



Instituto Politécnico Nacional

Unidad Profesional Interdisciplinaria en Ingeniería y
Tecnologías Avanzadas

Sección de Estudios de Posgrado e Investigación

Tesis

“Estados ligados para un sistema cuántico sometido a interacciones puntuales”

Que para obtener el grado de

“Maestra en Tecnología Avanzada”

Presenta:

Leticia Olivera Ramírez

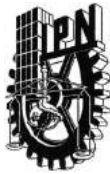
Directores de Tesis:

Dr. Vladimir Rabinovitch Likhtman

Dr. Víctor Barrera-Figueroa



Barrio la Laguna Ticomán, Ciudad de México, a 20 de junio de 2018.



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL SECRETARIA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

ACTA DE REGISTRO DE TEMA DE TESIS Y DESIGNACIÓN DE DIRECTORES DE TESIS

México, D.F. a 10 de Abril del 2018

El Colegio de Profesores de Estudios de Posgrado e Investigación de UPIITA en su sesión ordinaria No. 4 celebrada el día 19 del mes de abril conoció la solicitud presentada por el(la) alumno(a):

<u>Olivera</u>	<u>Ramírez</u>	<u>Leticia</u>
Apellido paterno	Apellido materno	Nombre (s)

Con registro: B 1 6 0 0 0 8

Aspirante de: Maestría en Tecnología Avanzada

1.- Se designa al aspirante el tema de tesis titulado:
Estados ligados para un sistema cuántico sometido a interacciones puntuales

De manera general el tema abarcará los siguientes aspectos:
Cálculo de matrices de monodromía.
Cálculo de eigen-valores y eigen-funciones de los problemas que involucran interacciones puntuales.
Determinación de la ecuación de dispersión

2.- Se designan como Directores de Tesis a los Profesores:
Dr. Vladimir Rabinovitch Likhtman, Dr. Víctor Barrera Figueroa

3.- El trabajo de investigación base para el desarrollo de la tesina será elaborado por el alumno en:
UPIITA y ESIME
que cuenta con los recursos e infraestructura necesarios.

4.- El interesado deberá asistir a los seminarios desarrollados en el área de adscripción del trabajo desde la fecha en que se suscribe la presente hasta la aceptación de la tesis por la Comisión Revisora correspondiente:

Directores de Tesis

Dr. Vladimir Rabinovitch Likhtman

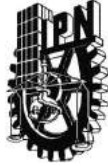
Aspirante

Leticia Olivera Ramirez

Dr. Víctor Barrera Figueroa

Presidente del Colegio

Dr. Juan Hernández Rosas



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

ACTA DE REVISIÓN DE TESIS

En la Ciudad de México siendo las 10:00 horas del día 13 del mes de junio del 2018 se reunieron los miembros de la Comisión Revisora de la Tesis, designada por el Colegio de Profesores de Estudios de Posgrado e Investigación de UPIITA para examinar la tesis titulada:

Estados ligados para un sistema cuántico sometido a interacciones puntuales

Presentada por el alumno:

OLIVERA

RAMÍREZ

LETICIA

Apellido paterno

Apellido materno

Nombre(s)

Con registro:

B	1	6	0	0	0	8
---	---	---	---	---	---	---

MAESTRÍA EN TECNOLOGÍA AVANZADA

Después de intercambiar opiniones los miembros de la Comisión manifestaron **APROBAR LA TESIS**, en virtud de que satisface los requisitos señalados por las disposiciones reglamentarias vigentes.

LA COMISIÓN REVISORA

Directores de tesis

Dr. Vladimir Rabinovitch Likhman

1er Vocal

Dr. Víctor Barrera Figueroa

2° Vocal

Dr. Lev Guzmán Vargas

Presidente

Dra. Sara Guadalupe Cruz y Cruz

Secretario

Dr. Ulises Arasco García

3er Vocal



PRESIDENTE DEL COLEGIO DE PROFESORES

Dr. Juan Hernández Rosas



INSTITUTO POLITECNICO NACIONAL
SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

CARTA CESION DE DERECHOS

En la Ciudad de México el día 19 del mes de junio del año 2018, la que suscribe Leticia Olivera Ramírez alumna del Programa de Maestría en Tecnología Avanzada con número de registro B160008, adscrito a la Sección de Estudios de Posgrado e Investigación de UPIITA, manifiesta que es autora intelectual del presente trabajo de Tesis bajo la dirección del Dr. Vladimir Rabinovitch Likhtman y del Dr. Víctor Barrera-Figueroa y cede los derechos del trabajo intitulado Estados ligados para un sistema cuántico sometido a interacciones puntuales, al Instituto Politécnico Nacional para su difusión, con fines académicos y de investigación.

Los usuarios de la información no deben reproducir el contenido textual, gráficas o datos del trabajo sin el permiso expreso del autor y/o director del trabajo. Este puede ser obtenido escribiendo a la siguiente dirección loliveram@yandex.com. Si el permiso se otorga, el usuario deberá dar el agradecimiento correspondiente y citar la fuente del mismo.

Leticia Olivera Ramírez
Nombre y firma

Agradecimientos

Agradezco al Instituto Politécnico Nacional, a la Sección de Estudios de Posgrado e Investigación de la Unidad Profesional Interdisciplinaria en Ingeniería y Tecnologías Avanzadas y a CONACYT por proporcionarme las condiciones necesarias para realizar este trabajo. A mis asesores el Dr. Vladimir Rabinovich Likhtman y el Dr. Víctor Barrera Figueroa por todo su apoyo, paciencia, asesoría oportuna y conocimientos que han compartido conmigo.

Agradezco a mi familia por proporcionarme las condiciones que me permiten llevar a cabo esta actividad. Sobre todo a Fernando por mostrarme lo maravilloso que es el proceso de la vida.

Gracias al Dr. Alejandro Vivas Hernández que marcó un antes y un después en mi vida. Gracias por todo su apoyo y por el tiempo que trabajamos juntos. Le agradezco que haya sido el primero en acercarme a este proceso de aprendizaje.

Gracias a mis amigos por todo lo que hemos compartido en este tiempo, las risas, las tristezas, los traumas. En especial a Samantha y Omar, sin sus consideraciones no habría llegado hasta donde estoy y siempre estaré agradecida por eso.

Agradezco infinitamente al M. en C. José de Jesús Pablo Martínez Servín, sin él nada de esto sería posible. Me ha enseñado con su ejemplo que con esfuerzo, dedicación, trabajo y tiempo es posible dedicarle la vida a un objetivo. Gracias por enseñarme lo importante y valioso que es el conocimiento. Gracias por todo el apoyo desinteresado, por ser mi maestro de vida. Estoy profundamente agradecida por sus comentarios y consideraciones oportunas que han sido fundamentales en mi existencia, agradezco los recreos, el entrenamiento. Sobre todo gracias por enseñarme que tengo la capacidad de hacer todo aquello que jamás imagine. Siempre estaré con usted.

Finalmente, agradezco a todas las personas que luchan por el desarrollo de la capacidad intelectual de los hombres por medio del conocimiento científico y el trabajo.

Resumen

Los operadores de Schrödinger con interacciones puntuales han sido de gran interés en la física-matemática durante las últimas décadas debido a sus aplicaciones en mecánica cuántica, electrodinámica, óptica, etc..

En esta tesis se hace un análisis matemático considerando el operador unidimensional de Schrödinger libre de unidades, con un potencial especificado formalmente por un potencial singular y otro regular. El potencial singular se representa por distribuciones de primer orden representadas por deltas de Dirac y sus derivadas. En particular se consideran N interacciones puntuales localizadas en los puntos h_1, \dots, h_N . Asociado con este operador se tiene un operador auto-adjunto no-acotado de Schrödinger que consiste únicamente del potencial regular y de ciertas condiciones de frontera especificadas en los puntos donde las interacciones puntuales se encuentran localizadas. Estas condiciones de frontera se expresan en forma matricial en términos de los valores que toman la solución y la derivada a la izquierda y derecha de los puntos de interacción h_i . El operador así especificado se enmarca en el espacio de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}) = \mathcal{L}^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1, \dots, h_N\})$ de modo que se determinan las eigen-funciones y los eigen-valores, los cuales a su vez se pueden calcular por medio de un procedimiento matricial recursivo. En particular por medio del uso de las matrices de monodromía se obtiene la relación de dispersión (ecuación característica) del problema espectral correspondiente. Por otra parte, el análisis se hace suficientemente general para considerar un potencial acotado y para el calculo de las matrices de monodromía se utiliza el método de Series de Potencias del Parámetro Espectral (método SPPS). Para los cálculos numéricos y la implementación computacional correspondiente se hace uso de Wolfram Mathematica 11.0.1.0.

Palabras clave: Interacciones puntuales; ecuación de Schrödinger unidimensional; matrices de monodromía; método matricial recursivo; potencial singular; método SPPS.

Abstract

The Schrödinger operators with point interactions have been of great interest in the mathematical physics during the last decades due to their applications in quantum mechanics, electrodynamics, optics, etc..

In this thesis we perform a mathematical analysis on the free of units one-dimensional Schrödinger operator with a potential specified formally by a singular potential and regular real-valued potential. The singular potential is represented by distributions of the first order, given in terms of Dirac deltas and their first derivatives. In particular we consider N point interactions located at the points h_1, \dots, h_N . Associated with the formal operator there exists a unbounded Schrödinger self-adjoint operator that consists on only the regular potential and certain boundary conditions specified at the points where the interactions are located. These boundary conditions are expressed in a matrix form in terms of the values that takes the solution and its derivative from the left and the right of the interaction points h_i . The operator thus specified is considered in the Hilbert space $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}) = \mathcal{L}^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1, \dots, h_N\})$ so that the eigenfunctions and their corresponding eigenvalues can be determined by means of a matrix recursive method. In particular, by the use of monodromy matrices a dispersion relation (i.e., characteristic equation) of the corresponding spectral problem is obtained. On the other hand, the analysis is general enough to consider a compact support bounded potential and for the calculation of the monodromy matrices by means of the Spectral Parameter Power Series Method (SPPS method for short). For the numerical calculations and the corresponding computational implementation we use Wolfram Mathematica.

Keywords: Point interactions; one-dimensional Schrödinger equation; monodromy matrices; matrix recursive method; singular potential; SPPS method.

Notaciones

A lo largo de la tesis consideremos la siguiente notación para representar los límites laterales

- $\varphi(h^-) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \varphi(h - \epsilon)$, $\epsilon > 0$.
- $\varphi(h^+) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \varphi(h + \epsilon)$, $\epsilon > 0$.
- $\varphi'(h^-) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \varphi'(h - \epsilon)$, $\epsilon > 0$.
- $\varphi'(h^+) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \varphi'(h + \epsilon)$, $\epsilon > 0$.

Además utilizamos las siguientes notaciones para algunos espacios funcionales:

- \mathcal{L}^2 Espacio de las funciones cuadrado-integrables.
- \mathcal{L}^p Espacio de Lebesgue.
- \mathcal{L}^∞ Espacio de funciones esencialmente acotadas.
- H^s Espacio de Sobolev.
- \mathcal{C} Espacio de las funciones continuas.
- \mathcal{C}^p Espacio de las funciones continuamente diferenciables hasta las derivadas de orden p .
- \mathcal{C}_0^∞ Espacio de las funciones infinitamente diferenciables con soporte compacto.
- \mathcal{D} Espacio de funciones de prueba.
- \mathcal{D}' Espacio de funciones generalizadas en el sentido de Sobolev-Schwartz.
- \mathbb{N}_0 Conjunto de los números naturales incluyendo al cero.

Índice general

Agradecimientos	VII
Resumen	VIII
Abstract	X
Notación	XIII
1. Introducción	1
1.1. Objetivo general	1
1.1.1. Objetivos específicos	1
1.2. Antecedentes teóricos	1
1.2.1. Algunos espacios funcionales	4
1.2.1.1. Espacios \mathcal{L}^p	4
1.2.1.2. Espacio \mathcal{L}^∞	4
1.2.1.3. Espacios de las funciones continuas	5
1.2.1.4. Espacio de Sobolev	5
1.2.2. Funciones generalizadas	6
1.2.2.1. Delta de Dirac	6
1.2.2.2. Espacio de funciones de prueba \mathcal{D}	7
1.2.2.3. Espacio de funciones generalizadas \mathcal{D}'	7
1.2.3. Método SPSS	8
1.2.3.1. Cálculo de la solución particular u_0	9
1.3. Estado del Arte	9
1.4. Planteamiento del problema	13
1.5. Aportaciones de la tesis	15
1.6. Contenido de esta tesis	16
2. Análisis de los estados ligados	17
2.1. Problema de eigen-valores con un potencial regular nulo	19
2.1.1. Caso para una interacción puntual	19
2.1.2. Caso para dos interacciones puntuales	21
2.1.3. Caso para N interacciones	23
2.1.4. Normalización de las eigen-funciones	25
2.2. Análisis de los eigen-valores de un sistema con potenciales escalonados e interacciones puntuales	25
2.2.1. Solución del problema con valores en la frontera ante un punto de discontinuidad	26
2.2.2. Solución del problema con valores en la frontera ante dos puntos de discontinuidad	28
2.2.3. Solución del problema con valores en la frontera ante N puntos de discontinuidad	31
2.2.4. Normalización de las eigen-funciones	33
2.3. Estados ligados ante un potencial arbitrario e interacciones puntuales	33
2.3.1. Caso para dos discontinuidades	34
2.3.2. Caso para N discontinuidades	36
2.4. Enfoque SPSS para el análisis de los estados ligados	40

2.4.1. Cálculo de la solución particular $v_{0,i}$ a partir del método SPPS	42
2.4.2. Implementación computacional	43
3. Resultados numéricos del problema de eigen-valores con potenciales regulares nulos y escalonados a trozos	45
3.1. Resultados numéricos con potencial regular nulo	45
3.2. Eigen-valores de un sistema con potenciales escalonados e interacciones puntuales	55
4. Conclusiones y trabajo a futuro	63
4.1. Conclusiones	63
4.2. Trabajo a futuro	64
5. Productos desarrollados	65
Referencias	76

Capítulo 1

Introducción

El análisis espectral de los operadores de Schrödinger con interacciones puntuales representadas por distribuciones de primer orden localizadas en un conjunto finito de puntos ha sido de gran interés debido a que permite describir fenómenos altamente localizados en los sistemas cuánticos por medio de términos que se agregan a la función potencial.

Estas interacciones pueden modelar defectos o perturbaciones de los medios para describir a los sistemas cuánticos de forma más realista. En el ámbito electromagnético las interacciones puntuales permiten describir corrientes laminares o filamentos de corrientes inmersos en los medios dieléctricos. Este tipo de operadores son implementados también en otras áreas tales como la óptica, la física del estado sólido, etc. En esta Tesis se presenta un análisis matemático que permite encontrar un método matricial recursivo para calcular los eigen-valores y eigen-funciones de un problema espectral que involucra este tipo de operadores usando matrices de monodromía.

