

con los cambios $p \rightarrow p(\tau)$ y $x \rightarrow x(\tau)$, y $\{(p(\tau), x(\tau))\}$ es la trayectoria de la partícula en el espacio fase.

El kernel $K_L(\vec{r}_b t_b | \vec{r}_a t_a)$, definido por (2.5.5), describe la evolución del sistema cuántico fraccionario

$$\psi_f(\vec{r}_b, t_b) = \int d\vec{r}_a K_L(\vec{r}_b t_b | \vec{r}_a t_a) \psi_i(\vec{r}_a, t_a), \quad (2.5.16)$$

donde $\psi_i(\vec{r}_a, t_a)$ es la función de onda fraccionaria del estado inicial (al tiempo t_a), y $\psi_f(\vec{r}_b, t_b)$ es la función de onda del estado final (al tiempo t_b).

Para obtener la ecuación diferencial para la función de onda $\psi(\vec{r}, t)$, se aplica la ecuación (2.5.16) para el caso especial en que el tiempo t_b difiere de t_a solo un intervalo infinitesimal ϵ :

$$\psi(\vec{r}, t + \epsilon) = \int d\vec{r}' K_L(\vec{r}, t + \epsilon | \vec{r}', t) \psi(\vec{r}', t).$$

Haciendo uso de la aproximación de Feynman $\int_t^{t+\tau} d\tau V(\vec{r}(\tau)) \simeq \epsilon V[(\vec{r} + \vec{r}')/2, t]$ y la definición dada por (2.5.6), se obtiene

$$\psi(\vec{r}, t + \epsilon) = \int d\vec{r}' \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{p} \exp \left\{ i \frac{\vec{p}(\vec{r}' - \vec{r})}{\hbar} - i \frac{D_\alpha \epsilon |\vec{p}|^\alpha}{\hbar} - \frac{i}{\hbar} \epsilon V \left(\frac{\vec{r} + \vec{r}'}{2}, t \right) \right\} \psi(\vec{r}', t).$$

Expandiendo ambos lados en series de potencias y tomando los dos primeros términos

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t) + \epsilon \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \int d\vec{r}' \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{p} \exp \left\{ i \frac{\vec{p}(\vec{r}' - \vec{r})}{\hbar} \right\} \\ &\times \left(1 - i \frac{D_\alpha \epsilon |\vec{p}|^\alpha}{\hbar} \right) \left[1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon V \left(\frac{\vec{r} + \vec{r}'}{2}, t \right) \right] \psi(\vec{r}', t). \end{aligned} \quad (2.5.17)$$

Luego, tomando en cuenta las definiciones de las transformadas de Fourier

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{p} \exp \left\{ i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} \right\} \varphi(\vec{p}, t), \quad (2.5.18)$$

$$\varphi(\vec{p}, t) = \int d\vec{r} \exp \left\{ -i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} \right\} \psi(\vec{r}, t), \quad (2.5.19)$$

e introduciendo la derivada fraccionaria de Riesz $(-\hbar^2 \Delta)^{\alpha/2}$

$$(-\hbar^2 \Delta)^{\alpha/2} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{p} \exp \left\{ i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} \right\} |\vec{p}|^\alpha \varphi(\vec{p}, t), \quad (2.5.20)$$

se obtiene de la ecuación (2.5.17)

$$\psi(\vec{r}, t) + \epsilon \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \psi(\vec{r}, t) - i \frac{D_\alpha \epsilon}{\hbar} (-\hbar^2 \Delta)^{\alpha/2} \psi(\vec{r}, t) - \frac{i}{\hbar} \epsilon V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t).$$

Esto se cumple para el orden ϵ si $\psi(\vec{r}, t)$ satisface la ecuación diferencial

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = D_\alpha(-\hbar^2 \Delta)^{\alpha/2} \psi + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t), \quad (2.5.21)$$

la cual es la ecuación de Schrödinger fraccionaria.

La ecuación (2.5.21) puede escribirse en forma de operador como

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H_\alpha \psi \quad (2.5.22)$$

donde H_α es el operador Hamiltoniano fraccionario

$$H_\alpha = D_\alpha(-\hbar^2 \Delta)^{\alpha/2} + V(\vec{r}, t). \quad (2.5.23)$$

Cuando H_α no depende explícitamente del tiempo, existe una solución especial a la ecuación (2.5.21) de la forma:

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-(i/\hbar)Et} \phi(\vec{r}),$$

donde $\phi(\vec{r})$ satisface

$$H_\alpha \phi(\vec{r}) = E \phi(\vec{r})$$

o

$$D_\alpha(-\hbar^2 \Delta)^{\alpha/2} \phi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \phi(\vec{r}) = E \phi(\vec{r}) \quad (2.5.24)$$

con $1 < \alpha \leq 2$.

Siendo la ecuación (2.5.24) la ecuación de Schrödinger fraccionaria independiente del tiempo (o estacionaria) [46].

2.5.2. Partícula libre

Resolviendo, de acuerdo con [9,47] la ecuación de Schrödinger fraccionaria unidimensional (2.5.21) para $V = 0$ con la condición inicial

$$\psi(\vec{r}, t = 0) = \psi_0(\vec{r}). \quad (2.5.25)$$

Aplicando la transformada de Fourier (2.5.19) y usando la derivada fraccionaria de Riesz (2.5.20) se obtiene la función de onda $\varphi(p, t)$ en la representación del momento

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(p, t)}{\partial t} = D_\alpha |p|^\alpha \varphi(p, t), \quad (2.5.26)$$

con la condición inicial $\varphi_0(p)$ dado por

$$\varphi_0(p) = \varphi_0(p, t = 0) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ip\vec{r}/\hbar} \psi_0(\vec{r}). \quad (2.5.27)$$

Resolviendo (2.5.26) y (2.5.27) se obtiene

$$\varphi(p, t) = \exp \left\{ -i \frac{D_\alpha |p|^{\alpha t}}{\hbar} \right\} \varphi_0(p). \quad (2.5.28)$$

Así, la solución de la ecuación de Schrödinger fraccionaria unidimensional con la condición inicial dada por (2.5.25), puede ser presentada como

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{r}' \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp \left\{ i \frac{p(\vec{r} - \vec{r}')}{\hbar} - i \frac{D_\alpha |p|^{\alpha t}}{\hbar} \right\} \psi_0(\vec{r}') \quad (2.5.29)$$

o

$$\psi(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{r}' \frac{1}{\alpha(\vec{r} - \vec{r}')} H_{2,2}^{1,1} \left[\frac{1}{\hbar} \left(\frac{\hbar}{iD_\alpha t} \right)^{1/\alpha} |\vec{r} - \vec{r}'| \left| \begin{matrix} (1, 1/\alpha) & (1, 1/2) \\ (1, 1) & (1, 1/2) \end{matrix} \right. \right] \psi_0(\vec{r}') \quad (2.5.30)$$

donde la integral sobre dp se expresa en términos de la función H de Fox $H_{2,2}^{1,1}$.

Capítulo 3

Ejemplos de la ecuación de Schrödinger fraccionaria existentes

Tiempo después de que Laskin publicara sus trabajos sobre la mecánica cuántica fraccionaria [7–10], surgieron trabajos de otros investigadores respecto al tema. Algunos replicando los cálculos realizados por Laskin, otros presentando soluciones de la ecuación tanto para la partícula libre como para diferentes potenciales y otros presentando enfoques diferentes para llegar a una nueva forma de la ecuación de Schrödinger fraccionaria.

Uno de los primeros trabajos en aparecer fue el de Debnath, que presentó el uso de las ecuaciones diferenciales e integrales fraccionarias en mecánica de fluidos así como la ecuación de Schrödinger fraccionaria [48].

En 2004 Naber construyó la ecuación de Schrödinger fraccionaria en el tiempo [49]. Encontró que era equivalente a la ecuación de Schrödinger habitual pero con un Hamiltoniano que dependía del tiempo y no era local en el tiempo. Resolvió la ecuación para el caso de la partícula libre y el pozo de potencial. La probabilidad y los niveles de energía resultantes incrementaban con el tiempo a un valor límite dependiendo del orden de la derivada temporal. En el límite $t \rightarrow \infty$ la energía de los estados propios era similar a la dada por la ecuación de Schrödinger habitual pero dividida por el orden de la derivada temporal al cuadrado y teniendo un exponente dependiente del orden de la derivada temporal. Inicialmente la energía de los estados propios es la misma que para la ecuación de Schrödinger habitual. A medida que el tiempo pasa, la energía

de cada nivel incrementa, al igual que el espacio entre los niveles de energía. Por tanto, si el espectro de radiación emitida se controlara a lo largo del tiempo, para un pozo fraccionario, se vería un corrimiento al azul y el espacio entre las líneas espectrales también aumentaría.

Luego Bhatti y Debnath obtuvieron en 2004 las soluciones de la partícula libre de la ecuación de Schrödinger fraccionaria temporal y la ecuación de Dirac [50]. Representaron la solución de la ecuación de Schrödinger por una Gaussiana tridimensional generalizada, cuyas gráficas se representaron en términos de varios valores fraccionarios. Así también presentaron las soluciones a la ecuación de Dirac y proporcionaron gráficas para mostrar el comportamiento de la solución para un rango de valores fraccionarios. Observaron que cuando el orden de la derivada temporal es $\alpha = 1/2$ la solución estaba completamente amortiguada. A medida que se acercaba a 1, las soluciones comenzaban a comportarse de manera habitual. También mostraron que las soluciones correspondientes al orden integral de las ecuaciones de Schrödinger y Dirac seguían como casos especiales de las ecuaciones diferenciales parciales fraccionarias correspondientes. Las soluciones se obtuvieron en términos de las funciones G de Mittag-Leffler usando las transformadas conjuntas de Fourier y Laplace.

Años después, Gou y Xu resolvieron en 2006 la ecuación de Schrödinger fraccionaria para la partícula libre y para el pozo de potencial infinito [47]. Obtuvieron la solución fundamental del problema de Cauchy para la partícula libre, los niveles de energía y las funciones de onda normalizadas de una partícula en un pozo de potencial. En el problema de penetración de barrera, determinaron los coeficientes de reflexión y de transmisión de una partícula en una pared de potencial rectangular. Y en el problema de dispersión cuántica, de acuerdo a la ecuación de Schrödinger fraccionaria, proporcionan la función de Green de la ecuación integral de Lippmann-Schwinger.

En 2007, Wang y Xu construyeron la ecuación de Schrödinger fraccionaria con derivadas fraccionarias de espacio y tiempo [51]. Resolvieron la ecuación para el caso de la partícula libre y un pozo de potencial cuadrado por el método de transformadas integrales, transformada de Fourier y transformada de Laplace, y las soluciones las expresaron en términos de la función G de Mittag-Leffler. Encontraron que algunos resultados clásicos pueden ser obtenidos cuando los valores de las derivadas fraccionarias toman valores particulares.