1.1. Objetivo general

Encontrar la ecuación de dispersión que define los eigen-valores del operador de Schrödinger con potenciales compuestos por potenciales singulares que consisten en interacciones puntuales representadas por distribuciones de primer tipo y potenciales regulares real-valuados continuos a trozos haciendo uso del método SPPS y empleando un algoritmo matricial que involucra a las matrices de monodromía.

1.1.1. Objetivos específicos

- Determinación de un método para obtener la ecuación de dispersión de los problemas de eigen-valores que involucran interacciones puntuales.
- Cálculo de eigen-valores y eigen-funciones de los problemas que involucran interacciones puntuales.
- Cálculo de matrices de monodromía.
- Elaboración de un método matricial que permita encontrar las entradas de las matrices de monodromía involucradas en cada problema.
- Aplicación del método SPPS para el cálculo de soluciones de las ecuaciones de Schrödinger involucradas en los problemas de eigen-valores con potenciales regulares acotados.
- Desarrollo de algoritmos computacionales para el cálculo de eigen-valores con base en el método SPPS.

1.2. Antecedentes teóricos

Consideremos el operador de Schrödinger unidimensional libre de unidades

$$\mathcal{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + q(x), \quad x \in \mathbb{R},$$

donde q es continuo, semi-acotado por abajo (es decir, $q(x) \geq -c$, $c > 0$), y satisface la siguiente condición

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x| |q(x)| dx < \infty.$$

Este operador surge de la ecuación de Schrödinger que describe la amplitud de probabilidad u de una onda cuántica interactuando con un potencial q . La ecuación de Schrödinger incluye un término de energía E que se interpreta como el parámetro espectral de la ecuación $\mathcal{H}u = Eu$. Cuando se consideran condiciones en la frontera (establecidas por las propiedades del potencial) las soluciones enmarcadas en un espacio funcional apropiado (por ejemplo, el espacio \mathcal{L}^2) tienen una interpretación probabilista tal que

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u(x)|^2 dx = 1$$

representa una certeza de encontrar a la partícula en todo el espacio. En los problemas de la mecánica cuántica la energía de las partículas forman un espectro de valores que se divide principalmente en una parte discreta de valores de energía negativos asociados con los estados ligados, y de una parte continua de valores de energía positivos asociados con los estados de dispersión de las partículas interactuando con el potencial. El determinar el número de eigen-valores (es decir, de estados discretos de energía) se puede realizar con base en métodos rigurosos bien conocidos. A continuación, en los siguientes resultados se muestran teoremas generales que permiten determinar las características espectrales de los problemas que involucran a la ecuación de Schrödinger.

Teorema 1.1 ([13, pp. 97]). *Sea \mathcal{H} un operador de la forma*

$$\mathcal{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + q(x)$$

en $(-\infty, \infty)$ y suponga que el potencial q es localmente acotado, acotado por abajo, y que tiene una parte negativa continua $q_-(x)$. Denotemos por $N_-(\mathcal{H})$ al número de eigen-valores negativos de \mathcal{H} . Entonces

$$N_-(\mathcal{H}) \leq 1 + \int_{-\infty}^{\infty} |x| |q_-(x)| dx.$$

De acuerdo con el Teorema 1.1 podemos deducir que la parte negativa del espectro discreto del operador \mathcal{H} consiste en un conjunto finito de eigen-valores simples $k_1^2, k_2^2, \dots, k_N^2$ (se puede ver entonces que los números k_j son puramente imaginarios, es decir, $k_j = i\kappa_j$, donde $\kappa_j > 0$), y que las eigen-funciones asociadas decrecen exponencialmente conforme $|x| \rightarrow \infty$.

A partir de las características del potencial q es posible determinar el comportamiento asintótico de las soluciones de la ecuación

$$\mathcal{H}u = k^2 u, \tag{1.2.1}$$

donde k^2 representa el parámetro espectral que en general puede ser complejo. Considere los siguientes teoremas.

Teorema 1.2 ([13, pp. 70]). *Sea q una función que satisfice*

$$\int_{-\infty}^{\infty} |q(x)| dx < \infty, \tag{1.2.2}$$

y sea $k \neq 0$ un número fijo. Entonces la ecuación (1.2.1) tiene dos soluciones y_1 e y_2 , tales que

$$\begin{aligned} y_1(x) &= e^{ikx} (1 + o(1)), \\ y_2(x) &= e^{-ikx} (1 + o(1)), \end{aligned} \tag{1.2.3}$$

conforme $x \rightarrow +\infty$.

Si el parámetro espectral k^2 es un número complejo podemos determinar el comportamiento asintótico de la solución y_1 descrito en el teorema anterior conforme al siguiente resultado.

Teorema 1.3 ([13, pp. 79]). Si q satisface la condición (1.2.2), y si el número complejo k^2 satisface la propiedad $\text{Im}k \geq 0$, entonces la solución y_1 del Teorema 1.2 que satisface la condición (1.2.3) para $k \neq 0$, tiene la asintótica

$$y_1(x) = e^{ikx} \left(1 + \frac{o(1)}{|k|} \right)$$

conforme $x \rightarrow +\infty$, donde $o(1)$ es uniforme con respecto a k . Si, más aún, q satisface la condición

$$\int_{-\infty}^{\infty} x |q(x)| dx < \infty,$$

entonces para $k = 0$ también existe una solución única que satisface la condición (1.2.3), con la asintótica

$$y_1(x; k) = e^{ikx} \left(1 + \frac{o(1)}{1 + |k|} \right) \quad (1.2.4)$$

conforme $x \rightarrow +\infty$, donde $o(1)$ es uniforme con respecto a k .

Teorema 1.4 ([41, pp. 36]). El sistema de eigen-funciones y eigen-funciones generalizadas del problema (1.2.1) con valores en la frontera, con condiciones auto-adjuntas es completo en el espacio $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.

Existe una parte continua del espectro del operador \mathcal{H} de acuerdo con el Teorema 1.4. Similarmente, se obtiene el comportamiento asintótico de la solución y_2 conforme $x \rightarrow -\infty$

$$y_2(x; k) = e^{-ikx} \left(1 + \frac{o(1)}{1 + |k|} \right), \quad (1.2.5)$$

Las soluciones y_1 e y_2 , con $\text{Im} k \geq 0$, cuyas asintóticas están dadas por (1.2.4) y (1.2.5), respectivamente, se denominan usualmente como funciones de Jost.

Por otra parte, si el parámetro espectral es real, es decir, $k \in \mathbb{R}$, $k \neq 0$, podemos construir dos conjuntos de soluciones fundamentales de la ecuación (1.2.1)

$$\{y_1(x; k), y_1(x; -k)\}, \{y_2(x; k), y_2(x; -k)\}.$$

Note que $y_1(x; -k) = \overline{y_1(x; k)}$, $y_2(x; -k) = \overline{y_2(x; k)}$. La solución $y_2(x; k)$ tiene que ser una combinación lineal de las soluciones $y_1(x; k)$ y $y_1(x; -k)$, es decir,

$$y_2(x; k) = a(k) y_1(x; -k) + b(k) y_1(x; k),$$

a partir de la cual, tomando el complejo conjugado, obtenemos

$$y_2(x; -k) = \overline{b(k)} y_1(x; -k) + \overline{a(k)} y_1(x; k).$$

Si $q(x) \equiv 0$, entonces $y_2(x; k) = y_1(x; -k)$, por lo tanto $a(k) \equiv 1$ y $b(k) \equiv 0$. El sentido físico de la solución $y_2(x; k)$ corresponde a la función de onda de una partícula que, conforme $x \rightarrow -\infty$, se convierte en una partícula libre con momento k . Al pasar a través de la barrera de potencial obtenemos la superposición de las dos funciones de onda con momento k (la función $y_1(x; -k)$) y $-k$ (la función $y_1(x; k)$). Por lo tanto, $a(k)$ es el coeficiente de transmisión y $b(k)$ el coeficiente de reflexión.

De manera similar, podemos expresar $y_1(x; k)$ en términos de $y_2(x; k)$ y $y_2(x; -k)$. Sin embargo, los coeficientes en este caso se expresan en términos de $a(k)$ y $b(k)$. La matriz de transición está definida como

$$C(k) = \begin{pmatrix} a(k) & b(k) \\ \overline{b(k)} & \overline{a(k)} \end{pmatrix}.$$

Introduzcamos los vectores columna

$$Y_1(x; k) = \begin{pmatrix} y_1(x; -k) \\ y_1(x; k) \end{pmatrix}, \quad Y_2(x; k) = \begin{pmatrix} y_2(x; k) \\ y_2(x; -k) \end{pmatrix},$$

que definen dos conjuntos de soluciones fundamentales, entonces

$$Y_2(x; k) = C(k) Y_1(x; k). \quad (1.2.6)$$

La matriz $C(k)$ es no-singular cuando $k \neq 0$ porque $y_2(x; k)$ y $y_2(x; -k)$ son linealmente independientes. De la relación (1.2.6) se deduce que para $k \neq 0$

$$Y_1(x; k) = C^{-1}(k) Y_2(x; k),$$

donde la matriz C^{-1} se determina por

$$C^{-1}(k) = \begin{pmatrix} \overline{a(k)} & -b(k) \\ -b(k) & a(k) \end{pmatrix}.$$

1.2.1. Algunos espacios funcionales

Con el fin de resolver problemas de la física-matemática, debemos buscar las soluciones en un espacio adecuado de funciones donde los teoremas de unicidad se verifiquen. Con frecuencia tal espacio de funciones viene determinado por la naturaleza física del problema.

1.2.1.1. Espacios \mathcal{L}^p

Un espacio frecuentemente utilizado es el espacio de Lebesgue de las funciones u para las cuales la integral

$$\int_{\Omega} |u|^p dx < \infty$$

existe, donde $1 \leq p < \infty$. Este espacio se denota por $\mathcal{L}^p(\Omega)$, el cual está dotado de una norma $\|\cdot\|_{\mathcal{L}^p}$ la cual se define como

$$\|u\|_{\mathcal{L}^p} := \left(\int_{\Omega} |u|^p dx \right)^{1/p}, \quad u \in \mathcal{L}^p(\Omega).$$

Un caso de gran interés se obtiene cuando $p = 2$ el cual se denota como $\mathcal{L}^2(\Omega)$ y se le conoce como el espacio de las funciones cuadrado-integrables [5] el cual de forma natural es un espacio de Hilbert. Un producto interno usualmente empleado en el espacio $\mathcal{L}^2(\Omega)$ para funciones complejo-valuadas se define como

$$\langle u, v \rangle := \int_{\Omega} u(x) \overline{v(x)} dx, \quad u, v \in \mathcal{L}^2(\Omega).$$

A partir de este producto interno se puede inducir una norma en $\mathcal{L}^2(\Omega)$ de forma usual, es decir,

$$\|u\|_{\mathcal{L}^2}^2 := \langle u, u \rangle = \int_{\Omega} |u|^2 dx, \quad u \in \mathcal{L}^2(\Omega).$$

1.2.1.2. Espacio \mathcal{L}^∞

Sea $\mathcal{L}^\infty(\mathbb{R})$ el conjunto de funciones complejo-valuadas medibles en \mathbb{R} tal que $|f(x)| \leq M$, casi en todas partes, con respecto a la medida de Lebesgue para algún $M < \infty$ ($f \sim g$, es decir, $f(x) = g(x)$ casi en todas partes). Se introduce una norma denotada por $\|f\|_\infty$ que corresponde al valor más pequeño de M , ver Figura 1.2.1, [47].

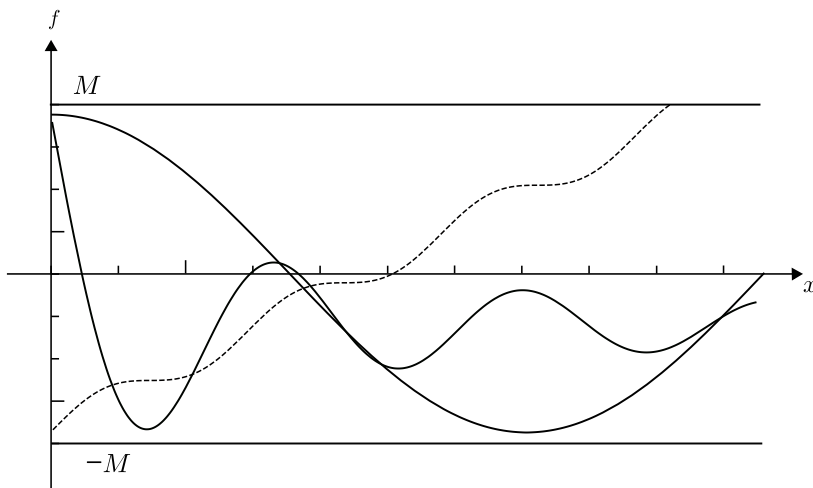


Figura 1.2.1. Ejemplos de funciones f que pertenecen al espacio $\mathcal{L}^\infty(\mathbb{R})$.

1.2.1.3. Espacios de las funciones continuas

Cuando se investiga la suavidad de las funciones conviene clasificarlas de acuerdo con su diferenciabilidad. Sea $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ un multi-índice con $\alpha_j \in \mathbb{N}$ ($j = 1, \dots, n$). Denotemos por $D^\alpha f(x)$ a la derivada de orden $|\alpha| := \alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n$ de una función f que se define como

$$D^\alpha f(x) = \frac{\partial^{|\alpha|} f(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_1^{\alpha_1} \partial x_2^{\alpha_2} \dots \partial x_n^{\alpha_n}}, \quad D^0 f(x) = f(x).$$

El conjunto de funciones f continuas junto con sus derivadas $D^\alpha f(x)$, $|\alpha| \leq p$, ($0 \leq p < \infty$) también continuas, forman un espacio lineal denotado por $\mathcal{C}^p(\Omega)$. Las funciones f de clase $\mathcal{C}^p(\Omega)$ permiten una extensión continua sobre la frontera $\bar{\Omega}$, formando otro espacio lineal denotado por $\mathcal{C}^p(\bar{\Omega})$. Denotemos $\mathbb{N}_0 := \mathbb{N} \cup \{0\}$ y definamos por

$$\mathcal{C}^\infty(\Omega) = \bigcap_{p \in \mathbb{N}_0} \mathcal{C}^p(\Omega), \quad \mathcal{C}^\infty(\bar{\Omega}) = \bigcap_{p \in \mathbb{N}_0} \mathcal{C}^p(\bar{\Omega})$$

el conjunto de funciones continuamente diferenciables en Ω y $\bar{\Omega}$, respectivamente, conocidas como funciones analíticas. Finalmente los espacios

$$\mathcal{C}(\Omega) := \mathcal{C}^0(\Omega), \quad \mathcal{C}(\bar{\Omega}) := \mathcal{C}^0(\bar{\Omega})$$

consisten en funciones continuas en Ω y $\bar{\Omega}$, respectivamente [53].

1.2.1.4. Espacio de Sobolev

Sea $s \in \mathbb{N}_0$ y consideremos la siguiente definición

Definición 1.1. El espacio de Sobolev H^s consiste en funciones $u \in \mathcal{L}^2(\Omega)$ tales que $D^\alpha u \in \mathcal{L}^2(\Omega)$ para $|\alpha| \leq s$, donde las derivadas se entienden en el sentido de las distribuciones.

Introducimos un producto interno en H^s definido por

$$\langle u, v \rangle_s := \sum_{|\alpha| \leq s} \langle D^\alpha u, D^\alpha v \rangle, \quad u, v \in H^s(\Omega),$$

donde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ es el producto interno usual en $\mathcal{L}^2(\Omega)$. La norma correspondiente está dada por la fórmula

$$\|u\|_s := \langle u, u \rangle_s^{1/2} = \left(\sum_{|\alpha| \leq s} \int_{\Omega} |D^\alpha u(x)|^2 dx \right)^{1/2}.$$

Un espacio ampliamente utilizado es el espacio de Sobolev H^2 el cual es otro espacio de Hilbert [13].

1.2.2. Funciones generalizadas

Las funciones generalizadas aparecen frecuentemente en la física cuando se trata con distribuciones de cargas o de fuerzas las cuales están localizadas en puntos del espacio. Un ejemplo de esto es la función δ que introdujo Dirac en sus investigaciones sobre mecánica cuántica. Funciones como la delta de Dirac o la función de Heaviside se les conoce actualmente como distribuciones o funciones generalizadas. Los fundamentos de la teoría matemática de las funciones generalizadas fueron expuestos por Schwartz y Sobolev a mediados del siglo XX. Más tarde, el desarrollo de la teoría de las funciones generalizadas fue estimulado principalmente por los requisitos de la física matemática y especialmente por la teoría de ecuaciones diferenciales y la teoría cuántica [53].

1.2.2.1. Delta de Dirac

Una distribución es una generalización del concepto clásico de una función. Esta generalización, por un lado, nos permite expresar en forma matemática conceptos idealizados como, por ejemplo, la densidad de masa de un punto material, la intensidad de una fuerza aplicada en un punto, y así sucesivamente. Por otro lado, encontramos en el concepto de distribución un reflejo del hecho de que es realmente imposible, por ejemplo, medir la densidad de masa de un material en un punto: solo podemos medir su densidad promedio en una vecindad suficientemente pequeña de este punto. Consideremos que este punto coincide con el origen del sistema de coordenadas \mathbb{R}^3 . La densidad de masa de una bola U_ϵ de radio ϵ de masa unitaria uniformemente distribuida es

$$f_\epsilon(x) = \begin{cases} \frac{3}{4\pi\epsilon^3}, & |x| < \epsilon, \\ 0, & |x| > \epsilon. \end{cases}$$

Denotemos por δ la densidad de masa que corresponde al límite de la secuencia de densidades $f_\epsilon(x)$ conforme $\epsilon \rightarrow 0$, es decir,

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} f_\epsilon(x) = \begin{cases} +\infty, & x = 0, \\ 0, & x \neq 0. \end{cases} \quad (1.2.7)$$

Naturalmente se requiere que la integral de la densidad $\delta(x)$ sobre cualquier volumen Ω coincida con la masa contenida en este volumen, es decir,

$$\int_{\Omega} \delta(x) dx = \begin{cases} 1, & 0 \in \Omega, \\ 0, & 0 \notin \Omega. \end{cases}$$

Pero, en virtud de (1.2.7), el lado izquierdo de esta expresión es siempre igual a cero si se considera que el integrando está definido en un solo punto. Esto muestra una contradicción que se soluciona de la siguiente manera.

Calculemos el límite débil de la secuencia de funciones $f_\epsilon(x)$ conforme $\epsilon \rightarrow 0^+$, es decir, para cualquier función continua φ encontraremos el límite de la secuencia numérica $\int_{|x|<\epsilon} f_\epsilon(x) \varphi(x) dx$ conforme $\epsilon \rightarrow 0^+$. Demostremos que

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{|x|<\epsilon} f_\epsilon(x) \varphi(x) dx = \varphi(0).$$

En efecto, debido a la continuidad de la función $\varphi(x)$ para cualquier $\eta > 0$ existe $\epsilon_0 > 0$ tal que $|\varphi(x) - \varphi(0)| < \eta$ implica que $|x| < \epsilon_0$. Esta es nuestra definición de la continuidad de una función alrededor de un punto. Lo anterior se expresa como

$$\begin{aligned} \left| \int f_\epsilon(x) \varphi(x) dx - \varphi(0) \right| &= \frac{3}{4\pi\epsilon^3} \left| \int_{|x|<\epsilon} [\varphi(x) - \varphi(0)] dx \right| \\ &\leq \frac{3}{4\pi\epsilon^3} \int_{|x|<\epsilon} |\varphi(x) - \varphi(0)| dx \\ &< \eta \frac{3}{4\pi\epsilon^3} \int_{|x|<\epsilon} dx = \eta. \end{aligned}$$

Como η es arbitrariamente pequeño se deduce que $\int_{|x|<\epsilon} f_\epsilon(x) \varphi(x) dx - \varphi(0) = 0$ que es lo que se quería probar. Por lo tanto, el límite débil de la secuencia de funciones $f_\epsilon(x)$ conforme $\epsilon \rightarrow 0^+$ coincide con el

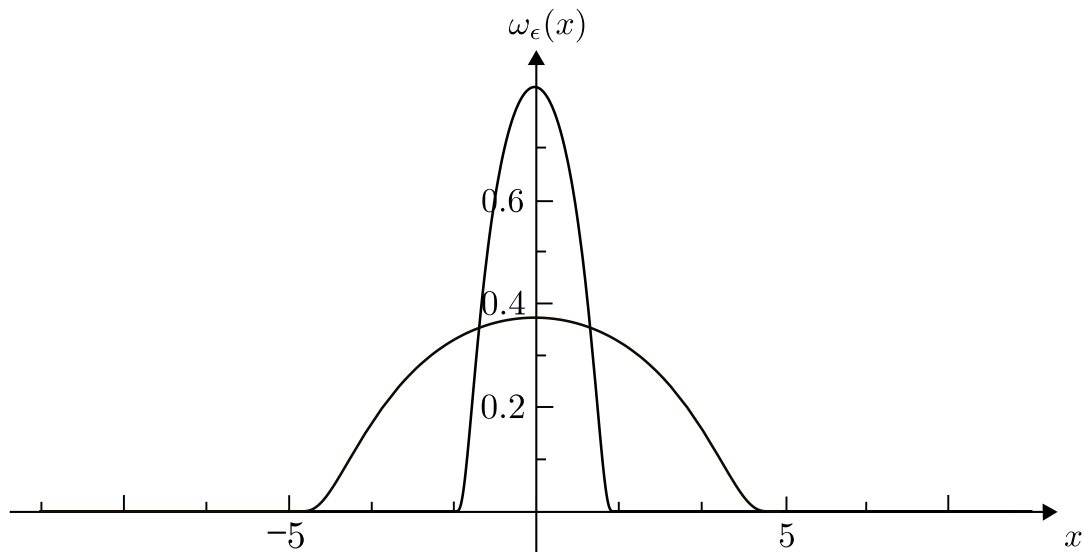


Figura 1.2.2. Ejemplos de funciones de prueba ω_ϵ .

funcional $\varphi(0)$, el cual asigna a cada función continua φ su valor en el punto $x = 0$. Este es el funcional que consideraremos en el cálculo de la densidad de masa al tomar $\varphi(x) \equiv 1$ con lo cual

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{|x| < \epsilon} f_\epsilon(x) dx = \int_{|x| < \epsilon} \delta(x) dx = 1.$$

1.2.2.2. Espacio de funciones de prueba \mathcal{D}

Es el espacio de todas las funciones de clase $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^n)$ con soporte compacto. Un ejemplo de este tipo de funciones está dado por

$$\omega_\epsilon(x) = \begin{cases} C_\epsilon \exp\left(-\frac{\epsilon^2}{\epsilon^2 - |x|^2}\right), & |x| \leq \epsilon, \\ 0, & |x| > \epsilon, \end{cases}$$

ver Figura 1.2.2, donde la constante C_ϵ se escoge de tal forma que las integrales de prueba sean uno

$$\int \omega_\epsilon(x) dx = 1.$$

1.2.2.3. Espacio de funciones generalizadas \mathcal{D}'

Cada funcional lineal continuo sobre el espacio de las funciones de prueba \mathcal{D} es conocido como una función generalizada en el sentido de Sobolev-Schwartz. Las funciones generalizadas cumplen con las siguientes propiedades

1. Una función generalizada f es un funcional sobre \mathcal{D} , es decir, un número complejo (f, φ) es asociado con cada $\varphi \in \mathcal{D}$.
2. Una función generalizada f es una función lineal sobre \mathcal{D} ; es decir, si $\varphi, \psi \in \mathcal{D}$ y $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$, entonces

$$(f, \lambda\varphi + \mu\psi) = \lambda(f, \varphi) + \mu(f, \psi).$$

3. Una función generalizada f es un funcional continuo sobre \mathcal{D} , es decir, si $\varphi_k \rightarrow \varphi$ conforme $k \rightarrow \infty$ en \mathcal{D} , entonces

$$(f, \varphi_k) \rightarrow (f, \varphi), \quad k \rightarrow \infty.$$

El espacio \mathcal{D}' es completo, es decir, si la secuencia $f_1, f_2, \dots \in \mathcal{D}'$ es tal que para cualquier función de prueba $\varphi \in \mathcal{D}$ existe un límite de la secuencia numérica $(f_1, \varphi), (f_2, \varphi), \dots$, entonces habrá una única función generalizada $f \in \mathcal{D}'$, tal que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} (f_k, \varphi) = (f, \varphi), \quad \varphi \in \mathcal{D}.$$

1.2.3. Método SPPS

Consideremos la ecuación de Sturm-Liouville en su forma más general

$$(pu')' + qu = \lambda ru, \quad a < x < b, \quad (1.2.8)$$

donde p, q, r son funciones en general complejo-valuadas dependientes de una variable real x , las cuales satisfacen ciertas condiciones de suavidad y λ es un parámetro complejo. La solución general de (1.2.8) se puede buscar en la forma de una serie de potencias del parámetro espectral. Esta representación nos da, entre otras posibles aplicaciones, un método sencillo y potente para la solución numérica de problemas con valores en la frontera y espectrales, entre otros. Consideremos los resultados más importantes del método SPPS [35].

Teorema 1.5 ([35]). *Supongamos que en un intervalo finito $[a, b]$, la ecuación*

$$(pu_0')' + qu_0 = 0 \quad (1.2.9)$$

posee una solución particular u_0 de tal forma que las funciones $u_0^2 r, 1/u_0^2 p \in \mathcal{C}[a, b]$. Entonces la solución general de (1.2.8) en (a, b) tiene la forma

$$u = c_1 u_1 + c_2 u_2 \quad (1.2.10)$$

donde c_1 y c_2 son constantes complejas arbitrarias,

$$u_1 = u_0 \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \tilde{X}^{(2k)}, \quad u_2 = u_0 \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k X^{(2k+1)} \quad (1.2.11)$$

y $\tilde{X}^{(n)}, X^{(n)}$ se definen por las relaciones recursivas

$$\tilde{X}^{(0)} \equiv 1, \quad X^{(0)} \equiv 1, \quad (1.2.12)$$

$$\tilde{X}^{(n)}(x) = \begin{cases} \int_{x_0}^x \tilde{X}^{(n-1)}(s) u_0^2(s) r(s) ds, & n \text{ impar} \\ \int_{x_0}^x \tilde{X}^{(n-1)}(s) \frac{1}{u_0^2(s)p(s)} ds, & n \text{ par} \end{cases} \quad (1.2.13)$$

$$X^{(n)}(x) = \begin{cases} \int_{x_0}^x X^{(n-1)} \frac{1}{u_0^2(s)p(s)} ds, & n \text{ impar}, \\ \int_{x_0}^x X^{(n-1)} u_0^2(s) r(s) ds, & n \text{ par}, \end{cases} \quad (1.2.14)$$

siendo x_0 un punto arbitrario en $[a, b]$ tal que p es continua en x_0 y $p(x_0) \neq 0$. Además, ambas series en (1.2.11) convergen uniformemente en $[a, b]$.

Observación 1.1. La independencia lineal de las soluciones u_1 y u_2 se consigue al hacer que el Wronskiano correspondiente sea distinto de cero en al menos un punto del intervalo $[a, b]$. Se puede ver entonces que las soluciones anteriormente definidas son linealmente independientes. De acuerdo con la definición de las integrales recursivas se tienen que

$$\begin{aligned} u_1(x_0) &= u_0(x_0), & u_1'(x_0) &= u_0'(x_0), \\ u_2(x_0) &= 0, & u_2'(x_0) &= \frac{1}{u_0(x_0)p(x_0)}, \end{aligned}$$

y el Wronskiano de u_1 y u_2 en x_0 es igual $1/p(x_0) \neq 0$ [35].