Ese mismo año, Bhatti obtuvo la función de onda de la partícula libre de la ecuación de onda fraccionaria en el tiempo [52]. Presentó la función de onda en términos de la función de Green tridimensional generalizada que involucra potencias de tiempo fraccionarias como la variable t^α . Dedujo el principio de incertidumbre de Heisenberg de la ecuación de Schrödinger fraccionaria utilizando el valor integral del parámetro fraccionario $\alpha = 1$.

Dong y Xu estudiaron la ecuación de Schrödinger fraccionaria espacial, propuesta por Laskin, con potencial lineal, potencial delta y potencial de Coulomb bajo la representación del momento utilizando la transformada de Fourier [53]. Mediante el uso de la transformada de Mellin y su transformación inversa obtuvieron los niveles de energía y las funciones de onda en términos de la función H de Fox para una partícula en un campo de potencial lineal y un potencial delta. Mostraron la forma integral de las funciones de onda para una partícula en el campo potencial de Coulomb y demostraron que los niveles de energía discutidos por Laskin en [10] satisfacen una igualdad de límite infinito de la función H. Además todos sus resultados contenían los de la mecánica cuántica estándar como casos particulares. En 2008, construyeron la ecuación de Schrödinger fraccionaria con derivadas fraccionarias espacial y temporal [54]. Luego estudiaron el comportamiento de evolución temporal del sistema cuántico fraccionario en campos potenciales independientes del tiempo. Encontraron que las propiedades de evolución temporal del sistema cuántico no solo dependían del orden de la derivada fraccionaria temporal, sino también del signo de los valores propios de la ecuación espacial. Encontraron también que el valor límite de probabilidad podía ser mayor o menor a uno, lo que significaba que la ecuación de Schrödinger fraccionaria describe el sistema cuántico donde la probabilidad no es conservada y las partículas pueden ser extraídas o absorbidas por los potenciales. Probaron que no hay cantidades que se conserven en el sistema cuántico fraccionario espacio-temporal.

Ese mismo año estudiaron la ecuación de Schrödinger fraccionaria para el pozo de potencial infinito, un potencial periódico y un potencial delta [55]. Encontraron que la condición de continuidad o discontinuidad de una derivada fraccionaria de una función de onda debe ser considerada para resolver la ecuación de Schrödinger fraccionaria. Obtuvieron más estados de paridad que los obtenidos por la mecánica cuántica estándar para el pozo de potencial infinito. Derivaron las ecuaciones de energía correspondientes y resolvieron por métodos gráficos. Mostraron también

la validez del teorema de Bloch y revelaron la estructura de la banda de energía para el potencial periódico.

En 2009, Eid *et al.* [56] resolvieron la ecuación de Schrödinger fraccionaria en un espacio fraccionario α -dimensional con un potencial de Coulomb proporcional a $\frac{1}{r^{\beta-2}}$, $2 \leq \beta \leq 4$. Las funciones de onda fueron estudiadas en términos de dimensionalidades espaciales α y β y los resultados para $\beta = 3$ fueron comparados con los presentados en la literatura. Partieron de la ecuación de Schrödinger fraccionaria independiente del tiempo en coordenadas esféricas en un espacio α -dimensional. Resolvieron la ecuación por variables separables y obtuvieron las soluciones para la parte radial para varios valores de β . Para el caso $\beta = 3$ obtuvieron el resultado presentado en la literatura, pero para otros valores considerados, la forma de la solución difiere de las otras. Los resultados obtenidos en este artículo pueden aplicarse a modelos de espacios de dimensión fraccionaria con un potencial de Coulomb fraccionario para excitones¹ en sólidos anisotrópicos.

En 2010, De Oliveira *et al.* resolvieron la ecuación de Schrödinger fraccionaria presentada por Laskin para potenciales delta y doble delta para todas las energías [57]. Presentaron las soluciones en términos de la función de Fox H. En 2011 estudiaron el efecto túnel a través de potenciales delta y doble delta en la mecánica cuántica fraccionaria [42]. Luego de resolver la ecuación de Schrödinger fraccionaria para estos potenciales, calcularon los coeficientes de reflexión y de transmisión correspondientes. Observaron que esos coeficientes tienen un comportamiento interesante, particularmente, que se puede tener efecto túnel de energía cero cuando el orden de la derivada de Riesz es diferente de 2. Además, obtienen que para ambos potenciales, el límite de energía cero del coeficiente de transmisión está dado por $\tau_0 = \cos^2(\pi/\alpha)$ donde α es el orden de la derivada.

En el mismo año, Muslih *et al.* [58] presentaron una ecuación de Schrödinger fraccionaria y su solución. Obtuvieron la ecuación mediante dos métodos, primero usando el principio variacional y luego de la ecuación de Klein-Gordon fraccionaria. Demostraron que ambos métodos llevan a la misma ecuación de Schrödinger fraccionaria. Obtuvieron las soluciones para la partícula en un pozo de potencial infinito, y estas soluciones fueron obtenidas en términos de los senos de la

¹Un excitón es una cuasipartícula (o excitación elemental) de los sólidos formada por un electrón y un hueco ligados a través de la interacción coulombiana. Se da únicamente en semiconductores y aislantes.

función G de Mittag-Leffler.

Saxena *et al.* [59] presentaron la solución de la generalización fraccionaria de la ecuación de Schrödinger unidimensional siguiendo el método conjunto de las transformadas de Laplace y Fourier. La solución obtenida se presentó en términos de la función H de Fox. Obtuvieron como caso especial un resultado obtenido anteriormente por Debnath [48] para la solución de la ecuación de Schrödinger generalizada. Ese mismo año presentaron la solución de la ecuación de Schrödinger fraccionaria en el espacio y el tiempo unidimensional [60] siguiendo el mismo método que su trabajo anterior. Presentaron su resultado principal en forma de teorema y presentaron tres casos especiales en forma de corolarios.

En 2011, Dong estudió el sistema cuántico fraccionario de muchos cuerpos utilizando el método de matriz de densidad [61]. Obtuvo resultados del modelo de Thomas-Fermi, obtuvo la presión cuántica del gas de electrones libres. También mostró la validez de los teoremas de Hohenberg-Kohn en la mecánica cuántica fraccionaria espacial y generalizó la teoría funcional de la densidad a la mecánica cuántica fraccionaria.

Por su parte, Laskin presentó en 2012 una revisión de los fundamentos físicos de la mecánica cuántica [46]. En los fundamentos cubre la ecuación de Schrödinger fraccionaria, la derivada fraccionaria de Riesz, el enfoque por integrales de trayectoria a la mecánica cuántica fraccionaria, la hermiticidad del operador Hamiltoniano fraccionario, la ley de conservación de la paridad y la densidad de corriente. Las aplicaciones físicas que presenta son la dinámica de la partícula libre, una nueva representación para el kernel de la partícula libre, el pozo de potencial infinito, estados ligados en un pozo de potencial δ , potencial lineal, átomo de Bohr fraccionario y el oscilador fraccionario. Revisa también los fundamentos del enfoque por integrales de trayectoria de Lévy a la mecánica estadística fraccionaria. Los resultados presentados en su trabajo son representados en términos de la función de Fox H.

Uno de los primeros trabajos que puso en duda los resultados obtenidos por Laskin fue el de Jeng *et al.* [62]. En este trabajo se analizaba el pozo de potencial infinito unidimensional y mostraba que el supuesto estado fundamental presentado por varios artículos [7–9, 47, 55], que se basan en un enfoque por partes, definitivamente no era la solución de la ecuación de Schrödinger fraccionaria para el parámetro fraccionario general α para el caso del pozo de potencial infinito,

pero que los resultados obtenidos por Dong y Xu [53] para el potencial delta eran correctos. Presentaron una solución a la ecuación de Schrödinger fraccionaria para el oscilador armónico unidimensional con $\alpha = 1$.

Ante esta situación, Bayin publicó un trabajo [63] en el que analiza el problema del pozo de potencial infinito y prueba que, contrario a lo establecido por Jeng *et al.* [62], con un tratamiento exacto y adecuado, las soluciones de la ecuación de Schrödinger fraccionaria presentadas por Laskin son correctas. También discute un enfoque potencial efectivo y presenta una solución a la partícula libre para la ecuación de Schrödinger fraccionaria espacio-temporal en coordenadas generales en términos de la función H de Fox, mismos que fueron obtenidos por Guo y Xu [47]. Presentó también, para mayor claridad, información adicional sobre las integrales críticas y describió cómo se logra su continuación analítica [64].

Posterior a esto, Hawkins y Schwarz [65] argumentaron que el cálculo realizado por Bayin en su trabajo [63] no era consistente puesto que utilizaba técnicas integrales de contorno estándar a pesar de la ausencia de un integrando analítico. Presentaron ellos un cálculo que afirmaban correcto, respaldado por su trabajo previo [62] que demostraba que las supuestas soluciones por partes no resuelven la ecuación de Schrödinger fraccionaria para el pozo de potencial infinito. Según sus resultados, si la solución del estado base dado por Laskin fuera correcta, entonces su integral calculada debería ser proporcional a $\cos(\pi x/2a)$, pero no era el caso. Sus soluciones mostraban que las soluciones de Laskin no eran correctas, sin embargo, tampoco mostraban cuales sí eran las soluciones correctas.

Para ello, Bayin dio detalles adicionales sobre cómo se evaluaban las integrales [66], y mostraba que no había inconsistencia alguna para el caso de pozo de potencial. Mostró que para n en general, en lo que respecta a la representación integral de la solución en el espacio de momento, no hay inconsistencia [67]. Para determinar la fuente de una posible inconsistencia, también examinó las diferentes representaciones de la derivada de Riesz, que juega un papel central en la controversia y muestra que todas tienen la misma transformada de Fourier cuando se evalúan con suposiciones consistentes.

Luchko revisó la ecuación de Schrödinger fraccionaria para el caso de la partícula que se mueve en un pozo de potencial infinito [68]. Proporciona un tratamiento matemático exhaustivo sobre

las soluciones a la ecuación de Schrödinger fraccionaria para una partícula que se mueve en un pozo de potencial infinito. El problema en cuestión se reformula en términos de tres ecuaciones integrales con los kernel de potencia. Incluso, si las ecuaciones no parecen muy complicadas, no se conoce ninguna solución a estas ecuaciones de forma explícita. Las ecuaciones obtenidas se utilizan para mostrar que los eigenvalores y eigenfunciones de la ecuación de Schrödinger fraccionaria para una partícula en un pozo de potencial infinito presentado por Laskin en el año 2000 no pueden ser válidas.

Zhao *et al.* investigaron en 2013 la ecuación de Schrödinger fraccionaria local en el sistema Cantoriano unidimensional [69]. Las soluciones de aproximaciones se obtuvieron utilizando el método de expansión de series fraccionaria local. Las soluciones obtenidas mostraron que su método es una herramienta simple y eficaz para resolver ecuaciones diferenciales parciales dentro del operador de derivada fraccionaria local.