Observación 1.2. El procedimiento para la construcción de las soluciones descritas en el Teorema 1.5 es válido no sólo cuando se tiene una solución de la ecuación cuando $\lambda = 0$, sino también cuando se tiene una solución de la ecuación

$$(pu_0')' + qu_0 = \lambda_0 r u_0$$

para algún $\lambda_0 \neq 0$. En este caso las soluciones (1.2.11) ahora toman la forma [35]

$$u_1 = u_0 \sum_{k=0}^{\infty} (\lambda - \lambda_0)^k \tilde{X}^{(2k)}, \quad u_2 = u_0 \sum_{k=0}^{\infty} (\lambda - \lambda_0)^k X^{(2k+1)}.$$

1.2.3.1. Cálculo de la solución particular u_0

El método SPPS se basa en la existencia de una solución particular u_0 de

$$(pu_0')' + qu_0 = 0, \quad u \in (a, b) \tag{1.2.15}$$

que satisface las condiciones de regularidad $u_0^2, u_0^{-2} \in \mathcal{C}[a, b]$. El método SPPS nuevamente puede ser usado para obtener la solución u_0 , para esto el equivalente de (1.2.15) como una ecuación de Sturm-Liouville es

$$(\tilde{p}u_0')' + \tilde{q}u_0 = \tilde{\lambda}u_0\tilde{r}$$

donde los coeficientes

$$\tilde{p} = p, \quad \tilde{q} = 0, \quad \tilde{\lambda} = -1, \quad \tilde{r} = q.$$

Sea v_0 una solución particular de $(\tilde{p}v_0')' + \tilde{q}v_0 = 0$ en (a, b) que satisface las condiciones de regularidad $v_0^2\tilde{r}, 1/v_0^2\tilde{p} \in \mathcal{C}[a, b]$, una solución general u_0 de la ecuación diferencial homogénea se puede expresar como $u_0 = d_1v_1 + d_2v_2$, donde d_1 y d_2 son coeficientes arbitrarios y v_1, v_2 son dos soluciones linealmente independientes que están expresadas como

$$v_1(x) := v_0(x) \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \tilde{Y}^{(2k)}(x), \quad v_2(x) := v_0(x) \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k Y^{(2k+1)}(x),$$

donde las funciones $\tilde{Y}^{(n)}, Y^{(n)}$ son calculadas de acuerdo al procedimiento de integración recursiva

$$\tilde{Y}^{(0)} \equiv 1, \quad Y^{(0)} \equiv 1,$$

$$\tilde{Y}^{(n)}(x) := \begin{cases} \int_{x_0'}^x \tilde{Y}^{(n-1)}(s) q(s) ds, & n \text{ impar,} \\ \int_{x_0'}^x \tilde{Y}^{(n-1)}(s) ds, & n \text{ par,} \end{cases}$$

$$Y^{(n)}(x) := \begin{cases} \int_{x_0'}^x Y^{(n-1)} ds, & n \text{ impar,} \\ \int_{x_0'}^x Y^{(n-1)} q(s) ds, & n \text{ par,} \end{cases}$$

y $x_0' \in [a, b]$ es un punto arbitrario. En particular, $v_0 \equiv 1$ simplificará los cálculos. Las soluciones v_1 y v_2 cuyos ceros se alternan según el Teorema de oscilación de Sturm [51], garantizan que la solución u_0 nunca se va anular. Si se elije $d_1 = 1$ y $d_2 = i$ la solución u_0 queda como $u_0 = v_1 + iv_2$ en $[a, b]$, lo cual simplifica los cálculos.

1.3. Estado del Arte

Los operadores de Schrödinger con potenciales con soporte puntual han sido estudiados ampliamente durante las últimas décadas, ya que constituyen una clase de potenciales adecuados para estudiar las propiedades

cuánticas básicas, estados ligados y de dispersión, resonancias, etc., por mencionar algunos [10, 15, 34, 39, 43]. Además permite modelar defectos pequeños y abruptos en materiales que pueden dar lugar a fenómenos como el efecto túnel [32] o el efecto Casimir [14], también permiten obtener una descripción sobre la interacción de partículas cuánticas con hipersuperficies cargadas [9, 8, 10, 46]. Físicamente estos operadores describen en el ámbito de la mecánica cuántica, el movimiento de una partícula que se mueve bajo la acción de un potencial soportado, por ejemplo, por los puntos de una red cristalina de un sólido. Dichos sistemas y modelos han sido usados también en otras áreas de la física, como en la óptica y el electromagnetismo (ver, *e.g.*, [19, 4]).

Los operadores con interacciones singulares fueron introducidos por Fermi [22]. La primera investigación matemáticamente rigurosa del operador de Schrödinger con interacciones singulares fue llevada a cabo por Berezin y Faddeev [11, 12] donde consideran el operador de Laplace en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ con una interacción singular tipo δ . Posteriormente se analizaron casos particulares acerca de este problema considerando operadores unidimensionales y bidimensionales [3].

En el artículo [49] se resalta la importancia de dos tipos de interacciones puntuales unidimensionales. El primer tipo de interacción corresponde a la distribución delta de Dirac, la cual está formalmente incluida en el operador

$$\mathcal{H}_\alpha = \mathcal{H}_0 + \alpha\delta(x), \quad \alpha \in \mathbb{R}$$

donde \mathcal{H}_0 es el Hamiltoniano libre unidimensional, que en su versión libre de unidades está dado por el operador diferencial

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{d^2}{dx^2}.$$

El segundo tipo de interacción, hasta 1986, había sido abordado únicamente en dos artículos [3, 31]. En dichos artículos estas interacciones son denominadas como interacciones δ' o interacciones dipolares. La interacción δ' puede definirse al considerar la densidad de carga asociada a un dipolo eléctrico

$$\rho_v = \frac{1}{\epsilon}\delta(x - \epsilon) - \frac{1}{\epsilon}\delta(x)$$

el cual está formado por dos cargas de valor $\frac{1}{\epsilon}$, de signos opuestos, separadas una distancia ϵ . Sea φ una función de prueba (es decir, una función continua, cuyas derivadas también son continuas), y consideremos el siguiente límite débil cuando $\epsilon \rightarrow 0^+$

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{\epsilon}\delta(x - \epsilon) - \frac{1}{\epsilon}\delta(x), \varphi \right) &= \frac{1}{\epsilon}(\varphi(\epsilon) - \varphi(0)) \rightarrow \varphi'(0) \\ &= (\delta, \varphi') = (-\delta', \varphi) \end{aligned}$$

de lo cual se concluye que la densidad de carga ρ_v del dipolo coincide con la distribución $\delta'(x)$ en el límite cuando $\epsilon \rightarrow 0^+$ (ver [53]). Formalmente en [3] se considera esta interacción en el siguiente operador Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_\beta = \mathcal{H}_0 - \beta\delta'(x), \quad \beta \in \mathbb{R},$$

donde β es la intensidad de la interacción. Se puede demostrar que existen extensiones auto-adjuntas para los operadores \mathcal{H}_α y \mathcal{H}_β [37].

Las interacciones tipo delta de Dirac han sido utilizadas también junto con pozos de potencial dados por funciones regulares, por ejemplo, en [28] los pozos de potencial se definen a partir de un campo eléctrico constante, el cual permite analizar las resonancias a las que esta sometida una partícula que interactúa con este tipo de potenciales e interacciones.

Los Hamiltonianos con ambos tipos de interacciones actuando simultáneamente se han considerado en diferentes artículos. Por ejemplo, en [18] se analiza el operador unidimensional de Schrödinger independiente del tiempo

$$-\varphi''(x) + (\alpha\delta(x) + \beta\delta'(x))\varphi(x) = E\varphi(x), \quad (1.3.1)$$

donde α, β son parámetros constantes. Estas interacciones establecen sus condiciones de frontera correspondientes, pero en este artículo se hace énfasis en la deducción de las condiciones en frontera que establecen las interacciones tipo δ' , las cuales fueron definidas por Griffiths en [29]. También realizan el cálculo de los coeficientes de transmisión y reflexión para los estados de dispersión y posteriormente se consideran los potenciales tipo δ y δ' en el ámbito de la ecuación de Dirac.

Por otra parte en el artículo [25] se considera el Hamiltoniano unidimensional

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} - \alpha\delta(x) + \beta\delta'(x), \quad \alpha > 0, \beta \in \mathbb{R}, \quad (1.3.2)$$

donde $p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ es el operador de momento lineal y m es la masa de la partícula y se realiza el análisis de los estados ligados. Se analizan los estados ligados y se determina su energía en términos de los parámetros α y β . Además se obtienen los coeficientes de transmisión y de reflexión de los estados de dispersión. Este Hamiltoniano es bien conocido cuando $\beta = 0$ [17, 24] y en este caso se puede demostrar que el operador (1.3.2) es auto-adjunto en un dominio D de funciones continuas φ tales que $\varphi'(0^+) - \varphi'(0^-) = m\alpha\varphi(0)$ [3, 37]. Sin embargo, el caso con $\beta \neq 0$ se especifica por las siguientes condiciones en el origen

$$\begin{pmatrix} \varphi(0^+) \\ \varphi'(0^+) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1+m\beta}{1-m\beta} & 0 \\ -\frac{2\alpha m}{1-m^2\beta^2} & \frac{1-m\beta}{1+m\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi(0^-) \\ \varphi'(0^-) \end{pmatrix}.$$

En el cálculo de los estados ligados se considera la simetría de la gráfica de la función de onda y la continuidad haciendo variaciones de los parámetros α , β y observando su comportamiento. Por otra parte, al abordar los estados de dispersión se calculan los coeficientes de transmisión T y reflexión R definidos a partir de la relación matricial

$$\begin{pmatrix} T \\ ikT \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1+m\beta}{1-m\beta} & 0 \\ -\frac{2\alpha m}{1-m^2\beta^2} & \frac{1-m\beta}{1+m\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1+R \\ ik(1-R) \end{pmatrix}.$$

Finalmente, se analizan varios casos particulares desde esta perspectiva matricial.

Por otra parte, en [31] se considera el estudio de las interacciones puntuales como casos límite de perturbaciones de los operadores de Schrödinger. En este trabajo plantean la construcción de modelos para la física de estado sólido que incluyen interacciones puntuales en los sólidos cristalinos donde se pueden especificar las condiciones de frontera que establecen las perturbaciones y construir el Hamiltoniano correspondiente.

Los operadores de Schrödinger con interacciones singulares pueden abordarse de manera formal, pero también pueden definirse de manera rigurosa como extensiones auto-adjuntas de ciertos operadores adecuados sometidos a condiciones en la frontera especificadas en los puntos donde se encuentran las interacciones. Esto quedó claro por la aportación del artículo de Berezin y Faddeev [11], lo que en la mayoría de las situaciones prácticas equivale a la elección de las condiciones de frontera adecuadas.

Posteriormente en [26] estudian un potencial cuadrado de profundidad infinita con perturbaciones singulares en dos casos: cuando la perturbación está centrada en el origen es decir $r = 0$ y fuera de él $-1 < r < 1$. El Hamiltoniano está expresado como

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + W(x)$$

donde

$$\mathcal{H}_0 = \frac{d^2}{dx^2} + V_0(x), \quad V_0(x) = \begin{cases} 0, & |x| < c, \\ \infty, & |x| \geq c, \end{cases}$$

y $W(x)$ es una perturbación singular dada por

$$W(x) = -\alpha\delta(x - rc) + \beta\delta'(x - rc), \quad -1 < r < 1, r \neq 0.$$

La ecuación que da los valores de energía del sistema la obtienen por dos métodos: la función de Green y la integración del Hamiltoniano. Cuando la perturbación está localizada en $r = 0$ los niveles de energía con la función de onda impar permanecen invariables y aquellos con la función de onda par disminuyen. Si el potencial singular está localizado en $-1 < r < 1$, entonces todos los niveles de energía sufren un cambio.

En el artículo [27] se analizan dos sistemas cuánticos con perturbaciones singulares y se calculan sus correspondientes energías: el primer sistema consiste en un potencial singular unidimensional inmerso en un campo eléctrico constante; el segundo consiste del oscilador armónico con una perturbación. Para el primer caso se encuentran los estados ligados por medio de la función de Green, mientras que para el segundo se usa la integración directa de la ecuación de Schrödinger y la función de Green. En el caso del sistema con el oscilador armónico se puede observar que si el valor de la energía del oscilador es mayor, más pequeño será el efecto de la perturbación. Este tipo de potenciales ha sido abordado en la literatura en otros trabajos (ver *e. g.*, [42]).

En [40] emplean potenciales δ' para el modelado de grafos cuánticos. La razón de utilizar estos potenciales es por sus potenciales aplicaciones en el análisis de estructuras periódicas de materiales semiconductores [36]. La idea de investigar partículas cuánticas confinadas en un grafo se originó con el estudio de modelos de electrones libres en moléculas orgánicas [44, 45, 48]. Entre los sistemas que se modelaron con éxito mediante el uso de grafos cuánticos se tienen redes de guías de ondas acústicas y electromagnéticas [23], sistemas cuánticos mesoscópicos [33], entre otros. El componente esencial de tales modelos de grafos es el acoplamiento de la función de onda en los vértices.

Otro de los artículos que es importante considerar es [16] donde consideran el problema de la construcción de una extensión auto-adjunta de un operador de Schrödinger unidimensional con interacciones dentro de un conjunto Γ de medida de Lebesgue cero. En este caso la forma que tienen las condiciones de frontera ante diferentes potenciales puntuales como tipo δ , δ' y el potencial δ magnético, es representada en forma matricial como mostramos a continuación. Para un potencial δ con intensidad α las condiciones de frontera que se establecen están dadas por

$$\begin{aligned}\varphi(x_0^+) - \varphi(x_0^-) &= 0, \\ \varphi'(x_0^+) - \varphi'(x_0^-) &= \frac{\alpha}{2}(\varphi(x_0^+) + \varphi(x_0^-)),\end{aligned}$$

donde φ es una función en general discontinua en el punto x_0 donde se localiza la interacción, en este caso la matriz A de condiciones de frontera tiene la forma

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha & 1 \end{pmatrix}.$$

Al considerar un potencial δ' de intensidad β las condiciones de frontera que se establecen son

$$\begin{aligned}\varphi'(x_0 + 0) - \varphi'(x_0 - 0) &= 0, \\ \varphi(x_0 + 0) - \varphi(x_0 - 0) &= \frac{\beta}{2}(\varphi'(x_0 + 0) + \varphi'(x_0 - 0)),\end{aligned}$$

y la matriz A correspondiente es

$$A = \begin{pmatrix} 1 & \beta \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

El potencial δ' de intensidad γ está definido por las condiciones de frontera

$$\begin{aligned}\varphi(x_0 + 0) - \varphi(x_0 - 0) &= \frac{\gamma}{2}(\varphi(x_0 + 0) + \varphi(x_0 - 0)), \\ \varphi'(x_0 + 0) - \varphi'(x_0 - 0) &= -\frac{\gamma}{2}(\varphi'(x_0 + 0) + \varphi'(x_0 - 0)),\end{aligned}$$

la matriz toma la forma

$$A = \begin{pmatrix} \frac{2+\gamma}{2-\gamma} & 0 \\ 0 & \frac{2-\gamma}{2+\gamma} \end{pmatrix}.$$

Por último para el potencial delta magnético con intensidad μ las condiciones de frontera son

$$\begin{aligned}\varphi(x_0 + 0) - \varphi(x_0 - 0) &= \frac{i\mu}{2}(\varphi(x_0 + 0) + \varphi(x_0 - 0)), \\ \varphi'(x_0 + 0) - \varphi'(x_0 - 0) &= \frac{i\mu}{2}(\varphi'(x_0 + 0) + \varphi'(x_0 - 0)).\end{aligned}$$

Una forma equivalente de las condiciones de frontera para el potencial delta magnético es

$$\varphi(x_0 + 0) = e^{i\eta}\varphi(x_0 - 0), \quad \varphi'(x_0 + 0) = e^{i\eta}\varphi'(x_0 - 0),$$

donde $\frac{\mu}{2} = \tan \frac{\eta}{2}$. La matriz A en este caso es

$$A = e^{i\eta}I,$$

donde I es la matriz identidad. A partir de cada uno de estos casos en el artículo se enfocan a las propiedades espectrales de cada potencial y de las condiciones en la frontera que establecen.

En el artículo [2] realizan una discusión acerca de los estados ligados y de dispersión de un potencial que consiste en un pozo formado por dos deltas de Dirac. Por una parte, el espectro discreto no presenta únicamente estados ligados, sino también resonancias. Por otra, las energías donde la transmisión es perfecta los cuales resultan ser una propiedad crítica de los casos simétricos están relacionados con los eigen-valores de estados pares. En los casos cuando el coeficiente de reflexión es distinto de cero se ha denominado anomalía de umbral [38].

En el artículo [37] se aborda el problema de los operadores de Schrödinger unidimensionales auto-adjuntos con interacciones puntuales y se consideran las extensiones auto-adjuntas del operador menos segunda derivada. Aquí realizan un estudio acerca de las características de la familia de cuatro parámetros considerando la teoría de distribuciones que describe toda clase de perturbaciones auto-adjuntas. Está demostrado que el conjunto de todas las perturbaciones auto-adjuntas del operador segunda derivada coinciden con la familia de operadores con las interacciones singulares. El problema es tratado con arreglos matriciales siendo ésta una de las aportaciones más importantes de este artículo. La consideración para un número infinito de interacciones puntuales ha sido investigada en [3, 50]. Acerca de la interpretación de la familia de parámetros se realiza una consideración relacionada con los coeficientes de los potenciales δ y δ' que definen la fuerza del campo de Gauge con singularidad localizado en el origen [37].

1.4. Planteamiento del problema

Consideremos el operador formal de Schrödinger

$$S_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + q_r(x) + q_s(x), \quad x \in \mathbb{R},$$

donde $q_r \in \mathcal{L}^\infty(\mathbb{R})$ representa un potencial regular, $q_s \in \mathcal{D}'(\mathbb{R})$ representa un potencial singular con soporte en 0 definido como

$$q_s(x) = \alpha\delta(x) + \beta\delta'(x), \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R}.$$

Un dominio del operador S_0 debe de consistir de aquellas funciones $u \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ tal que $S_0u \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Esta condición se satisface en particular si $u \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R} \setminus \{0\}) = \{u \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R} : \text{supp } u \in \mathbb{R} \setminus \{0\})\}$ y no se satisface para una función $u \in \mathcal{C}_0^\infty$ arbitraria. Por lo tanto, es natural considerar extensiones del operador de Schrödinger formal S_0 con un potencial singular q_s que actúa sobre funciones discontinuas. Sea

$$D_0(\mathbb{R}) := \mathcal{C}_0^\infty(\overline{\mathbb{R}_+}) \oplus \mathcal{C}_0^\infty(\overline{\mathbb{R}_-})$$

donde $\mathbb{R}_+ = \{x \in \mathbb{R} : x > 0\}$, $\mathbb{R}_- = \{x \in \mathbb{R} : x < 0\}$, $\mathcal{C}_0^\infty(\overline{\mathbb{R}_\pm})$ es el espacio de funciones en \mathcal{C}_0^∞ con restricciones en $\overline{\mathbb{R}_\pm}$, respectivamente. En el espacio $D_0(\mathbb{R})$ las distribuciones δ , δ' se extienden de la siguiente manera

$$\tilde{\delta}(u) = \frac{1}{2}(u_+ + u_-) \tag{1.4.1a}$$

$$\tilde{\delta}'(u) = -\frac{1}{2}(u'_+ + u'_-) \tag{1.4.1b}$$

donde $u_\pm := \lim_{x \rightarrow 0^\pm} u(x)$, $u'_\pm := \lim_{x \rightarrow 0^\pm} u'(x)$, se puede ver que $\tilde{\delta}(u) = \delta(u)$, $\tilde{\delta}'(u) = \delta'(u)$ a condición de que $u \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R})$.

Sea $u \in D_0(\mathbb{R})$. Diferenciando dos veces u en el sentido de las distribuciones obtenemos

$$u'' = \{u''\} + [u']_0 \delta + [u]_0 \delta' \tag{1.4.2}$$

donde $\{u''\}$ coincide con la derivada usual fuera del punto 0, y donde $[u]_0 := u_+ - u_-$, $[u']_0 := u'_+ - u'_-$ representan los saltos de la función y su derivada en el punto 0, respectivamente.

Las fórmulas (1.4.1) y (1.4.2) implican que si $u \in D_0(\mathbb{R})$, entonces

$$S_0u = -\{u''\} + V_r - [u']_0 \delta - [u]_0 \delta' + \alpha\delta(u) - \beta\delta'(u) \tag{1.4.3}$$

donde

$$\alpha\delta(u) = \alpha u(0)\delta = \frac{\alpha}{2}(u_+ - u_-)\delta,$$

y además

$$\beta\delta'(u) = -\beta u'(0)\delta' = -\frac{\beta}{2}(u'_+ - u'_-)\delta'.$$

Al agrupar los términos que involucran a δ y δ' en (1.4.3) tenemos

$$-[u']_0\delta + \alpha\delta(u) = \left(- (u'_+ - u'_-) + \frac{\alpha}{2}(u_+ - u_-)\right)\delta,$$

y

$$-[u]_0\delta' + \beta\delta'(u) = \left(- (u_+ - u_-) - \frac{\beta}{2}(u'_+ - u'_-)\right)\delta'.$$

Para que $S_0u \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ se necesitan que los términos anteriores se anulen, esto da lugar al siguiente sistema de ecuaciones

$$-u'_+ + u'_- + \frac{\alpha}{2}(u_+ - u_-) = 0, \quad (1.4.4)$$

$$-u_+ + u_- - \frac{\beta}{2}(u'_+ - u'_-) = 0. \quad (1.4.5)$$

Resolviendo el sistema para u_- y u'_- llegamos a las siguientes expresiones

$$u'_+ = \frac{\alpha u_- + \left(1 - \frac{\alpha\beta}{4}\right)u'_-}{1 + \frac{\alpha\beta}{4}},$$

$$u_+ = \frac{\left(1 - \frac{\alpha\beta}{4}\right)u_- - \beta u'_-}{1 + \frac{\alpha\beta}{4}}.$$

Por lo tanto $S_0u \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ si y sólo si u se rige por las siguientes condiciones en el punto 0

$$\begin{pmatrix} u_+ \\ u'_+ \end{pmatrix} = \frac{1}{1 + \frac{\alpha\beta}{4}} A_0 \begin{pmatrix} u_- \\ u'_- \end{pmatrix}, \quad \alpha\beta \neq -4,$$

donde A_0 es una matriz de 2×2 dada por

$$A_0 = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\alpha\beta}{4} & -\beta \\ \alpha & 1 - \frac{\alpha\beta}{4} \end{pmatrix}.$$

Si $q_s = \alpha\delta$ entonces la matriz correspondiente es $A_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha & 1 \end{pmatrix}$, mientras que si $q_s = \beta\delta'$ la matriz correspondiente sería $A_0 = \begin{pmatrix} 1 & -\beta \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$. Al considerar la extensión del operador nos permite modelar, por ejemplo, en electrodinámica la densidad de carga de un dipolo, además de esta manera la matriz de condiciones de frontera correspondiente involucra una situación física, por ejemplo, en la matriz correspondiente con el potencial delta de Dirac las condiciones en frontera involucran la continuidad de la función, y el salto α en su derivada; al considerar las condiciones de frontera apropiadas a este potencial puntual podemos determinar la probabilidad de que una partícula se refleje o tunelice a través de un potencial, también se pueden construir funciones de onda que se concentran alrededor del punto donde se localizan las interacciones, con la condición de salto en la derivada podemos representar el flujo de probabilidad. Al considerar un potencial periódico formado por un combo de deltas de Dirac, podemos llegar al modelo de Kronig-Penney.

El operador no-acotado \mathcal{H}_{A_0} en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ asociado con el operador formal de Schrödinger S_0 está definido por el operador $\mathcal{H}_{A_0} = -u'' + q_r$ en $\mathbb{R} \setminus \{0\}$ con dominio

$$\text{Dom}(\mathcal{H}_{A_0}) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{0\}) : \begin{pmatrix} u_+ \\ u'_+ \end{pmatrix} = \frac{1}{1 + \frac{\alpha\beta}{4}} A_0 \begin{pmatrix} u_- \\ u'_- \end{pmatrix} \right\}$$

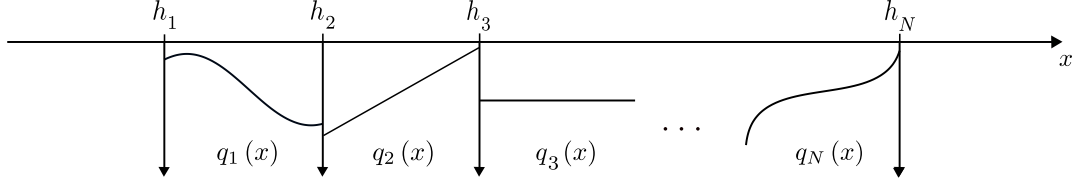


Figura 1.4.1. Representación de potenciales continuos a trozos e interacciones puntuales.

donde $H^2(\mathbb{R} \setminus \{0\}) = H^2(\mathbb{R}_+) \oplus H^2(\mathbb{R}_-)$ y $H^2(\mathbb{R}_\pm)$ es el espacio de Sobolev en \mathbb{R}_\pm . El operador \mathcal{H}_{A_0} es auto-adjunto en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ si y sólo si q_r es una función real-valuada y $\det A_0 = 1$. El siguiente teorema expresa este resultado.

Teorema 1.6 ([37]). Sea $q_r \in \mathcal{L}^\infty(\mathbb{R})$ un potencial regular, sea la matriz $A_0 = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{pmatrix}$ real tal que $\det A_0 = 1$. Entonces el operador $\mathcal{H}_0 = u'' + q_r$ en $\mathbb{R} \setminus \{0\}$ con dominio

$$\text{Dom}(\mathcal{H}_0) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{0\}) : \begin{pmatrix} u_+ \\ u'_+ \end{pmatrix} = A_0 \begin{pmatrix} u_- \\ u'_- \end{pmatrix} \right\}$$

es auto-adjunto en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.

El resultado de este teorema sigue siendo válido para los operadores de Schrödinger $\mathcal{H}_{\{A_1, \dots, A_N\}}$ definidos por los operadores de Schrödinger $\mathcal{H}_{A_0} = -u'' + q_r$ en $\mathbb{R} \setminus \{h_1, \dots, h_N\}$ donde h_i ($i = 1, \dots, N$) representan los puntos donde se localizan las interacciones. El dominio del operador es

$$\text{Dom}(\mathcal{H}_{\{A_1, \dots, A_N\}}) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1, \dots, h_N\}) : \begin{pmatrix} u_{i,+} \\ u'_{i,+} \end{pmatrix} = A_i \begin{pmatrix} u_{i,-} \\ u'_{i,-} \end{pmatrix}, i = 1, \dots, N \right\}$$

donde $A_i = \begin{pmatrix} \alpha_{11}^{(i)} & \alpha_{12}^{(i)} \\ \alpha_{21}^{(i)} & \alpha_{22}^{(i)} \end{pmatrix}$ son matrices reales con $\det A_i = 1$ [37].

Existen problemas de la Física que involucran interacciones puntuales que algunas veces se reducen a ecuaciones unidimensionales como en el caso de Schrödinger, Helmholtz, entre otros. Consideremos la Figura 1.4.1 donde las flechas representan las interacciones puntuales que se encuentran en los extremos de los intervalos que define el potencial continuo a trozos

$$q_r(x) = \begin{cases} q_0(x), & h_1 < x < h_N, \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

1.5. Aportaciones de la tesis

- Elaboración de un método matricial recursivo que involucra matrices de monodromía para resolver problemas espectrales unidimensionales relacionados con el operador de Schrödinger.
- Implementación del método de series de potencias del parámetro espectral (método SPPS) para el cálculo de las matrices de monodromía.
- Cálculo de una relación matricial que permita obtener una expresión apropiada para la ecuación de dispersión de los problemas de eigen-valores asociados a los operadores de Schrödinger con interacciones puntuales.
- Desarrollo de métodos numéricos para el análisis del espectro de los operadores de Schrödinger con interacciones puntuales.

1.6. Contenido de esta tesis

En este trabajo consideramos un problema que involucra al operador de Schrödinger con interacciones puntuales. Se obtiene un método matricial recursivo que permita encontrar los estados ligados del problema en el espacio $\mathcal{L}^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1, \dots, h_N\})$.

El esquema de esta Tesis es el siguiente:

Capítulo 1. Realizamos el planteamiento del problema, establecemos el objetivo general y los objetivos particulares de la Tesis así como la aportación de ésta. Establecemos notaciones importantes que usamos a lo largo del trabajo.

Capítulo 2. Presentamos los resultados de la búsqueda de artículos de investigación relacionados con el tema, para conocer la forma en la que han sido abordados problemas relacionados para determinar el espectro discreto de los operadores de Schrödinger con interacciones puntuales.

Capítulo 3. Establecemos los antecedentes teóricos necesarios para esta Tesis.

Capítulo 4. Obtenemos un método matricial recursivo para encontrar la ecuación de dispersión del problema planteado, a partir de considerar las relaciones matriciales existentes en los problemas con una, dos y finalmente N discontinuidades que provienen de las condiciones de frontera puntuales que establece el potencial singular. Además, mostramos cómo es la construcción del método para dos casos particulares cuando las restricciones de la solución de la ecuación de Schrödinger involucran soluciones generales exactas y el caso más general en donde usamos el método de series de potencias del parámetro espectral (SPPS) para encontrar las restricciones de la solución ante potenciales regulares arbitrarios. Para el cálculo de la ecuación de dispersión hacemos uso de un método matricial recursivo que involucra matrices de monodromía.

Capítulo 5. Mostramos resultados numéricos con distintos potenciales regulares y con diferentes condiciones de frontera matriciales que involucran interacciones puntuales tipo delta de Dirac δ ó su primera derivada δ' . Así como las posibles interpretaciones físicas que pueden tener.

Capítulo 6. Presentamos las conclusiones de esta Tesis y el trabajo a futuro.

Capítulo 7. Finalmente, mostramos los productos desarrollados y el trabajo que presentamos en el XVI Congreso Nacional de Ingeniería Electromecánica y de Sistemas.