Achar *et al.* [70] también obtuvieron la ecuación de Schrödinger fraccionaria para una partícula no relativista siguiendo el método de integrales de trayectoria de Feynman. Corrigieron ciertos errores en el trabajo de Naber [49]. Obtuvieron la ecuación de continuidad correcta para la densidad de probabilidad así como una solución de la función de Green para el caso de la partícula libre. La probabilidad total para una partícula libre se mostró que es cero en el límite para un tiempo infinito, en contraste con los resultados de Naber de una probabilidad total mayor a 1. Proporcionaron una generalización para el caso de la partícula en un campo de potencial.

Mahata discutió en 2013 los trabajos recientes para la derivación de la mecánica cuántica fraccionaria [71]. Discutió la ecuación de Schrödinger fraccionaria con y sin un término local. Además discutió las aplicaciones de un enfoque fraccionaria a la ecuación de Schrödinger para la partícula libre y el pozo de potencial.

En el año 2016, Wei [72] señaló algunas deficiencias en dos documentos de Laskin. Argumentó que la relación de incertidumbre fraccionaria no se cumplía en general y que la ecuación de continuidad de probabilidad en la mecánica cuántica carecía de un término fuente, lo que conducía a la teletransportación de partículas. Por su parte, Laskin aclaró que el comentario presentaba declaraciones erróneas [73]. Presentó un mapa entre la mecánica cuántica estándar y la mecánica cuántica fraccionaria para enfatizar las características de la mecánica cuántica fraccionaria y

para evitar interpretaciones erróneas de la relación de incertidumbre fraccionaria. Además demostró que la ecuación de probabilidad fraccionaria que presentó en sus artículos es correcta en su área de aplicación.

Por otro lado, en años recientes, han aparecido trabajos mostrando resultados a través de métodos numéricos para el problema de eigenvalores del operador Laplaciano fraccionario. Trabajos como el de Zoia *et al.* [74] muestran estos resultados para diferentes condiciones de frontera en un intervalo finito. Kwasnicki [75] obtiene los primeros niveles de energía para el problema unidimensional en un intervalo finito. Guerrero y Moreles [76] propusieron un método por aproximación por función de volumen de control para resolver ecuaciones que involucran Laplacianos fraccionarios mientras que Duo y Zhang [77] calcularon el estado base y el primer estado excitado de la ecuación de Schrödinger fraccionaria en un pozo de potencial infinito. Los resultados que obtuvieron fueron comparados con los obtenidos por Zoia y Kwasnicki. Los resultados obtenidos de forma numérica en estos trabajos muestran un comportamiento asintótico de los eigenvalores del Laplaciano fraccional.

Capítulo 4

Análisis de la distribución de estados cuánticos para el pozo de potencial

En años recientes se han estudiado problemas variacionales que involucran operadores diferenciales no locales. Estos operadores usualmente se definen vía integración global y permiten describir procesos difusivos en presencia de interacciones de largo alcance. El operador modelo es el Laplaciano fraccional $(-\Delta)^s$, para $0 < s < 1$.

En el modelado de procesos de difusión para un material confinado de una región delimitada Ω se debe de tomar en cuenta la naturaleza no local del problema. Las condiciones de frontera que naturalmente se pueden acoplar a las ecuaciones de la forma

$$(-\Delta)^s u = f \text{ en } \Omega$$

reflejan interacciones de largo alcance. Se consideran dos tipos de tales condiciones de frontera. Ambas surgen juntas con el operador Laplaciano fraccionario y se conocen como condiciones de frontera tipo Navier y tipo Dirichlet respectivamente [78].

Las condiciones de frontera tipo Navier para el operador $(-\Delta)^s$ se definen como

$$u|_{\partial\Omega} = \Delta u|_{\partial\Omega} = \Delta^2 u|_{\partial\Omega} = \dots = \Delta^{s-1} u|_{\partial\Omega} = 0. \quad (4.0.1)$$

El operador correspondiente $(-\Delta_\Omega)_N^s$ (espectral) es la s -ésima potencia del operador Laplaciano convencional.

Por otro lado, las condiciones de frontera tipo Dirichlet para el operador $(-\Delta)^s$ se definen como

$$u|_{\partial\Omega} = \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}}|_{\partial\Omega} = \frac{\partial^2 u}{\partial \mathbf{n}^2}|_{\partial\Omega} = \cdots = \frac{\partial^{s-1} u}{\partial \mathbf{n}^{s-1}}|_{\partial\Omega} = 0, \quad (4.0.2)$$

donde \mathbf{n} es el vector unitario normal a $\partial\Omega$. Contrario al operador Laplaciano tipo Navier $(-\Delta_\Omega)_N^s$, el operador Laplaciano tipo Dirichlet $(-\Delta_\Omega)_D^s$ no se define como potencia espectral del Laplaciano convencional. Ambos operadores se definen positivos y tienen espectro discreto, donde

$$\lambda_{s,i}^N > \lambda_{s,i}^D$$

siendo que $\lambda_{s,i}^N$ y $\lambda_{s,i}^D$ representan los eigenvalores de $(-\Delta)_N^s$ y $(-\Delta)_D^s$ respectivamente [78, 79].

Para ver cómo se relacionan ambos operadores, se pueden enfatizar en el caso del primer término de ambas condiciones de frontera, esto es, cuando la solución evaluada en la frontera se anule. En la literatura se consideran dos nociones de operadores fraccionarios, la integral (que se reduce al Laplaciano clásico) y la espectral (conocido como Laplaciano fraccional local) [79].

Para un $s \in (0, 1)$, el operador de Laplace fraccional en el punto x se define por

$$(-\Delta)_D^s u(x) := \frac{c(n, s)}{2} \int_{\mathcal{R}^n} \frac{2u(x) - u(x+y) - u(x-y)}{|y|^{n+2s}} dy, \quad (4.0.3)$$

donde $c(n, s)$ es una constante de normalización que depende solamente de n y s .

Un operador diferente, en ocasiones denotado por A_s se define como la potencia del operador de Laplace y se obtiene usando la descomposición espectral del laplaciano. Sea Ω un dominio delimitado suave en \mathbb{R}^n y sean λ_k y e_k , $k \in N$, los eigenvalores y eigenfunciones correspondientes del operador laplaciano $-\Delta$ en Ω con condiciones de frontera de Dirichlet cero sobre $\partial\Omega$, es decir

$$\begin{aligned} -\Delta e_k &= \lambda_k e_k \text{ en } \Omega, \\ e_k &= 0 \text{ sobre } \partial\Omega, \end{aligned} \quad (4.0.4)$$

normalizada de tal manera que $\|e_k\|_{L^2} = 1$. Para algún $s \in (0, 1)$ y algún u con

$$u(x) = \sum_{i \in N} a_i e_i(x) \quad x \in \Omega, \quad (4.0.5)$$

se considera el operador

$$A_s u = (-\Delta)_N^s u = \sum_{i \in N} a_i \lambda_i^s e_i, \quad (4.0.6)$$

donde a_i representa la proyección de u sobre la dirección e_i .

Estos dos operadores son diferentes. El operador espectral depende del dominio Ω considerado (dado que λ_i y e_i dependen de Ω), mientras que el integral evaluado en algún punto es independiente del dominio en el cual se establece la ecuación. Por la definición del operador espectral, sus eigenvalores son λ_k^s y e_k , esto es, la s -ésima potencia de los eigenvalores y las mismas eigenfunciones del operador Laplaciano estándar.

Se consideran entonces los problemas de eigenvalores en un dominio suavemente delimitado $\Omega \in \mathbb{R}^n$, con condiciones de frontera tipo Dirichlet homogéneo cero:

$$\left. \begin{aligned} (-\Delta)_N^s u &= \lambda u \text{ en } \Omega, \\ u &= 0 \text{ sobre } \partial\Omega \end{aligned} \right\} \quad (4.0.7)$$

y

$$\left. \begin{aligned} (-\Delta)_D^s u &= \lambda u \text{ en } \Omega, \\ u &= 0 \text{ en } \mathbb{R}^n \setminus \Omega \end{aligned} \right\}. \quad (4.0.8)$$

A partir de esto, se puede proceder a resolver el problema de eigenvalores para la ecuación de Schrödinger fraccionaria con condiciones de frontera tipo Dirichlet haciendo uso del operador Laplaciano fraccional con las condiciones de frontera tipo Navier, esto debido a que el espectro del operador integral es más difícil de describir explícitamente.

4.1. Pozo de potencial unidimensional

Para corroborar los resultados obtenidos por Laskin en sus trabajos [9, 46, 80], se procede al análisis del caso de la partícula en un pozo de potencial.

Una partícula en una barrera de potencial unidimensional se mueve en un campo potencial de la forma

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & |x| > a \\ 0, & |x| \leq a. \end{cases} \quad (4.1.1)$$

Es de nuestro interés el encontrar las soluciones de la ecuación de Schrödinger (2.5.24) unidimensional que describe los estados estacionarios con energías bien definidas. Así, en la región

media donde el potencial se anula, la ecuación de eigenvalores es

$$D_\alpha(-\hbar^2\Delta)^{\alpha/2}\phi(x) = E\phi(x). \quad (4.1.2)$$

Reacomodando algunos términos se puede establecer que

$$(-\Delta)^{\alpha/2}\phi(x) = k^\alpha\phi(x), \quad (4.1.3)$$

donde

$$k^\alpha = \frac{E}{D_\alpha\hbar^\alpha}. \quad (4.1.4)$$

De acuerdo a (4.0.7) y las definiciones proporcionadas en (4.0.5) y (4.0.6), puede establecerse entonces la relación

$$\sum_{i \in \mathbb{N}} a_i k_i^\alpha \phi_i = k^\alpha \sum_{i \in \mathbb{N}} a_i \phi_i, \quad (4.1.5)$$

de donde se obtiene

$$\sum_{i \in \mathbb{N}} a_i \phi_i (k_i^\alpha - k^\alpha) = 0. \quad (4.1.6)$$

Debido a que el operador de Riesz es hermitiano [10], las ϕ_i 's son una base ortogonal, con ello se sigue que la única solución posible a la ecuación anterior es que $a_i(k_i^\alpha - k^\alpha) = 0$, lo cual implica a su vez que bien $a_i = 0$ o $k_i = k$ para cada i . Al suponer que k es diferente de cada k_i automáticamente se tiene que todos los $a_i = 0$ lo cual nos lleva a la eigenfunción trivial nula. Sin embargo, si k fuese igual a alguna k_j , entonces todos los a_i con i diferentes de j deben ser cero y la eigenfunción del nuevo operador en cuestión es una combinación lineal de los eigenfunciones asociadas al eigenvalor k_j , igual en número a la degeneración de dicho eigenvalor.