Capítulo 2

Análisis de los estados ligados

Antes de comenzar recordemos que la representación matricial que proponemos nos permite abordar diferentes problemas con interacciones puntuales, como se muestra en los siguientes ejemplos:

Ejemplo 2.1. En el caso de tener un potencial singular que involucra una interacción tipo delta de Dirac

$$q_s(x) = \alpha_0 \delta(x), \quad \alpha_0 < 0,$$

la matriz que representa a los coeficientes de las condiciones de frontera toma la forma

$$A_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\alpha_0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Es fácil de ver esto al integrar la ecuación diferencial

$$-\frac{d^2}{dx^2}u(x) + \alpha_0 \delta(x)u(x) = \lambda u(x)$$

en una vecindad $(-\epsilon, \epsilon)$ del cero

$$\begin{aligned} -\int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} u(x) \right) dx + \alpha_0 \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \delta(x) u(x) dx &= \lambda \int_{-\epsilon}^{\epsilon} u(x) dx, \\ -\int_{-\epsilon}^{\epsilon} d \left(\frac{d}{dx} u(x) \right) + \alpha_0 u(0) &= \lambda \int_{-\epsilon}^{\epsilon} u(x) dx. \end{aligned}$$

La integral del lado izquierdo se reduce a

$$-\int_{-\epsilon}^{\epsilon} d \left(\frac{d}{dx} u(x) \right) = -\frac{d}{dx} u(x) \Big|_{-\epsilon}^{\epsilon} = -u'(\epsilon) + u'(-\epsilon).$$

En el límite cuando $\epsilon \rightarrow 0$ se observa que la derivada u' tiene un salto $x = 0$

$$-u'(0^+) + u'(0^-) + \alpha_0 u(0) = \lambda \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} u(x) dx,$$

donde la integral del lado derecho se anula por la continuidad de u en $x = 0$, es decir,

$$-u(0^+) + u(0^-) = 0.$$

Se obtiene por lo tanto el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} -u'(0^+) + u'(0^-) &= -\alpha_0 u(0), \\ -u(0^+) + u(0^-) &= 0, \end{aligned}$$

el cual se puede representar en forma matricial como sigue

$$\begin{pmatrix} u(0^+) \\ u'(0^+) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\alpha_0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(0^-) \\ u'(0^-) \end{pmatrix},$$

de donde se obtiene la matriz A_0 .

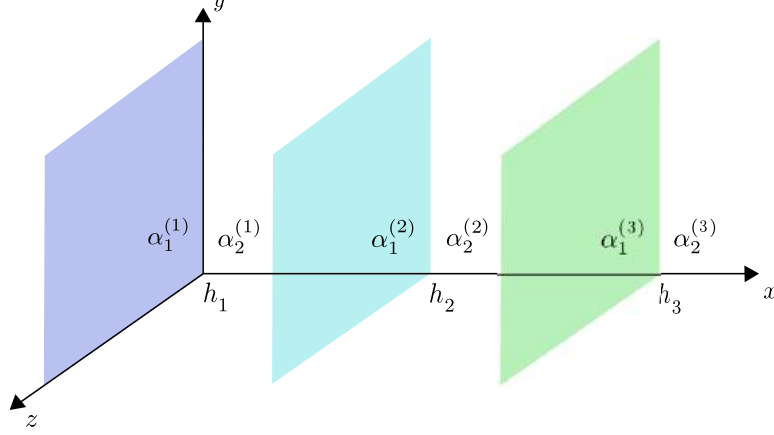


Figura 2.0.1. Representación de un medio estratificado con tres planos de discontinuidad.

Ejemplo 2.2. En la mecánica cuántica las condiciones de frontera a las que está sometida una onda de probabilidad ψ descrita por la ecuación de Schrödinger estacionaria cuando interactúa con un potencial $V(x)$ acotado el cual tiene un punto de discontinuidad en $x = h_i$ son [30]

$$\begin{aligned}\psi(h_i^+) &= \psi(h_i^-), \\ \psi'(h_i^+) &= \psi'(h_i^-).\end{aligned}$$

Estas condiciones se obtienen de integrar la ecuación de Schrödinger en una vecindad de $x = h_i$, tal como se hizo en el ejemplo anterior. Estas condiciones se pueden representar por la matriz de coeficientes

$$A_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Ejemplo 2.3. Consideremos el caso de las condiciones en la frontera del campo electromagnético en la interfaz de dos medios dieléctricos denotamos por I y II

$$\begin{aligned}(\mathbf{E}_I - \mathbf{E}_{II}) \times \mathbf{n} &= \mathbf{0}, & (\mathbf{D}_I - \mathbf{D}_{II}) \cdot \mathbf{n} &= 0, \\ (\mathbf{H}_I - \mathbf{H}_{II}) \times \mathbf{n} &= \mathbf{0}, & (\mathbf{B}_I - \mathbf{B}_{II}) \cdot \mathbf{n} &= 0,\end{aligned}$$

donde \mathbf{n} es un vector normal a la superficie que separa los dos medios, además \mathbf{E} , \mathbf{H} representan las intensidades de los campos eléctrico y magnético, respectivamente, y \mathbf{D} , \mathbf{B} son sus correspondientes densidades de flujo. Consideremos un medio estratificado a lo largo de la dirección x de un sistema de coordenadas rectangulares. Sea $x = h$ un plano de discontinuidad entre dos estratos dieléctricos diferentes, ver la Figura 2.0.1, entonces las condiciones en la frontera del campo electromagnético se convierten en

$$\begin{aligned}u(h^+) &= u(h^-), \\ \nu_2 u'(h^+) &= \nu_1 u'(h^-),\end{aligned}$$

donde u representa la componente E_y del campo eléctrico \mathbf{E} , o la componente H_y del campo magnético \mathbf{H} . En la descripción del campo eléctrico los coeficientes ν_2 y ν_1 representan a $\mu^{-1}(h^+)$ y $\mu^{-1}(h^-)$, respectivamente; mientras que en la descripción del campo magnético los coeficientes ν_2 y ν_1 corresponde a $\epsilon^{-1}(h^+)$ y $\epsilon^{-1}(h^-)$, respectivamente. Estas condiciones de frontera pueden representarse por la matriz de coeficientes

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \nu_1/\nu_2 \end{pmatrix}.$$

A continuación consideramos el análisis de los estados ligados (modos guiados en el caso electromagnético) de un sistema cuántico descrito por la ecuación formal unidimensional de Schrödinger

$$S_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + q_r(x) + q_s(x), \quad x \in \mathbb{R}$$

libre de unidades, donde q_s es un potencial singular descrito por distribuciones de primer orden y donde q_r es un potencial regular acotado. Asociado a este operador se determinará un operador no-acotado \mathcal{H} auto-adjunto en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ con base en las condiciones puntuales que establece el potencial singular. Posteriormente se establecerá un problema de eigen-valores los cuales representan las energías permitidas del sistema cuántico, y cuyas eigen-funciones normalizadas correspondientes representan las amplitudes de probabilidad de los estados ligados. El objetivo de este capítulo es obtener la ecuación de dispersión que permite calcular los eigen-valores de un problema dado. El problema se aborda primeramente considerando un potencial regular nulo, el cual se resuelve en la Sección 2.1, posteriormente se considera que el potencial regular tiene una forma escalonada tal como se aborda en la Sección 2.2, finalmente, se considera un potencial regular arbitrario definido por una función acotada y el problema se resuelve por medio del uso de matrices de monodromía como se observa en la Sección 2.3.

2.1. Problema de eigen-valores con un potencial regular nulo

En esta sección se considera que el potencial regular es nulo, es decir, $q_r(x) \equiv 0$, de tal forma que la interacción de la onda cuántica se realiza únicamente por medio de las interacciones puntuales definidas en el problema por el potencial singular. En la subsección 2.1.1 se analiza una sola interacción; posteriormente en la subsección 2.1.2 se consideran dos interacciones puntuales; en la subsección 2.1.3 generalizamos los resultados para un problema con N interacciones puntuales. Finalmente, en la subsección 2.1.4 realizamos la normalización de las eigen-funciones obtenidas.

2.1.1. Caso para una interacción puntual

Consideremos sólo una discontinuidad localizada en el punto $x = h_1$ como se muestra en la Figura 2.1.1 en donde representamos la interacción puntual localizada en el punto mediante una flecha que es la representación que encontramos con más frecuencia para las interacciones tipo delta de Dirac.

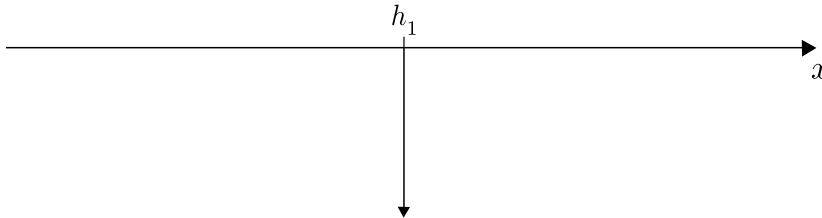


Figura 2.1.1. Potencial singular q_s con soporte en h_1 y potencial regular q_r nulo en el resto del eje.

El operador no-acotado asociado con la ecuación de Schrödinger S_0 es

$$\mathcal{H}_{A_1} = -\frac{d^2}{dx^2}, \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{h_1\}.$$

En el punto de discontinuidad las condiciones de frontera se representan en forma matricial como

$$\begin{pmatrix} u_{\text{II}}(h_1) \\ u'_{\text{II}}(h_1) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} u_{\text{I}}(h_1) \\ u'_{\text{I}}(h_1) \end{pmatrix}, \quad (2.1.1)$$

de tal forma que el dominio del operador \mathcal{H}_{A_1} está definido de la siguiente manera

$$\text{Dom}(\mathcal{H}_{A_1}) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1\}) : \begin{pmatrix} u_{\text{II}}(h_1) \\ u'_{\text{II}}(h_1) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} u_{\text{I}}(h_1) \\ u'_{\text{I}}(h_1) \end{pmatrix} \right\},$$

donde u_{I} representa la restricción de la solución de la ecuación diferencial (2.1.2) en la región $(-\infty, h_1)$ y u_{II} representa la restricción de la solución de la ecuación en la región (h_1, ∞) . La matriz de coeficientes asociada con la discontinuidad en el punto $x = h_1$ es

$$A_1 = \begin{pmatrix} \alpha_{11}^{(1)} & \alpha_{12}^{(1)} \\ \alpha_{21}^{(1)} & \alpha_{22}^{(1)} \end{pmatrix},$$

donde asumimos que los coeficientes $\alpha_{jk}^{(1)}$ son reales tales que $\det A_1 = 1$. Consideremos la ecuación que involucra eigen-valores

$$\mathcal{H}_{A_1} u = \lambda u, \quad u \in \text{Dom} (\mathcal{H}_{A_1}), \quad (2.1.2)$$

siendo $\lambda \in \mathbb{R}$ el parámetro espectral. Como el operador \mathcal{H}_{A_1} es auto-adjunto, su espectro es real 1.6. Sea $\lambda = -k^2$, donde $k > 0$, entonces en las regiones $(-\infty, h_1)$ y (h_1, ∞) se tienen dos soluciones linealmente independientes de tipo $e^{\pm kx}$, de modo que las soluciones generales tienen la forma siguiente

$$\begin{aligned} u_{\text{I}}(x) &= c_1 e^{kx} + d_1 e^{-kx}, & -\infty < x < h_1, \\ u_{\text{II}}(x) &= c_2 e^{kx} + d_2 e^{-kx}, & h_1 < x < \infty, \end{aligned}$$

donde c_1, c_2, d_1, d_2 son coeficientes arbitrarios. Al evaluar las soluciones anteriores y sus derivadas en el punto $x = h_1$ se tiene

$$\begin{aligned} u_{\text{I}}(h_1) &= c_1 e^{kh_1} + d_1 e^{-kh_1}, \\ u_{\text{II}}(h_1) &= c_2 e^{kh_1} + d_2 e^{-kh_1}, \\ u'_{\text{I}}(h_1) &= k (c_1 e^{kh_1} - d_1 e^{-kh_1}), \\ u'_{\text{II}}(h_1) &= k (c_2 e^{kh_1} - d_2 e^{-kh_1}), \end{aligned}$$

y al sustituir en (2.1.1) obtenemos

$$\begin{pmatrix} e^{kh_1} & e^{-kh_1} \\ ke^{kh_1} & -ke^{-kh_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_2 \\ d_2 \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} e^{kh_1} & e^{-kh_1} \\ ke^{kh_1} & -ke^{-kh_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ d_1 \end{pmatrix},$$

al considerar la forma explícita de la matriz A_1 se llega a la siguiente ecuación matricial

$$\begin{pmatrix} c_2 \\ d_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{kh_1} & e^{-kh_1} \\ ke^{kh_1} & -ke^{-kh_1} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \alpha_{11}^{(1)} & \alpha_{12}^{(1)} \\ \alpha_{21}^{(1)} & \alpha_{22}^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{kh_1} & e^{-kh_1} \\ ke^{kh_1} & -ke^{-kh_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ d_1 \end{pmatrix}, \quad (2.1.3)$$

de la multiplicación de las tres primeras matrices del lado derecho, resulta

$$\begin{pmatrix} c_2 \\ d_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2k} M_1 \begin{pmatrix} c_1 \\ d_1 \end{pmatrix}, \quad (2.1.4)$$

donde M_1 es una matriz cuadrada

$$M_1(k) = \begin{pmatrix} m_{11}^{(1)}(k) & m_{12}^{(1)}(k) \\ m_{21}^{(1)}(k) & m_{22}^{(1)}(k) \end{pmatrix}$$

y sus entradas están dadas explícitamente como funciones de k por

$$\begin{aligned} m_{11}^{(1)}(k) &= \alpha_{21}^{(1)} + k (\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{22}^{(1)} + \alpha_{12}^{(1)} k), \\ m_{12}^{(1)}(k) &= e^{-2kh_1} (\alpha_{21}^{(1)} - k (-\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{22}^{(1)} + \alpha_{12}^{(1)} k)), \\ m_{21}^{(1)}(k) &= e^{2kh_1} (-\alpha_{21}^{(1)} + k (\alpha_{11}^{(1)} - \alpha_{22}^{(1)} + \alpha_{12}^{(1)} k)), \\ m_{22}^{(1)}(k) &= -\alpha_{21}^{(1)} + k (\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{22}^{(1)} - \alpha_{12}^{(1)} k). \end{aligned}$$

Las soluciones que pertenecen a $H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1\})$ se consiguen al tomar $c_2 = 0$ y $d_1 = 0$. Esto transforma la ecuación matricial en

$$\begin{pmatrix} 0 \\ d_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2k} \begin{pmatrix} m_{11}^{(1)} & m_{12}^{(1)} \\ m_{21}^{(1)} & m_{22}^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2k} \begin{pmatrix} m_{11}^{(1)} \\ m_{21}^{(1)} \end{pmatrix} c_1.$$

Esta relación permite obtener la ecuación de dispersión del problema, es decir, la ecuación que define los eigen-valores del problema. Sea $\kappa(k)$ una función definida como

$$\kappa(k) = \alpha_{21}^{(1)} + k \left(\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{22}^{(1)} + \alpha_{12}^{(1)} k \right), \quad (2.1.5)$$

la cual coincide con la entrada $m_{11}^{(1)}$ de la ecuación matricial anterior. En este caso la ecuación de dispersión del problema es $\kappa(k) = 0$. Podemos ver que la ecuación de dispersión corresponde con un polinomio cuadrático

$$\alpha_{21}^{(1)} + k \left(\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{22}^{(1)} \right) + \alpha_{12}^{(1)} k^2 = 0, \quad \alpha_{12}^{(1)} \neq 0$$

y sus soluciones se obtienen en forma explícita como sigue

$$k = \frac{- \left(\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{22}^{(1)} \right) \pm \sqrt{\left(\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{22}^{(1)} \right)^2 - 4\alpha_{12}^{(1)} \alpha_{21}^{(1)}}}{2\alpha_{12}^{(1)}},$$

De estas dos soluciones se debe elegir aquella solución k_0 que satisfaga $k_0 > 0$. El eigen-valor asociado a $k_0 > 0$ es $\lambda_0 = -k_0^2$, y la eigen-función correspondiente es

$$u_0(x) = \begin{cases} e^{k_0 x}, & -\infty < x < h_1, \\ d_2 e^{-k_0 x}, & h_1 < x < \infty, \end{cases}$$

donde

$$d_2 = e^{2k_0 h_1} \left(-\alpha_{21}^{(1)} + k_0 \left(\alpha_{11}^{(1)} - \alpha_{22}^{(1)} + \alpha_{12}^{(1)} k_0 \right) \right).$$

Más adelante abordamos la normalización de esta eigen-función.