Así entonces

$$k^\alpha = k_i^\alpha, \quad (4.1.7)$$

o

$$k = k_i. \quad (4.1.8)$$

De (2.4.14) y (4.1.4) se obtiene

$$\frac{E_N}{D_\alpha\hbar^\alpha} = \left(\frac{2mE_e}{\hbar^2} \right)^{\alpha/2} \quad (4.1.9)$$

y con ayuda de (2.4.19) se obtiene

$$E_N = D_\alpha \left(\frac{\hbar\pi}{2a} \right)^\alpha n^\alpha. \quad (4.1.10)$$

Las soluciones son de la forma

$$\phi_n(x) = C_0 \operatorname{sen} \frac{n\pi}{2a}(x + a), \quad (4.1.11)$$

para $n \in \mathbb{N}$. La normalización $\int_{-\infty}^{\infty} |\phi(x)|^2 dx = 1$ conlleva a que $C_0 = 1/\sqrt{a}$.

4.2. Generalización al caso del pozo 3D

Teniendo en cuenta el potencial dado por

$$V(x, y, z) = \begin{cases} \infty, & |x| > a, |y| > b, |z| > c \\ 0, & \text{cualquier otro caso} \end{cases} \quad (4.2.1)$$

con las condiciones de frontera

$$\phi|_{\partial\Omega} = 0. \quad (4.2.2)$$

La ecuación a resolver es de la forma

$$D_\alpha(-\hbar^2 \Delta)^{\alpha/2} \phi(\vec{r}) = E \phi(\vec{r}). \quad (4.2.3)$$

Separando al solución de forma que

$$\phi(\vec{r}) = \phi_x(x) \phi_y(y) \phi_z(z), \quad (4.2.4)$$

y haciendo uso nuevamente del operador espectral, se obtiene en este caso para cada coordenada

$$\sum_{i \in \mathbb{N}} a_i k_i^\alpha \phi_i = k^\alpha \sum_{i \in \mathbb{N}} a_i \phi_i. \quad (4.2.5)$$

Dado que $k = (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)^{1/2}$ y

$$k_x = \frac{n_x \pi}{2a}, \quad k_y = \frac{n_y \pi}{2b}, \quad k_z = \frac{n_z \pi}{2c}, \quad (4.2.6)$$

los niveles de energía son de la forma

$$E_{N,lmn} = D_\alpha \left(\frac{\hbar \pi}{2} \right)^\alpha \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right)^{\alpha/2}, \quad (4.2.7)$$

y las soluciones admitidas son de la forma

$$\phi_{N,lmn}(x, y, z) = C \operatorname{sen}(k_x(x + a)) \operatorname{sen}(k_y(y + b)) \operatorname{sen}(k_z(z + c)). \quad (4.2.8)$$

Cuando la caja es simétrica ($a = b = c = \frac{L}{2}$)

$$\phi_{N,lmn}(x, y, z) = C \operatorname{sen} k_x \left(x + \frac{L}{2}\right) \operatorname{sen} k_y \left(y + \frac{L}{2}\right) \operatorname{sen} k_z \left(z + \frac{L}{2}\right) \quad (4.2.9)$$

y

$$E_{N,lmn} = D_\alpha \left(\frac{\hbar\pi}{L}\right)^\alpha (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)^{\alpha/2}. \quad (4.2.10)$$

Resultados similares fueron obtenidos mediante enfoques distintos por Dong [81] y Wei [82].

En el apéndice B se presenta un procedimiento distinto para la obtención de los eigenvalores y eigenfunciones en términos las soluciones conocidas.

4.3. Densidad de estados

Para un sistema físico específico se necesita evaluar el número de estados de energía posibles (N) por volumen (V). Este sistema puede consistir en moléculas de un gas ideal, electrones en un metal o la radiación de cuerpo negro. El número de estados dependerá de la energía debido a la naturaleza ondulatoria de las partículas. Una partícula con longitudes de onda más cortas tiene más formas de caber en una caja de tamaño fijo que una partícula con longitud de onda más grande. Dado que a una longitud de onda mas corta le corresponde una energía mayor, el número de estados $N(E)$ incrementa conforme incrementa la energía.

El número de estados de energía posibles por volumen ($n_s(E)$) se escribe como

$$n_s(E) = \frac{N(E)}{V}. \quad (4.3.1)$$

La densidad de estados ρ se define como la derivada de n_s con respecto a E como

$$\rho(E) = \frac{dn_s}{dE}. \quad (4.3.2)$$

Esta última relación será positiva puesto que n_s incrementa con E . La densidad de estados es el número de estados por volumen por unidad de energía. La función de densidad de estados especifica cuales estados son permitidos, mas no cuáles están ocupados [83].

Para el caso de electrones en un metal, se puede tomar al electrón como una partícula relativista en una caja.

Así, definiendo el radio vector R en el espacio n

$$R = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}, \quad (4.3.3)$$

y teniendo en cuenta la ecuación (4.2.10), se puede expresar la energía en términos de R .

$$E = D_\alpha \left(\frac{\hbar\pi}{L} \right)^\alpha R^\alpha \quad (4.3.4)$$

o

$$R = \frac{L}{\hbar\pi} \left(\frac{E}{D_\alpha} \right)^{1/\alpha} = \frac{2L}{h} \left(\frac{E}{D_\alpha} \right)^{1/\alpha}. \quad (4.3.5)$$

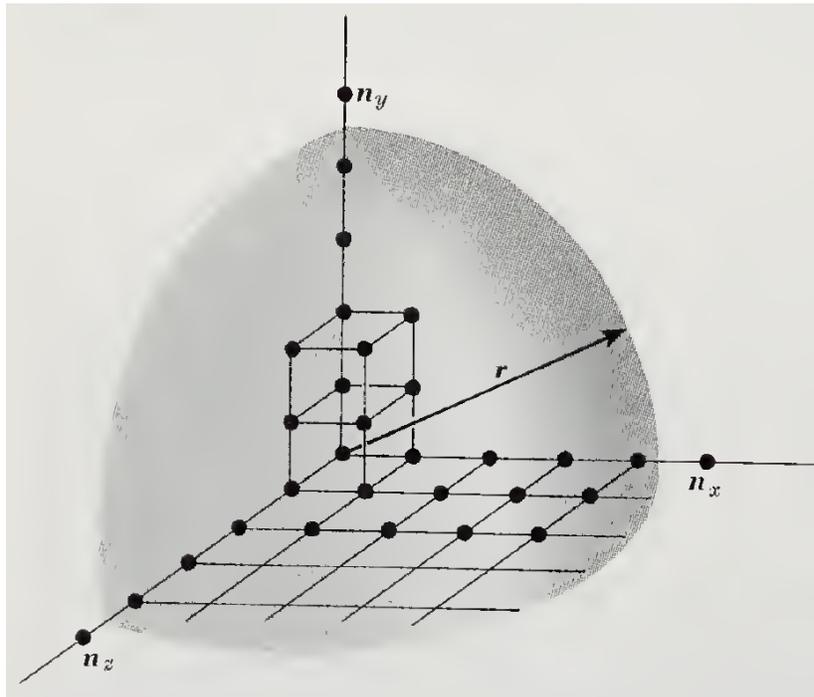


Figura 4.1: Esquema de Rayleigh para el conteo del número de valores permitidos para n_x , n_y y n_z donde $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$ es menor que r^2 .

Dentro del radio R , el número de estados es un octavo del volumen de la esfera dado que se involucran solo valores positivos de n (Fig. 4.1). También debe multiplicarse por 2 para tener en cuenta los dos posibles valores del espín del electrón [84].

Por lo tanto,

$$N = (2) \left(\frac{1}{8} \right) \frac{4}{3} \pi R^3. \quad (4.3.6)$$

Luego, sustituyendo (4.3.5) en la ecuación anterior obtenemos

$$N(E) = \frac{8\pi L^3}{3h^3} \left(\frac{E}{D_\alpha} \right)^{3/\alpha}. \quad (4.3.7)$$

El número de estados por unidad de volumen es

$$n_s = \frac{N}{L^3} = \frac{8\pi}{3h^3} \left(\frac{E}{D_\alpha} \right)^{3/\alpha}. \quad (4.3.8)$$

Así, la densidad de estados para un electrón no relativista viene dada por

$$\rho(E) = \frac{dn_s}{dE} = \frac{8\pi}{2h^3} D_\alpha^{-3/\alpha} E^{3/\alpha-1}. \quad (4.3.9)$$

Capítulo 5

Resultados y discusión

Para entender el resultado de $N(E)$, debemos saber cómo se define k , esto es, haciendo la analogía entre la ecuación estándar y la ecuación fraccionaria, es decir, reescribiendo en la forma de una ecuación de difusión.

$$\begin{aligned} D_\alpha(-\hbar^2\Delta)^{\alpha/2}\phi &= E\phi \\ \Rightarrow (-\Delta)^{\alpha/2}\phi &= \frac{E}{D_\alpha\hbar^\alpha}\phi \end{aligned}$$

De aquí que

$$k^\alpha = \frac{E}{D_\alpha\hbar^\alpha}$$

Los valores que tomará k^α dependerán de las condiciones de frontera aplicadas a las eigenfunciones del operador fraccionario.

Lo anterior no contradice a las soluciones obtenidas por Laskin [46]. De la ecuación (4.2.10) podemos ver que para el caso unidimensional, obtenemos los mismos resultados que Laskin para los niveles de energía, y de la ecuación (4.2.9) obtenemos las mismas funciones de onda que los reportados en la literatura. Con ello se comprueba lo establecido por Musina [78], Servadei [79] y Barrios [85], que para el caso del operador espectral, los eigenvalores y las eigenfunciones de dicho operador se establecen en términos de los eigenvalores y eigenfunciones del Laplaciano convencional.

Estos resultados son correctos en el dominio de solución de la caja. Cabe aclarar que los trabajos presentados por Laskin y otros investigadores no aclaran la forma de obtención de la solución;

esta puede ser obtenida en el caso en que se hace uso del operador Laplaciano fraccional espectral, o en términos de los trabajos de Musina [78], cuando se hace uso de las condiciones de frontera tipo Navier.

En el caso límite cuando $\alpha \rightarrow 2$, las soluciones obtenidas mediante el operador espectral tienden a tomar los mismos valores que las soluciones de la ecuación de Schrödinger reportados en la literatura.

Respecto a la distribución de los estados cuánticos, estos seguirán formando una red regular, sin embargo, estarán dentro del límite de la función definida por R^α , dicha distribución se ve afectada por el valor de α . Para el caso límite, cuando α toma el valor de 2, tenemos que esta distribución queda dentro de la esfera de radio R , sin embargo, en el caso de la aplicación de un operador fraccionario, la forma del volumen contenedor de los valores posibles que puedan tomar los números cuánticos n_i se verá afectada por el valor de α .

La relación (4.3.7) es igual al primer término de la función de conteo de la ley de Weyl para el comportamiento asintótico de eigenvalores del Laplaciano, esto es

$$N(k) = \frac{Vk^3}{3\pi^2}$$

tomando en cuenta que se consideran ambas polarizaciones del electrón.

En [86] se puede encontrar una comparativa numérica entre los eigenvalores de los distintos operadores Laplacianos fraccionales.

Para un electrón sujeto a la influencia de una red atómica, esta sujeción representaría su confinamiento en un potencial, que para nosotros sería en una primera idealización una caja o potencial infinito. Siguiendo el procedimiento de Bloch (Apéndice C) para establecer las bandas permitidas se puede observar que el espesor y la distribución de estas bandas se vería bien diferenciado para los casos del espectro estándar y el espectro fraccionario, esto debido a la presencia del factor fraccionario α . Se debe tener presente que a diferentes sistemas, en este caso, un pozo convencional y uno fractal, no es de esperarse resultados iguales. Por otro lado, el desarrollo de nuevas herramientas es para abordar nuevas situaciones en las que una aproximación fractal pudiera ser más adecuada. Como ejercicio mental, puede pensarse por ejemplo en un ma-

terial compuesto a escalas mesoscópicas con un patrón de componentes no regular sino más bien fractal, será posible entonces imaginar un espectro de confinamiento que no necesariamente sea analizable en términos del teorema de Bloch estándar y tal vez sí posiblemente en términos de estas nuevas herramientas.

Monsoriu *et al.* [87] presentan propiedades de dispersión de partículas cuánticas en secuencias de potenciales periódicos finitos que convergen a un potencial fractal haciendo uso de matrices de transferencia. Obtuvieron y compararon coeficientes de reflexión para ambos potenciales y mostraron que para el caso del potencial fractal el coeficiente de reflexión presenta una estructura auto-similar a la distribución fractal de dicho potencial.

Capítulo 6

Conclusiones

Se procedió a buscar la solución del problema de eigenvalores para la ecuación de Schrödinger fraccionaria en el caso del potencial infinito, esto, con el fin de obtener una función que permita establecer el número de estados cuánticos permitidos para la partícula en cuestión. Se encontró que al cambiar el tipo de condición de frontera aplicado al problema en cuestión, cambian las propiedades del operador fraccionario empleado, convirtiéndolo en un operador espectral. Esto llevó a que el problema pudiese ser resuelto de una forma más sencilla, puesto que se ocuparon los eigenvalores y eigenfunciones del operador Laplaciano de Dirichlet (esto es, el operador Laplaciano estándar con condiciones de frontera de Dirichlet cero). Con el caso unidimensional resuelto, se procedió a obtener la solución para el caso tridimensional, donde los niveles de energía permitidos se pueden representar como potencia del espectro del Laplaciano convencional, puesto que la relación mostrada en (4.2.10) puede ser expresada como potencia fraccional de las energías permitidas para la partícula en el caso estándar.

Una vez obtenidas las soluciones del problema, se procedió al cálculo de la densidad de estados para nuestro problema. Se obtuvo que el número de estados permitidos dependerá del factor α , donde α viene representado por dos veces el valor de la potencia del Laplaciano convencional, además, representa el orden de derivación utilizada en el problema. El valor que se obtiene de N es igual al primer término de la ley de Weyl para el comportamiento asintótico de eigenvalores del operador Laplaciano.

Ya obtenidos los resultados para el caso del pozo de potencial tridimensional, se procedió a com-

probar que estos eran similares a los reportados en la literatura. Esto es, que efectivamente los eigenvalores fueran una potencia del espectro del caso estándar y que las eigenfunciones fueran las mismas.

Aunque el procedimiento mostrado en el apéndice B, siguiendo el mismo método que con el caso estándar, arroja los mismos resultados que los de la literatura, por la propia forma de definición de la solución nos lleva a que la ecuación de eigenvalores no se satisfaga.

Bibliografía

- [1] M. Dalir & M. Bashour, Applications of fractional calculus, *Applied Mathematical Sciences*, 4(21):1021–1032, 2010.
- [2] S. Wang, M. Xu & X. Li, Green’s function of time fractional diffusion equation and its applications in fractional quantum mechanics, *Nonlinear Analysis: Real World Applications*, 10(2):1081–1086, 2009.
- [3] G. Zaslavsky, Chaos, fractional kinetics, and anomalous transport, *Physics Reports*, 371(6):461–580, 2002.
- [4] D. Hernández, Difusión anómala: fundamentos y aplicaciones, *Miscelánea Matemática*, 2014(58):37–51, 2014.
- [5] R. Feynman & A. Hibbs, *Quantum mechanics and path integrals*, Dover Publications, 1^a ed., 1965.
- [6] B. Mandelbrot, *The fractal geometry of nature*, W.H. Freeman and Company, 1982.
- [7] N. Laskin, Fractional quantum mechanics and Lévy path integrals, *Physics Letters A*, 268(4-6):298–305, 2000.
- [8] N. Laskin, Fractional quantum mechanics, *Physical Review E*, 62(3):3135–3145, 2000.
- [9] N. Laskin, Fractals and quantum mechanics, *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 10(4):780–790, 2000.
- [10] N. Laskin, Fractional Schrödinger equation, *Physical Review E*, 66(5):056108, 2002.

- [11] W. Arendt, R. Nittka, W. Peter & F. Steiner, Weyl's law: spectral properties of the Laplacian in mathematics and physics, en W. Arendt & W. Schleich, eds., *Mathematical Analysis of Evolution, Information, and Complexity*, cap. 1, págs. 1–71, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2009.
- [12] L. Nottale, *Scale relativity and fractal space-time: a new approach to unifying relativity and quantum mechanics*, Imperial College Press, 2011.
- [13] L. Nottale, *Fractal space-time and microphysics: towards a theory of scale relativity*, World Scientific, 1993.
- [14] S. Samko, A. Kilbas & O. Marichev, *Fractional integrals and derivatives: theory and applications*, Gordon and Breach Science Publishers, 1^a ed., 1993.
- [15] A. Kilbas, H. Srivastava & J. Trujillo, *Theory and applications of fractional differential equations*, n^o 204 en North-Holland Mathematics Studies, Elsevier, 1^a ed., 2006.
- [16] I. Guce, On fractional derivatives: the non-integer order of the derivative, *International Journal of Scientific and Engineering Research*, 4(3):1, 2013.
- [17] I. Podlubny, *Fractional differential equations: an introduction to fractional derivatives, fractional differential equations, to methods of their solution and some of their applications*, tomo 198 de *Mathematics in Science and Engineering*, Academic Press, 1^a ed., 1999.
- [18] V. Tarasov, Local fractional derivatives of differentiable functions are integer-order derivatives or zero, *International Journal of Applied and Computational Mathematics*, 2(2):195–201, 2015.
- [19] R. Herrmann, *Fractional calculus: an introduction for physicists*, World Scientific, 2^a ed., 2014.
- [20] C. Pozrikidis, *The fractional Laplacian*, CRC Press, 2016.
- [21] V. Tarasov, *Fractional dynamics: applications of fractional calculus to dynamics of particles, fields and media*, Nonlinear Physical Science, Springer Science & Business Media, 2011.

- [22] W. Chen, Time-space fabric underlying anomalous diffusion, *Chaos, Solitons & Fractals*, 28(4):923–929, 2006.
- [23] M. Matlob & Y. Jamali, The concepts and applications of fractional order differential calculus in modeling of viscoelastic systems: A primer, *Critical Reviews in Biomedical Engineering*, 47(4):249–276, 2019.
- [24] K. Falconer, *Fractal geometry: mathematical foundations and applications*, Wiley, 3^a ed., 2014.
- [25] M. Spiegel, *Theory and problems of real variables: Lebesgue measure and integration with application to Fourier series*, McGraw-Hill, 1969.
- [26] J. Munkres, *Topology*, Pearson Education, 2000.
- [27] R. Strichartz, *Differential equations on fractals*, Princeton University Press, 2006.
- [28] J. Kigami, *Analysis on fractals*, 143, Cambridge University Press, 2001.
- [29] K. Svozil, Quantum field theory on fractal spacetime: a new regularisation method, *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 20(12):3861–3875, 1987.
- [30] F. Ren, J. Liang, X. Wang & W. Qiu, Integrals and derivatives on net fractals, *Chaos, Solitons & Fractals*, 16(1):107–117, 2003.
- [31] R. Feynman, R. Leighton & M. Sands, *The Feynman lectures on physics*, tomo 1 Mainly mechanics, radiation and heat, Addison-Wesley Publishing Company, 1965.
- [32] C. Gardiner, *Handbook of stochastic methods for physics, chemistry, and the natural sciences*, tomo 13 de *Springer Series in Synergetics*, Springer-Verlag, 3^a ed., 2004.
- [33] R. Metzler & J. Klafter, The restaurant at the end of the random walk: recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics, *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 37(31):R161–R208, 2004.
- [34] A. Polyanin & A. Manzhirov, *Handbook of integral equations*, CRC Press, 2^a ed., 2008.

- [35] L. Tarasov, *Basic concepts of quantum mechanics*, Mir Publishers, 1980.
- [36] R. Feynman, R. Leighton & M. Sands, *The Feynman lectures on physics*, tomo 3 Quantum mechanics, Addison-Wesley Publishing Company, 1965.
- [37] V. Fock, On the interpretation of quantum mechanics, *Czechoslovak Journal of Physics*, 7(6):643–656, 1957.
- [38] P. Dirac, *The principles of quantum mechanics*, Oxford University Press, 1981.
- [39] I. Savelyev, *Fundamentals of theoretical physics*, tomo 2 Quantum mechanics, Mir Publishers, 1982.
- [40] I. Savelyev, *Physics: a general course*, tomo 3 Quantum optics, atomic physics, solid state physics, physics of the atomic nucleus and elementary particles, Mir Publishers, 1989.
- [41] R. Shankar, *Principles of quantum mechanics*, Plenum Press, 2^a ed., 1994.
- [42] E. de Oliveira & J. Vaz Jr, Tunneling in fractional quantum mechanics, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 44(18):185303, 2011.
- [43] P. Lévy, *Théorie de l'addition des variables aléatoires*, Gauthier-Villars, 1937.
- [44] A. Mathai & R. Saxena, *The H-function with applications in statistics and other disciplines*, Wiley Eastern, 1978.
- [45] A. Mathai, R. Saxena & H. Haubold, *The H-Function: theory and applications*, Springer-Verlag, 1^a ed., 2010.
- [46] N. Laskin, Principles of fractional quantum mechanics, en J. Klafter, S. Lim & R. Metzler, eds., *Fractional dynamics: recent advances*, cap. 17, World Scientific, 2012.
- [47] X. Guo & M. Xu, Some physical applications of fractional Schrödinger equation, *Journal of Mathematical Physics*, 47(8):082104, 2006.
- [48] L. Debnath, Fractional integral and fractional differential equations in fluid mechanics, *Fractional Calculus and Applied Analysis*, 6, 2003.