2.1.2. Caso para dos interacciones puntuales

Consideremos ahora que existen dos puntos de discontinuidad, el punto $x = h_1$ considerado en la sección anterior y un nuevo punto $x = h_2$, tal como se muestra en la Figura 2.1.2.

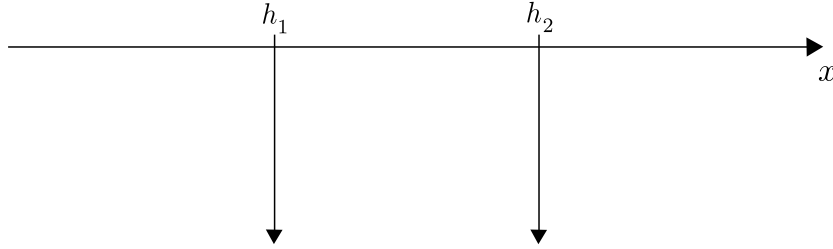


Figura 2.1.2. Potencial singular con soporte en los puntos $x = h_1$ y $x = h_2$, donde el potencial regular $q_r(x) = 0$, $x \in \mathbb{R} \setminus \{h_1, h_2\}$.

El operador no-acotado asociado con el operador de Schrödinger S_0 es

$$\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}} = -\frac{d^2}{dx^2}, \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{h_1, h_2\},$$

donde las condiciones de frontera en los puntos h_1 y h_2 tienen la forma matricial

$$\begin{pmatrix} u_{\text{II}}(h_1) \\ u'_{\text{II}}(h_1) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} u_{\text{I}}(h_1) \\ u'_{\text{I}}(h_1) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} u_{\text{III}}(h_2) \\ u'_{\text{III}}(h_2) \end{pmatrix} = A_2 \begin{pmatrix} u_{\text{II}}(h_2) \\ u'_{\text{II}}(h_2) \end{pmatrix}. \quad (2.1.6)$$

Entonces el dominio del operador $\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}}$ se expresa por el conjunto de funciones

$$\text{Dom}(\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}}) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1, h_2\}) : \begin{pmatrix} u(h_i^+) \\ u'(h_i^+) \end{pmatrix} = A_i \begin{pmatrix} u(h_i^-) \\ u'(h_i^-) \end{pmatrix}, i = 1, 2 \right\}.$$

De esta manera u_I denota la restricción de la solución para el intervalo $(-\infty, h_1)$, u_{II} es la restricción de la solución correspondiente al intervalo (h_1, h_2) , y u_{III} corresponde a la restricción en el intervalo (h_2, ∞) . Las matrices A_i asociadas con las interacciones en los puntos $x = h_1$ y $x = h_2$, son

$$A_1 = \begin{pmatrix} \alpha_{11}^{(1)} & \alpha_{12}^{(1)} \\ \alpha_{21}^{(1)} & \alpha_{22}^{(1)} \end{pmatrix}, \quad A_2 = \begin{pmatrix} \alpha_{11}^{(2)} & \alpha_{12}^{(2)} \\ \alpha_{21}^{(2)} & \alpha_{22}^{(2)} \end{pmatrix},$$

donde asumimos que los coeficientes $\alpha_{jk}^{(i)}$ son reales tales que $\det A_1 = 1$ y $\det A_2 = 1$. Consideremos la ecuación que involucra eigen-valores

$$\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}} u = \lambda u, \quad u \in \text{Dom} (\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}}). \quad (2.1.7)$$

Busquemos soluciones que pertenezcan a $\text{Dom} (\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}})$ para la ecuación diferencial (2.1.7). Sea $\lambda = -k^2$, de modo que busquemos los eigen-valores y eigen-funciones de la ecuación diferencial. En cada región se tienen dos soluciones linealmente independientes de tipo $e^{\pm kx}$, entonces las soluciones generales de las tres regiones tienen la forma siguiente

$$\begin{aligned} u_I(x) &= c_1 e^{kx} + d_1 e^{-kx}, & -\infty < x < h_1, \\ u_{II}(x) &= c_2 e^{kx} + d_2 e^{-kx}, & h_1 < x < h_2, \\ u_{III}(x) &= c_3 e^{kx} + d_3 e^{-kx}, & h_2 < x < \infty, \end{aligned}$$

donde $c_1, c_2, c_3, d_1, d_2, d_3$ son coeficientes arbitrarios. En la subsección anterior se calcularon los coeficientes c_2 y d_2 en términos de c_1 y d_1 . Ahora calcularemos los coeficientes c_3 y d_3 en términos de c_2 y d_2 , y aprovecharemos la representación matricial de las soluciones para finalmente expresar los coeficientes c_3 y d_3 en términos de c_1 y d_1 . Nuestro objetivo es llegar a una relación recursiva en donde expresemos los coeficientes en un punto de discontinuidad dado en términos de los coeficientes de la primera discontinuidad. Al evaluar las soluciones u_{II} y u_{III} , y sus derivadas en el punto $x = h_2$ se tiene

$$\begin{aligned} u_{II}(h_2) &= c_2 e^{kh_2} + d_2 e^{-kh_2}, \\ u_{III}(h_2) &= c_3 e^{kh_2} + d_3 e^{-kh_2}, \\ u'_{II}(h_2) &= k(c_2 e^{kh_2} - d_2 e^{-kh_2}), \\ u'_{III}(h_2) &= k(c_3 e^{kh_2} - d_3 e^{-kh_2}), \end{aligned}$$

y al sustituir en (2.1.6) obtenemos

$$\begin{pmatrix} c_3 e^{kh_2} + d_3 e^{-kh_2} \\ kc_3 e^{kh_2} - kd_3 e^{-kh_2} \end{pmatrix} = A_2 \begin{pmatrix} c_2 e^{kh_2} + d_2 e^{-kh_2} \\ kc_2 e^{kh_2} - kd_2 e^{-kh_2} \end{pmatrix},$$

lo cual permite representar los coeficientes c_3 y d_3 en términos de c_2 y d_2 en forma matricial. Al hacer operaciones matriciales se llega a lo siguiente

$$\begin{pmatrix} c_3 \\ d_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{kh_2} & e^{-kh_2} \\ ke^{kh_2} & -ke^{-kh_2} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \alpha_{11}^{(2)} & \alpha_{12}^{(2)} \\ \alpha_{21}^{(2)} & \alpha_{22}^{(2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{kh_2} & e^{-kh_2} \\ ke^{kh_2} & -ke^{-kh_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_2 \\ d_2 \end{pmatrix}.$$

De la multiplicación de las tres primeras matrices del lado derecho, obtenemos

$$\begin{pmatrix} c_3 \\ d_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2k} M_2 \begin{pmatrix} c_2 \\ d_2 \end{pmatrix}, \quad (2.1.8)$$

donde las entradas de la matriz M_2 son

$$\begin{aligned} m_{11}^{(2)}(k) &= \alpha_{21}^{(2)} + k(\alpha_{11}^{(2)} + \alpha_{22}^{(2)} + \alpha_{12}^{(2)} k), \\ m_{12}^{(2)}(k) &= e^{-2kh_2} (\alpha_{21}^{(2)} - k(-\alpha_{11}^{(2)} + \alpha_{22}^{(2)} + \alpha_{12}^{(2)} k)), \\ m_{21}^{(2)}(k) &= e^{2kh_2} (-\alpha_{21}^{(2)} + k(\alpha_{11}^{(2)} - \alpha_{22}^{(2)} + \alpha_{12}^{(2)} k)), \\ m_{22}^{(2)}(k) &= -\alpha_{21}^{(2)} + k(\alpha_{11}^{(2)} + \alpha_{22}^{(2)} - \alpha_{12}^{(2)} k). \end{aligned}$$

Recordemos que los coeficientes c_3 y d_3 están expresados en términos de c_1 y d_1 , dados por (2.1.4), por lo tanto al acoplar esta expresión con (2.1.8) obtenemos una forma de calcular los coeficientes c_3 y d_3 en términos de c_1 y d_1 , es decir

$$\begin{pmatrix} c_3 \\ d_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{4k^2} M_2 M_1 \begin{pmatrix} c_1 \\ d_1 \end{pmatrix}.$$

Con el objeto de que la solución de la ecuación de Schrödinger (2.1.7) pertenezca al espacio $H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1, h_2\})$ se necesita que $c_3 = 0$ y $d_1 = 0$. Esto convierte la ecuación anterior en

$$\begin{pmatrix} 0 \\ d_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{4k^2} M_2 M_1 \begin{pmatrix} c_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{4k^2} \begin{pmatrix} m_{11}^{(2)} m_{11}^{(1)} + m_{12}^{(2)} m_{21}^{(1)} & m_{11}^{(2)} m_{12}^{(1)} + m_{12}^{(2)} m_{22}^{(1)} \\ m_{21}^{(2)} m_{11}^{(1)} + m_{22}^{(2)} m_{21}^{(1)} & m_{21}^{(2)} m_{12}^{(1)} + m_{22}^{(2)} m_{22}^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

De esta ecuación matricial resulta la relación de dispersión $\kappa(k) = 0$ del problema con dos discontinuidades, donde la función κ está definida por

$$\kappa(k) = m_{11}^{(2)}(k) m_{11}^{(1)}(k) + m_{12}^{(2)}(k) m_{21}^{(1)}(k).$$

Sea k_i un cero de la ecuación $\kappa(k) = 0$, entonces el eigen-valor asociado es $\lambda_i = -k_i^2$ y la eigen-función correspondiente toma la siguiente forma

$$u_i(x) = \begin{cases} e^{k_i x}, & -\infty < x < h_1, \\ c_2 e^{k_i x} + d_2 e^{-k_i x}, & h_1 < x < h_2, \\ d_3 e^{-k_i x}, & h_2 < x < \infty. \end{cases}$$

donde los coeficientes c_2 , d_2 y d_3 son calculados de manera explícita a partir de la ecuación matricial anterior.

2.1.3. Caso para N interacciones

Considerando ahora el caso de N interacciones puntuales localizadas en los puntos h_1, \dots, h_N como podemos ver en la Figura 2.1.3.

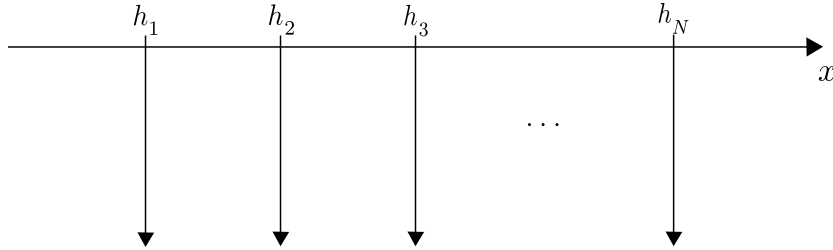


Figura 2.1.3. Representación para un potencial singular con soporte en el conjunto de puntos $\{h_1, \dots, h_N\}$.

El operador no-acotado asociado al operador de Schrödinger S_0 se define como

$$\mathcal{H}_{\{A_1, \dots, A_N\}} = -\frac{d^2}{dx^2}, \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{h_1, \dots, h_N\}$$

donde

$$\begin{pmatrix} u(h_i^+) \\ u'(h_i^+) \end{pmatrix} = A_i \begin{pmatrix} u(h_i^-) \\ u'(h_i^-) \end{pmatrix}$$

representan las condiciones en frontera en cada punto h_i ($i = 1, \dots, N$). Las entradas de las matrices A_i asociadas a los puntos h_i son números reales tales que $\det A_i = 1$ ($i = 1, \dots, N$).