- [49] M. Naber, Time fractional Schrödinger equation, *Journal of Mathematical Physics*, 45(8):3339–3352, 2004.
- [50] M. Bhatti & L. Debnath, On fractional Schrödinger and Dirac equations, *International Journal of Pure and Applied Mathematics*, 15:1–12, 2004.
- [51] S. Wang & M. Xu, Generalized fractional Schrödinger equation with space-time fractional derivatives, *Journal of Mathematical Physics*, 48(4):043502, 2007.
- [52] M. Bhatti, Fractional Schrödinger wave equation and fractional uncertainty principle, *International Journal of Contemporary Mathematical Sciences*, 2(19):943–950, 2007.
- [53] J. Dong & M. Xu, Some solutions to the space fractional Schrödinger equation using momentum representation method, *Journal of Mathematical Physics*, 48(7):072105, 2007.
- [54] J. Dong & M. Xu, Space-time fractional Schrödinger equation with time-independent potentials, *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 344(2):1005–1017, 2008.
- [55] J. Dong & M. Xu, Applications of continuity and discontinuity of a fractional derivative of the wave functions to fractional quantum mechanics, *Journal of Mathematical Physics*, 49(5):052105, 2008.
- [56] R. Eid, S. Muslih, D. Baleanu & E. Rabei, On fractional Schrödinger equation in α -dimensional fractional space, *Nonlinear Analysis: Real World Applications*, 10(3):1299–1304, 2009.
- [57] E. de Oliveira, F. Costa & J. Vaz Jr, The fractional Schrödinger equation for delta potentials, *Journal of Mathematical Physics*, 51(12):123517, 2010.
- [58] S. Muslih, O. Agrawal & D. Baleanu, A fractional Schrödinger equation and its solution, *International Journal of Theoretical Physics*, 49(8):1746–1752, 2010.
- [59] R. K. Saxena, R. Saxena & S. Kalla, Computational solution of a fractional generalization of the Schrödinger equation occurring in quantum mechanics, *Applied Mathematics and Computation*, 216(5):1412–1417, 2010.

- [60] R. K. Saxena, R. Saxena & S. Kalla, Solution of space-time fractional Schrödinger equation occurring in quantum mechanics, *Fractional Calculus and Applied Analysis*, 13(2):177–190, 2010.
- [61] J. Dong, Applications of density matrix in the fractional quantum mechanics: Thomas-Fermi model and Hohenberg-Kohn theorems revisited, *Physics Letters A*, 375(30-31):2787–2792, 2011.
- [62] M. Jeng, S. Xu, E. Hawkins & J. Schwarz, On the nonlocality of the fractional Schrödinger equation, *Journal of Mathematical Physics*, 51(6):062102, 2010.
- [63] S. Bayin, On the consistency of the solutions of the space fractional Schrödinger equation, *Journal of Mathematical Physics*, 53(4):042105, 2012.
- [64] S. Bayin, Comment on “On the consistency of the solutions of the space fractional Schrödinger equation” [J. Math. Phys. 53, 042105 (2012)], *Journal of Mathematical Physics*, 53(8):084101, 2012.
- [65] E. Hawkins & J. Schwarz, Comment on “On the consistency of solutions of the space fractional Schrödinger equation” [J. Math. Phys. 53, 042105 (2012)], *Journal of Mathematical Physics*, 54(1):014101, 2013.
- [66] S. Bayin, Comment on “On the consistency of the solutions of the space fractional Schrödinger equation” [J. Math. Phys. 53, 042105 (2012)], *Journal of Mathematical Physics*, 54(7):074101, 2013.
- [67] S. Bayin, Consistency problem of the solutions of the space fractional Schrödinger equation, *Journal of Mathematical Physics*, 54(9):092101, 2013.
- [68] Y. Luchko, Fractional Schrödinger equation for a particle moving in a potential well, *Journal of Mathematical Physics*, 54(1):012111, 2013.
- [69] Y. Zhao, D. Cheng & X. Yang, Approximation solutions for local fractional Schrödinger equation in the one-dimensional Cantorian System, *Advances in Mathematical Physics*, 2013:1–5, 2013.

- [70] B. Achar, B. Yale & J. Hanneken, Time fractional Schrödinger equation revised, *Advances in Mathematical Physics*, 2013(1):290216, 2013.
- [71] A. Mahata, On Fractional Schrödinger equation and its application, *International Journal of Scientific and Engineering Research*, 4(2):1–5, 2013.
- [72] Y. Wei, Comment on “Fractional quantum mechanics” and “Fractional Schrödinger equation”, *Physical Review E*, 93(6):066103, 2016.
- [73] N. Laskin, Reply to “Comment on ”Fractional quantum mechanics” and “Fractional Schrödinger equation”, *Physical Review E*, 93(6):066104, 2016.
- [74] A. Zoia, A. Rosso & M. Kardar, Fractional Laplacian in bounded domains, *Physical Review E*, 76(2):021116, 2007.
- [75] M. Kwaśnicki, Eigenvalues of the fractional Laplace operator in the interval, *Journal of Functional Analysis*, 262(5):2379–2402, 2012.
- [76] A. Guerrero & M. Moreles, On the numerical solution of the eigenvalue problem in fractional quantum mechanics, *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 20(2):604–613, 2015.
- [77] S. Duo & Y. Zhang, Computing the ground and first excited states of the fractional Schrödinger equation in an infinite potential well, *Communications in Computational Physics*, 18(2):321–350, 2015.
- [78] R. Musina & A. Nazarov, On fractional Laplacians, *Communications in Partial Differential Equations*, 39(9):1780–1790, 2014.
- [79] R. Servadei & E. Valdinoci, On the spectrum of two different fractional operators, *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh Section A: Mathematics*, 144(4):831–855, 2014.
- [80] N. Laskin, Lévy flights over quantum paths, *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 12(1):2–18, 2007.

- [81] J. Dong, Lévy path integral approach to the solution of the fractional Schrödinger equation with infinite square well, 2013, arXiv preprint arXiv:1301.3009.
- [82] Y. Wei, The infinite square well problem in the standard, fractional, and relativistic quantum mechanics, *International Journal of Theoretical and Mathematical Physics*, 5(4):58–65, 2015.
- [83] J. Rohlf, *Modern physics to α to Z^0* , John Wiley & sons, 1994.
- [84] F. Richtmyer, E. Kennard & J. Cooper, *Introduction to modern physics*, McGraw-Hill, 6^a ed., 1969.
- [85] B. Barrios, E. Colorado, A. de Pablo & U. Sánchez, On some critical problems for the fractional Laplacian operator, *Journal of Differential Equations*, 252(11):6133–6162, 2012.
- [86] S. Duo, H. Wang & Y. Zhang, A comparative study on nonlocal diffusion operators related to the fractional Laplacian, 2017, arXiv preprint arXiv:1711.06916.
- [87] J. Monsoriu, F. Villatorio, M. Marín, J. Urchueguía & P. de Córdoba, A transfer matrix method for the analysis of fractal quantum potentials, *European Journal of Physics*, 26(4):603–611, 2005.
- [88] A. Saichev & G. Zaslavsky, Fractional kinetic equations: solutions and applications, *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 7(4):753–764, 1997.
- [89] J. Monsoriu, F. Villatorio & M. Marín, *Fundamentos de física cuántica para ingeniería*, cap. 4, págs. 325–339, Limusa, 2007.

Apéndice A

Pozo de potencial y partícula libre

A.1. Ecuación de Schrödinger

Partiendo de la forma general de la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}, \quad (\text{A.1.1})$$

se propone una solución de la forma

$$\psi(x, y, z, t) = \varphi(x, y, z)f(t). \quad (\text{A.1.2})$$

Sustituyendo en la ecuación (A.1.1)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}f\nabla^2\varphi + Vf\varphi = i\hbar\varphi\frac{df}{dt} \quad (\text{A.1.3})$$

Dividiendo esta última por φf

$$\frac{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi + V\varphi}{\varphi} = \frac{i\hbar}{f}\frac{df}{dt} \quad (\text{A.1.4})$$

Luego

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi + V\varphi = E\varphi \quad (\text{A.1.5})$$

donde

$$E = \frac{i\hbar}{f}\frac{df}{dt}. \quad (\text{A.1.6})$$

Para obtener la forma de f , se puede reescribir la ecuación anterior en la forma

$$\frac{df}{f} = -i\frac{E}{\hbar}dt,$$

resultando en

$$f = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}. \quad (\text{A.1.7})$$

Así, la forma de la función de onda queda como

$$\psi(x, y, z, t) = \varphi(x, y, z)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad (\text{A.1.8})$$

A.2. Pozo de potencial unidimensional

Para el caso del pozo de un potencial unidimensional

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < -L/2 \\ 0, & -L/2 \leq x \leq L/2 \\ \infty, & x > L/2 \end{cases} \quad (\text{A.2.1})$$

la ecuación de eigenvalor está dado por

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0. \quad (\text{A.2.2})$$

Dividiendo el espacio en regiones I , II y III , las soluciones son ψ_I , ψ_{II} y ψ_{III} respectivamente.

En las regiones I y III , se satisface la ecuación (A.2.2) solo si $\psi = 0$. Así entonces, en la región II , las soluciones permitidas son de la forma

$$\psi_{II} = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (\text{A.2.3})$$

con

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (\text{A.2.4})$$

Se necesita que la función de onda sea continua. Por ello

$$\psi_I(-L/2) = \psi_{II}(-L/2) = 0$$

$$\psi_{II}(L/2) = \psi_{III}(L/2) = 0.$$

Así, la ecuación (A.2.3) toma la forma

$$Ae^{-ikL/2} + Be^{ikL/2} = 0 \quad (\text{A.2.5})$$

$$Ae^{ikL/2} + Be^{-ikL/2} = 0, \quad (\text{A.2.6})$$

o en forma matricial

$$\begin{pmatrix} e^{-ikL/2} & e^{ikL/2} \\ e^{ikL/2} & e^{-ikL/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.2.7})$$

que tiene soluciones solo si el determinante es cero

$$e^{-ikL} - e^{ikL} = -2i \operatorname{sen}(kL) = 0 \quad (\text{A.2.8})$$

esto es,

$$k_n = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (\text{A.2.9})$$

Así, de (A.2.5)

$$Ae^{-i\frac{n\pi}{2}} + Be^{i\frac{n\pi}{2}} = 0,$$

multiplicando por $e^{i\frac{n\pi}{2}}$, se obtiene

$$A = -Be^{in\pi}.$$

Dado que $e^{in\pi} = (-1)^n$, la ecuación (A.2.3) genera dos familias de soluciones

$$\psi_n(x) = \begin{cases} B \left(e^{-i\frac{n\pi}{L}x} - e^{i\frac{n\pi}{L}x} \right), & n \text{ par,} \\ B \left(e^{-i\frac{n\pi}{L}x} + e^{i\frac{n\pi}{L}x} \right), & n \text{ impar} \end{cases} \quad (\text{A.2.10})$$

ó

$$\psi_n(x) = \begin{cases} B \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L}x \right), & n \text{ par,} \\ B \cos \left(\frac{n\pi}{L}x \right), & n \text{ impar.} \end{cases} \quad (\text{A.2.11})$$

Por el principio de superposición puede establecerse que

$$\psi(x) = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \quad (\text{A.2.12})$$

donde $c_1 = i^{-n} + i^n$ y $c_2 = i^{-n} - i^n$. Entonces

$$\psi_n(x) = C \left(i^{-n} e^{-i\frac{n\pi}{L}x} - i^n e^{i\frac{n\pi}{L}x} \right), \quad (\text{A.2.13})$$

con lo cual la solución toma la forma

$$\psi_n(x) = C \left(e^{-i\frac{n\pi}{L}(x+\frac{L}{2})} - e^{i\frac{n\pi}{L}(x+\frac{L}{2})} \right) = C \operatorname{sen} \frac{n\pi}{L} \left(x + \frac{L}{2} \right). \quad (\text{A.2.14})$$

Para los valores de energía tenemos de las ecuaciones (A.2.4) y (A.2.9)

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar\pi}{L} \right)^2 n^2 \quad (\text{A.2.15})$$

A.3. Partícula libre unidimensional

Partiendo de la ecuación (A.2.2) y asumiendo que $V = 0$, se obtiene la ecuación de Schrödinger para la partícula libre

$$\nabla^2 \psi + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0. \quad (\text{A.3.1})$$

Llevándolo a la forma

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0, \quad (\text{A.3.2})$$

las soluciones son

$$\psi = e^{\pm i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (\text{A.3.3})$$

donde

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{p^2}{\hbar^2}. \quad (\text{A.3.4})$$

Sustituyendo el valor de k en la ecuación (A.3.3) e introduciendo la expresión (A.3.4), se obtiene la función de onda ψ para la partícula libre

$$\psi(r, t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (Et \mp \vec{p} \cdot \vec{r}) \right\}. \quad (\text{A.3.5})$$

Apéndice B

Pozo de potencial para la ecuación de Schrödinger fraccionaria

El procedimiento mostrado a continuación permite obtener los eigenvalores y eigenfunciones del operador Laplaciano fraccional para el caso del pozo de potencial. Aunque los resultados obtenidos son los mostrados en la literatura, el mismo procedimiento no es del todo correcto, puesto que desde un principio se presenta la solución en términos de la solución del problema de eigenvalores para el caso del Laplaciano estándar.

B.1. Pozo de potencial unidimensional

Para una partícula moviéndose en un pozo de potencial unidimensional

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & |x| > a \\ 0, & |x| \leq a, \end{cases} \quad (\text{B.1.1})$$

se consideran las condiciones de frontera

$$\phi(-a) = \phi(a) = 0. \quad (\text{B.1.2})$$

Partiendo de la ecuación de Schrödinger fraccionaria independiente del tiempo (2.5.24)

$$D_\alpha(-\hbar^2\Delta)^{\alpha/2}\phi(x) = E\phi(x),$$

se lleva a la forma

$$(-\Delta_\Omega)_N^{\alpha/2} \phi(x) = \frac{E}{D_\alpha \hbar^\alpha} \phi(x). \quad (\text{B.1.3})$$

Haciendo uso de la definición de Liouville [24] para la derivada de orden fraccional α de la función exponencial e^{kx}

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} e^{kx} = k^\alpha e^{kx},$$

y tomando en cuenta la relación [88]

$$-(-\Delta)^{\alpha/2} : \frac{d^\alpha}{d|x_i|^\alpha},$$

así, de la ecuación (B.1.3) expresamos

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} \phi(x) + k^\alpha \phi(x) = 0, \quad (\text{B.1.4})$$

donde

$$k^\alpha = \frac{E_N}{\hbar^\alpha D_\alpha}. \quad (\text{B.1.5})$$

Establecemos la solución de (B.1.4) de la forma

$$\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (\text{B.1.6})$$

Al evaluar las condiciones de frontera (B.1.2), obtenemos

$$\phi(-a) = Ae^{-ika} + Be^{ika} = 0 \quad (\text{B.1.7})$$

$$\phi(a) = Ae^{ika} + Be^{-ika} = 0, \quad (\text{B.1.8})$$

que escrito en forma matricial

$$\begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{ika} \\ e^{ika} & e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.1.9})$$

sus soluciones se obtienen cuando

$$e^{-2ika} - e^{2ika} = -2i \operatorname{sen}(2ka) = 0, \quad (\text{B.1.10})$$

es decir, cuando

$$k = \frac{n\pi}{2a}. \quad (\text{B.1.11})$$

Así, las soluciones de (B.1.4) toman la forma

$$\phi(x) = \begin{cases} A \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{2a} x \right), & n \text{ par} \\ B \cos \left(\frac{n\pi}{2a} x \right), & n \text{ impar} \end{cases} \quad (\text{B.1.12})$$

La combinación de ambas soluciones puede escribirse de la forma

$$\phi_n(x) = \begin{cases} C \operatorname{sen} \frac{n\pi}{2a}(x+a), & |x| \leq a \\ 0, & |x| > a. \end{cases} \quad (\text{B.1.13})$$

Para obtener el valor de C_0 , se procede a normalizar la función $\phi(x)$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x)\phi^*(x)dx &= 1 \\ C^2 \int_{-a}^a \operatorname{sen}^2 \frac{n\pi}{2a}(x+a)dx &= 1 \\ \frac{C^2}{2} \int_{-a}^a \left[1 - \cos \frac{n\pi}{a}(x+a) \right] dx &= 1 \\ \frac{C^2}{2}(2a) &= 1 \\ C &= \left(\frac{1}{a} \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (\text{B.1.14})$$

Así

$$\phi_n(x) = \begin{cases} \left(\frac{1}{a} \right)^{1/2} \operatorname{sen} \frac{n\pi}{2a}(x+a), & |x| \leq a \\ 0, & |x| > a. \end{cases} \quad (\text{B.1.15})$$

Luego

$$k^\alpha = \frac{E}{D_\alpha \hbar^\alpha} = \left(\frac{n\pi}{2a} \right)^\alpha, \quad (\text{B.1.16})$$

entonces

$$E_n = D_\alpha \left(\frac{\hbar\pi}{2a} \right)^\alpha n^\alpha. \quad (\text{B.1.17})$$

B.2. Pozo de potencial tridimensional

Para el caso del pozo de potencial tridimensional

$$V(x, y, z) = \begin{cases} \infty, & |x| < a, |y| < b, |z| < c \\ 0, & \text{Cualquier otro caso} \end{cases} \quad (\text{B.2.1})$$

con las condiciones de frontera tipo Navier

$$\phi|_{\partial\Omega} = 0 \quad (\text{B.2.2})$$

Partiendo de la ecuación de Schrödinger fraccionaria (2.5.24) donde $V = 0$,

$$D_\alpha(-\hbar^2 \Delta)^{\alpha/2} \phi(\vec{r}) = E \phi(\vec{r}) \quad (\text{B.2.3})$$

se obtiene

$$\frac{d^\alpha}{dx_i^\alpha} \phi(x, y, z) + k^\alpha \phi(x, y, z) = 0, \quad (\text{B.2.4})$$

donde

$$k^\alpha = \frac{E_N}{\hbar^\alpha D_\alpha}. \quad (\text{B.2.5})$$

Como

$$\phi(x, y, z) = \phi_x(x) \phi_y(y) \phi_z(z), \quad (\text{B.2.6})$$

las soluciones se escriben de la forma

$$\phi_x(x) = A_x e^{ik_x x} + B_x e^{-ik_x x} = A_x \text{sen}(k_x x) + B_x \text{sen}(k_x x) \quad (\text{B.2.7})$$

$$\phi_y(y) = A_y e^{ik_y y} + B_y e^{-ik_y y} = A_y \text{sen}(k_y y) + B_y \text{sen}(k_y y) \quad (\text{B.2.8})$$

$$\phi_z(z) = A_z e^{ik_z z} + B_z e^{-ik_z z} = A_z \text{sen}(k_z z) + B_z \text{sen}(k_z z). \quad (\text{B.2.9})$$

Aplicando las condiciones de frontera (B.2.2)

$$\phi_j(-a_j) = A_j e^{-ik_j a_j} + B_j e^{ik_j a_j} = 0 \quad (\text{B.2.10})$$

$$\phi_j(a_j) = A_j e^{ik_j a_j} + B_j e^{-ik_j a_j} = 0. \quad (\text{B.2.11})$$

con

$$j = x, y, z$$

$$a_j = a, b, c.$$

Reescribiendo en forma matricial resulta

$$\begin{pmatrix} e^{-ik_j a_j} & e^{ik_j a_j} \\ e^{ik_j a_j} & e^{-ik_j a_j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.2.12})$$

cuyo determinante es cero cuando

$$\begin{aligned} e^{-2ik_j a_j} - e^{2ik_j a_j} &= -2i \operatorname{sen}(2k_j a_j) = 0 \\ k_j &= \frac{n_j \pi}{2a_j}. \end{aligned} \quad (\text{B.2.13})$$

Así, las soluciones son de la forma

$$\phi_j(x_j) = \begin{cases} A_j \operatorname{sen}\left(\frac{n_j \pi}{2a_j} x_j\right), & n_j \text{ par} \\ B_j \operatorname{cos}\left(\frac{n_j \pi}{2a_j} x_j\right), & n_j \text{ impar.} \end{cases} \quad (\text{B.2.14})$$

La combinación resulta

$$\phi_j(x_j) = \begin{cases} C_j \operatorname{sen} \frac{n_j \pi}{2a_j} (x_j + a_j), & |x_j| \leq a_j \\ 0, & |x_j| > a_j. \end{cases} \quad (\text{B.2.15})$$

Luego,

$$\begin{aligned} \phi(\vec{r}) = \phi(x, y, z) &= \prod_j C_j \operatorname{sen} \frac{n_j \pi}{2a_j} (x_j + a_j) \\ &= C' \operatorname{sen} \frac{n_x \pi}{2a} (x + a) \operatorname{sen} \frac{n_y \pi}{2b} (y + b) \operatorname{sen} \frac{n_z \pi}{2c} (z + c), \end{aligned} \quad (\text{B.2.16})$$

con

$$C' = C_x C_y C_z.$$

Normalizando la función, obtenemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x, y, z) \phi^*(x, y, z) dx dy dz = 1 \quad (\text{B.2.17})$$

donde

$$\begin{aligned} I_j &= \int_{-a_j}^{a_j} \operatorname{sen}^2 \frac{n_j \pi}{2a_j} (x_j + a_j) dx_j \\ &= \frac{1}{2} \int_{-a_j}^{a_j} \left[1 - \operatorname{cos} \frac{n_j \pi}{a_j} (x_j + a_j) \right] dx_j \\ &= \frac{1}{2} \left[x_j \Big|_{-a_j}^{a_j} \right] = a_j. \end{aligned} \quad (\text{B.2.18})$$

Así entonces

$$\begin{aligned} C'^2 \prod_j I_j &= C'^2 abc = 1 \\ \Rightarrow C' &= \left(\frac{1}{abc} \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (\text{B.2.19})$$

Con ello, la ecuación (B.2.16) queda como

$$\phi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \left(\frac{1}{abc} \right)^{1/2} \text{sen} \frac{n_x \pi}{2a} (x + a) \text{sen} \frac{n_y \pi}{2b} (y + b) \text{sen} \frac{n_z \pi}{2c} (z + c). \quad (\text{B.2.20})$$

Conociendo que

$$\begin{aligned} k^2 &= \sum_j k_j^2 \\ &= \sum_j \left(\frac{n_j \pi}{2a_j} \right)^2 \\ &= \frac{\pi^2}{4} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.2.21})$$

$$\Rightarrow k = \frac{\pi}{2} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right)^{1/2}. \quad (\text{B.2.22})$$

Sustituyendo (B.2.22) en (B.2.5)

$$\begin{aligned} k^\alpha &= \left(\frac{\pi}{2} \right)^\alpha \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right)^{\alpha/2} \\ &= \frac{E}{D_\alpha \hbar^\alpha}, \end{aligned} \quad (\text{B.2.23})$$

así,

$$E_{n_x n_y n_z} = D_\alpha \left(\frac{\hbar \pi}{2} \right)^\alpha \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right)^{\alpha/2} \quad (\text{B.2.24})$$

Cuando $a = b = c = \frac{L}{2}$

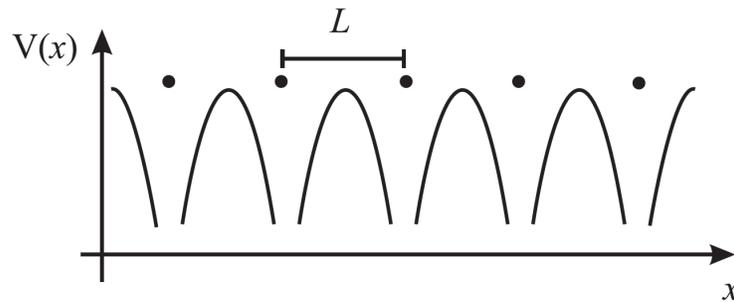
$$\phi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \left(\frac{8}{L^3} \right)^{1/2} \text{sen} \frac{n_x \pi}{L} \left(x + \frac{L}{2} \right) \text{sen} \frac{n_y \pi}{L} \left(y + \frac{L}{2} \right) \text{sen} \frac{n_z \pi}{L} \left(z + \frac{L}{2} \right) \quad (\text{B.2.25})$$

y

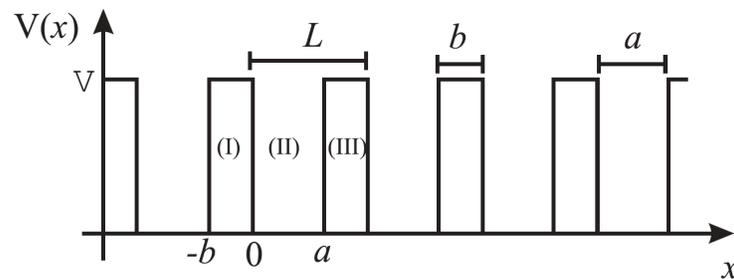
$$E_{n_x n_y n_z} = D_\alpha \left(\frac{\hbar \pi}{L} \right)^\alpha \left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \right)^{\alpha/2}. \quad (\text{B.2.26})$$

Apéndice C

Modelo de Kroning-Penney



(a) *Potencial en una red cristalina*



(b) *Modelo de Kroning-Penney*

Figura C.1: *Comparación entre el potencial real en un sólido y el modelo de Kroning-Penney.*

El modelo de Kroning-Penney describe los estados de energía de un electrón en un cristal suponiendo que la estructura cristalina consiste en un potencial periódico formado por barreras rectangulares.

Al resolver la ecuación de Schrödinger fraccionaria en las regiones indicadas en la figura (C.1) se obtiene

$$\psi_I(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \quad (\text{C.0.1})$$

$$\psi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} \quad (\text{C.0.2})$$

con

$$k_1 = \left(\frac{E - V}{D_\alpha \hbar^\alpha} \right)^{1/\alpha} \quad \text{y} \quad k_2 = \left(\frac{E}{D_\alpha \hbar^\alpha} \right)^{1/\alpha}. \quad (\text{C.0.3})$$

Aplicando las condiciones impuestas por el Teorema de Bloch se puede obtener la solución en la región (III),

$$\psi_{III}(x) = \psi_I(x - L) e^{ikL} = (A_1 e^{ik_1(x-L)} + B_1 e^{-ik_1(x-L)}) e^{ikL}. \quad (\text{C.0.4})$$

Imponiendo las condiciones de continuidad de la función de onda y su derivada en $x = 0$ resulta

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$$

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \quad (\text{C.0.5})$$

$$\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0)$$

$$k_1 A_1 - k_1 B_1 = k_2 A_2 - k_2 B_2. \quad (\text{C.0.6})$$

De forma análoga para $x = a$ se obtiene

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a)$$

$$A_2 e^{ik_1 a} + B_2 e^{-ik_2 a} = (A_1 e^{-ik_1 b} + B_1 e^{ik_1 b}), \quad (\text{C.0.7})$$

$$\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a)$$

$$k_2 A_2 e^{ik_2 a} - k_2 B_2 e^{-ik_2 a} = (k_1 A_1 e^{-ik_1 b} - k_1 B_1 e^{ik_1 b}) e^{ikL}. \quad (\text{C.0.8})$$

Reescribiendo en forma matricial se obtiene

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 \\ k_1 & -k_2 & -k_1 & k_2 \\ e^{-ik_1 b} e^{ikL} & -e^{ik_2 a} & e^{ik_1 b} e^{ikL} & -e^{-ik_2 a} \\ k_1 e^{-ik_1 b} e^{ikL} & -k_2 e^{ik_2 a} & -k_1 e^{ik_1 b} e^{ikL} & k_2 e^{-ik_2 a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.0.9})$$

cuando la determinante de la matriz es cero, se obtiene

$$\begin{aligned} & \left(e^{ik_1b-ik_2a} + e^{ik_2a-ik_1b} \right) \left(-k_1^2 - k_2^2 + 2k_1k_2 \right) + \\ & + \left(e^{ik_1b+ik_2a} + e^{-ik_1b-ik_2a} \right) \left(k_1^2 + k_2^2 + 2k_1k_2 \right) = 4k_1k_2 \left(e^{ikL} + e^{-ikL} \right) \end{aligned}$$

así,

$$\begin{aligned} & -\frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1k_2} \left[e^{ik_1b} e^{-ik_2a} + e^{ik_2a} e^{-ik_1b} - e^{ik_1b} e^{ik_2a} - e^{-ik_1b} e^{-ik_2a} \right] + \\ & + \left(e^{ik_1b} e^{-ik_2a} + e^{ik_2a} e^{-ik_1b} + e^{ik_1b} e^{ik_2a} + e^{-ik_1b} e^{-ik_2a} \right) = 2 \left(e^{ikL} + e^{-ikL} \right) \end{aligned}$$

Simplificando, obtenemos

$$-\frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1k_2} \sin(k_1b) \sin(k_2a) + \cos(k_1b) \cos(k_2a) = \cos(kL) \quad (\text{C.0.10})$$

dicha función puede expresarse como función de la energía como

$$f(E) = \cos(kL). \quad (\text{C.0.11})$$

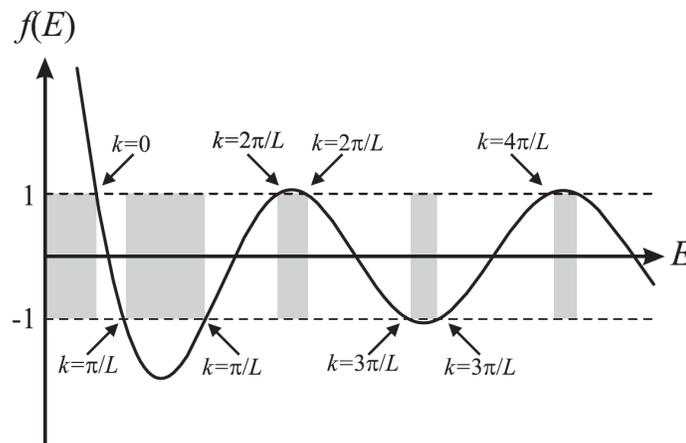


Figura C.2: Esquema de los valores permitidos y los valores prohibidos de energía

Cuando $\alpha = 2$, la función $f(E)$ permanece dentro del intervalo $[-1, 1]$ solamente para ciertos valores de energía denominadas energías permitidas como se muestra en la figura (C.2). Los valores restringidos se conocen como bandas de energía prohibidas. La figura (C.3) muestra

en línea continua la relación de dispersión de la energía en función del momento de la onda de Bloch asociada y la correspondiente para el electrón libre en línea discontinua [89].

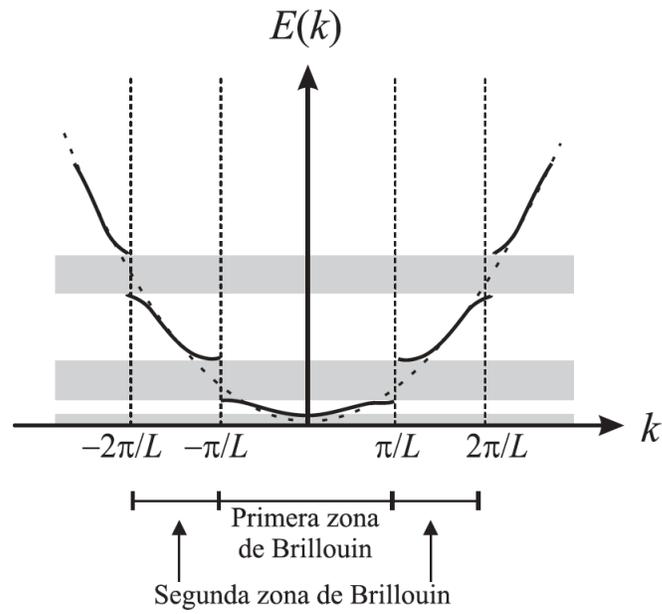


Figura C.3: *Relación de dispersión de una onda de Bloch*