El dominio del operador $\mathcal{H}_{\{A_1, \dots, A_N\}}$ está dado como

$$\text{Dom}(\mathcal{H}_{\{A_1, \dots, A_N\}}) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1, \dots, h_N\}) : \begin{pmatrix} u(h_i^+) \\ u'(h_i^+) \end{pmatrix} = A_i \begin{pmatrix} u(h_i^-) \\ u'(h_i^-) \end{pmatrix}, i = 1, \dots, N \right\},$$

donde $u(h_i^+)$ representa la restricción de la solución a la derecha del punto h_i , y $u(h_i^-)$ es la restricción a la izquierda de h_i . Ahora consideremos el problema de eigen-valores

$$\mathcal{H}_{\{A_1, \dots, A_N\}} u = \lambda u, \quad u \in \text{Dom}(\mathcal{H}_{\{A_1, \dots, A_N\}}), \quad (2.1.9)$$

donde $\lambda \in \mathbb{R}$ es el parámetro espectral que se elige como $\lambda = -k^2$, $k > 0$. En este problema el eje real se divide en $N + 1$ secciones y las correspondientes restricciones de la solución de la ecuación de Schrödinger en las diferentes secciones se denotan por: u_1 de $(-\infty, h_1)$, u_2 en la región de (h_1, h_2) , y así sucesivamente hasta u_{N+1} en la región (h_N, ∞) . Teniendo en cuenta la representación matricial de la subsección anterior se puede establecer la relación que existe entre los coeficientes en la región (h_N, ∞) con los de la región (h_{N-1}, h_N) , es decir

$$\begin{pmatrix} c_{N+1} \\ d_{N+1} \end{pmatrix} = \frac{1}{2k} M_N \begin{pmatrix} c_N \\ d_N \end{pmatrix} \quad (2.1.10)$$

donde las entradas de la matriz M_N son

$$\begin{aligned} m_{11}^{(N)}(k) &= \alpha_{21}^{(N)} + k \left(\alpha_{11}^{(N)} + \alpha_{22}^{(N)} + \alpha_{12}^{(N)} k \right), \\ m_{12}^{(N)}(k) &= e^{-2kh_N} \left(\alpha_{21}^{(N)} - k \left(-\alpha_{11}^{(N)} + \alpha_{22}^{(N)} + \alpha_{12}^{(N)} k \right) \right), \\ m_{21}^{(N)}(k) &= e^{2kh_N} \left(-\alpha_{21}^{(N)} + k \left(\alpha_{11}^{(N)} - \alpha_{22}^{(N)} + \alpha_{12}^{(N)} k \right) \right), \\ m_{22}^{(N)}(k) &= -\alpha_{21}^{(N)} + k \left(\alpha_{11}^{(N)} + \alpha_{22}^{(N)} - \alpha_{12}^{(N)} k \right). \end{aligned}$$

Considerando (2.1.10) como una expresión recursiva podemos observar las siguientes relaciones

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} c_{N+1} \\ d_{N+1} \end{pmatrix} &= \frac{1}{2k} M_N \begin{pmatrix} c_N \\ d_N \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} c_{N+1} \\ d_{N+1} \end{pmatrix} &= \frac{1}{4k^2} M_N M_{N-1} \begin{pmatrix} c_{N-1} \\ d_{N-1} \end{pmatrix}, \\ &\vdots \\ \begin{pmatrix} c_{N+1} \\ d_{N+1} \end{pmatrix} &= \frac{1}{2Nk^N} M_N M_{N-1} \cdots M_1 \begin{pmatrix} c_1 \\ d_1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

En el N -ésimo caso el producto de las matrices M_i da lugar a una matriz global que podemos definir de la siguiente manera

$$\mathbf{M} = M_N M_{N-1} M_{N-2} \cdots M_1 = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}.$$

Con el objeto de que las soluciones pertenezcan al espacio $H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1, \dots, h_N\})$ se necesita que $c_{N+1} = 0$ y $d_1 = 0$. Esto da lugar a la ecuación matricial

$$\begin{pmatrix} 0 \\ d_{N+1} \end{pmatrix} = \frac{1}{2Nk^N} \mathbf{M} \begin{pmatrix} c_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{c_1}{2Nk^N} \begin{pmatrix} m_{11} \\ m_{21} \end{pmatrix}.$$

La igualdad matricial da lugar a la ecuación $m_{11}(k) = 0$ que representa la ecuación de dispersión del problema espectral. Observe que la dependencia de la entrada m_{11} con el parámetro k está escrita explícitamente. Definamos la función

$$\kappa(k) = m_{11}(k),$$

la cual es analítica en el plano k -complejo, entonces la ecuación de dispersión del problema puede expresarse como $\kappa(k) = 0$. Por tanto los ceros de esta ecuación k_i , que satisfacen $k_i > 0$ están asociados a los eigen-valores λ_i del problema espectral de la siguiente manera

$$\lambda_i = -k_i^2, \quad i = 1, 2, \dots$$

y las correspondientes eigen-funciones toman la forma siguiente

$$u_i(x) := \begin{cases} c_1 e^{k_i x}, & -\infty < x < h_1, \\ c_2 e^{k_i x} + d_2 e^{-k_i x}, & h_1 < x < h_2, \\ \vdots & \vdots \\ c_N e^{k_i x} + d_N e^{-k_i x}, & h_{N-1} < x < h_N, \\ d_{N+1} e^{-k_i x}, & h_N < x < \infty, \end{cases} \quad (2.1.11)$$

y donde los coeficientes c_i , d_i se determinan a partir de las relaciones matriciales anteriores.

2.1.4. Normalización de las eigen-funciones

Las eigen-funciones normalizadas de las ecuaciones (2.1.2), (2.1.7) y (2.1.9) que involucran una, dos ó N discontinuidades, respectivamente, se denotarán como $\varphi_i(x)$, y se calcularán a partir de las soluciones $u_i(x)$ definidas por la función continua a trozos (2.1.11) donde k_i es un cero de la ecuación de dispersión $\kappa(k) = 0$ del problema espectral correspondiente. Las eigen-funciones se normalizan considerando la norma del espacio $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$

$$\|u\|_{\mathcal{L}^2} := \left(\int_{-\infty}^{\infty} |u(x)|^2 dx \right)^{1/2}.$$

Sea L_i la constante de normalización asociada con la eigen-función u_i definida en (2.1.11), la cual se calcula explícitamente por la fórmula

$$L_i := \left(\int_{-\infty}^{h_1} |u_i(x)|^2 dx + \int_{h_1}^{h_2} |u_i(x)|^2 dx + \dots + \int_{h_N}^{\infty} |u_i(x)|^2 dx \right)^{1/2}.$$

Entonces las eigen-funciones normalizadas quedan definidas como

$$\varphi_i(x) := \frac{1}{L_i} \begin{cases} e^{k_i x}, & -\infty < x < h_1, \\ c_2 e^{k_i x} + d_2 e^{-k_i x}, & h_1 < x < h_2, \\ \vdots & \vdots \\ c_N e^{k_i x} + d_N e^{-k_i x}, & h_{N-1} < x < h_N, \\ d_{N+1} e^{-k_i x}, & h_N < x < \infty. \end{cases}$$

2.2. Análisis de los eigen-valores de un sistema con potenciales escalonados e interacciones puntuales

En esta sección se considera el operador formal de Schrödinger

$$S_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + q_r(x) + q_s(x), \quad x \in \mathbb{R},$$

donde q_r es un potencial regular constante a trozos, y donde q_s representa un potencial singular definido en términos de interacciones puntuales tales como deltas de Dirac y sus derivadas. Se obtienen la ecuación de dispersión del problema de eigen-valores y las eigen-funciones correspondientes. En la Subsección 2.2.1 abordamos este problema cuando existe solamente una interacción puntual; después en la Subsección 2.2.2 ampliamos el análisis a dos discontinuidades; y por último, en la Subsección 2.2.3 analizamos el caso cuando se tiene N interacciones puntuales.

2.2.1. Solución del problema con valores en la frontera ante un punto de discontinuidad

Consideremos el caso cuando el potencial singular consiste de una sola interacción puntual con soporte en el punto $x = h_1$. El potencial regular q_r se define por la función constante a trozos

$$q_r(x) = \begin{cases} q_1, & -\infty < x < h_1, \\ q_2, & h_1 < x < \infty, \end{cases}$$

donde $q_1 < 0$ y $q_2 < 0$ son los niveles que toma el potencial en el eje real, ver Figura 2.2.1.

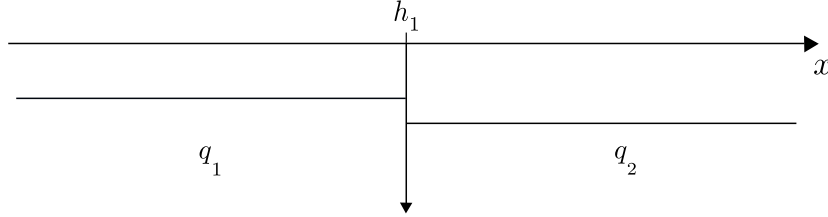


Figura 2.2.1. Potencial singular q_s con soporte en h_1 y potencial regular q_r con dos niveles diferentes.

El operador no-acotado asociado con el operador S_0 es

$$\mathcal{H}_{A_1} = -\frac{d^2}{dx^2} + q_r(x), \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{h_1\}$$

y en el punto h_1 se establecen las siguientes condiciones en la frontera

$$\begin{pmatrix} u_{\text{II}}(h_1) \\ u'_{\text{II}}(h_1) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} u_{\text{I}}(h_1) \\ u'_{\text{I}}(h_1) \end{pmatrix}, \quad (2.2.1)$$

donde A_1 es la matriz de coeficientes asociada con la interacción puntual en h_1 definida como

$$A_1 = \begin{pmatrix} \alpha_{11}^{(1)} & \alpha_{12}^{(1)} \\ \alpha_{21}^{(1)} & \alpha_{22}^{(1)} \end{pmatrix}$$

la cual satisface $\det A_1 = 1$. En las condiciones (2.2.1) las soluciones u_{I} y u_{II} corresponden a las restricciones de la solución de la ecuación de Schrödinger en las regiones $(-\infty, h_1)$ y (h_1, ∞) , respectivamente. El dominio de este operador \mathcal{H}_{A_1} es definido como

$$\text{Dom}(\mathcal{H}_{A_1}) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1\}) : \begin{pmatrix} u(h_1^+) \\ u'(h_1^+) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} u(h_1^-) \\ u'(h_1^-) \end{pmatrix} \right\}.$$

Consideremos la ecuación que involucra eigen-valores

$$\mathcal{H}_{A_1} u = \lambda u, \quad u \in \text{Dom}(\mathcal{H}_{A_1}) \quad (2.2.2)$$

y encontremos las soluciones de este problema (las eigen-funciones) siguiendo un procedimiento similar al descrito en las subsecciones anteriores. Sea $\lambda = -k^2 \in \mathbb{R}$ el parámetro espectral. En cada región la ecuación diferencial tiene dos soluciones linealmente independientes de tipo $e^{\pm\gamma_i x}$, donde $\gamma_i(k) := \sqrt{k^2 - q_i}$ ($i = 1, 2$) está asociada al valor del potencial q_i . Más precisamente, las soluciones generales en las dos regiones tienen la forma siguiente

$$\begin{aligned} u_{\text{I}}(x) &= c_1 e^{\gamma_1 x} + d_1 e^{-\gamma_1 x}, & -\infty < x < h_1, \\ u_{\text{II}}(x) &= c_2 e^{\gamma_2 x} + d_2 e^{-\gamma_2 x}, & h_1 < x < \infty, \end{aligned}$$

donde c_i, d_i ($i = 1, 2$) son coeficientes arbitrarios a determinar. Al evaluar las soluciones anteriores y sus derivadas en el punto $x = h_1$ se tiene

$$\begin{aligned} u_I(h_1) &= c_1 e^{\gamma_1 h_1} + d_1 e^{-\gamma_1 h_1}, \\ u_{II}(h_1) &= c_2 e^{\gamma_2 h_1} + d_2 e^{-\gamma_2 h_1}, \\ u'_I(h_1) &= \gamma_1 (c_1 e^{\gamma_1 h_1} - d_1 e^{-\gamma_1 h_1}), \\ u'_{II}(h_1) &= \gamma_2 (c_2 e^{\gamma_2 h_1} - d_2 e^{-\gamma_2 h_1}). \end{aligned}$$

Sustituyendo estas expresiones en (2.2.1) tenemos la ecuación matricial

$$\begin{pmatrix} c_2 e^{\gamma_2 h_1} + d_2 e^{-\gamma_2 h_1} \\ \gamma_2 (c_2 e^{\gamma_2 h_1} - d_2 e^{-\gamma_2 h_1}) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} c_1 e^{\gamma_1 h_1} + d_1 e^{-\gamma_1 h_1} \\ \gamma_1 (c_1 e^{\gamma_1 h_1} - d_1 e^{-\gamma_1 h_1}) \end{pmatrix}$$

que se puede expresar de la siguiente manera

$$\begin{pmatrix} e^{\gamma_2 h_1} & e^{-\gamma_2 h_1} \\ \gamma_2 e^{\gamma_2 h_1} & -\gamma_2 e^{-\gamma_2 h_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_2 \\ d_2 \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} e^{\gamma_1 h_1} & e^{-\gamma_1 h_1} \\ \gamma_1 e^{\gamma_1 h_1} & -\gamma_1 e^{-\gamma_1 h_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ d_1 \end{pmatrix}.$$

Esto permite que los coeficientes c_2, d_2 se expresen en términos de los coeficientes c_1, d_1 como sigue

$$\begin{pmatrix} c_2 \\ d_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\gamma_2 h_1} & e^{-\gamma_2 h_1} \\ \gamma_2 e^{\gamma_2 h_1} & -\gamma_2 e^{-\gamma_2 h_1} \end{pmatrix}^{-1} A_1 \begin{pmatrix} e^{\gamma_1 h_1} & e^{-\gamma_1 h_1} \\ \gamma_1 e^{\gamma_1 h_1} & -\gamma_1 e^{-\gamma_1 h_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ d_1 \end{pmatrix}. \quad (2.2.3)$$

De acuerdo con la ecuación matricial anterior, es necesario calcular la matriz inversa que se indica en el lado derecho de la ecuación y realizar los productos matriciales indicados. Después de realizar las operaciones la ecuación (2.2.3) se puede representar como

$$\begin{pmatrix} c_2 \\ d_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2\gamma_2} M_1 \begin{pmatrix} c_1 \\ d_1 \end{pmatrix}, \quad (2.2.4)$$

donde

$$M_1(k) = \begin{pmatrix} m_{11}^{(1)}(k) & m_{12}^{(1)}(k) \\ m_{21}^{(1)}(k) & m_{22}^{(1)}(k) \end{pmatrix}$$

es una matriz asociada a la discontinuidad en $x = h_1$. Las entradas de la matriz M_1 están dadas de manera explícita como

$$\begin{aligned} m_{11}^{(1)}(k) &= e^{h_1(\gamma_1(k) - \gamma_2(k))} \left(\alpha_{21}^{(1)} + \alpha_{22}^{(1)} \gamma_1(k) + \left(\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{12}^{(1)} \gamma_1(k) \right) \gamma_2(k) \right), \\ m_{12}^{(1)}(k) &= e^{-h_1(\gamma_1(k) + \gamma_2(k))} \left(\alpha_{21}^{(1)} - \alpha_{22}^{(1)} \gamma_1(k) + \left(\alpha_{11}^{(1)} - \alpha_{12}^{(1)} \gamma_1(k) \right) \gamma_2(k) \right), \\ m_{21}^{(1)}(k) &= e^{h_1(\gamma_1(k) + \gamma_2(k))} \left(-\alpha_{21}^{(1)} - \alpha_{22}^{(1)} \gamma_1(k) + \left(\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{12}^{(1)} \gamma_1(k) \right) \gamma_2(k) \right), \\ m_{22}^{(1)}(k) &= e^{-h_1(\gamma_1(k) - \gamma_2(k))} \left(-\alpha_{21}^{(1)} + \alpha_{22}^{(1)} \gamma_1(k) + \left(\alpha_{11}^{(1)} - \alpha_{12}^{(1)} \gamma_1(k) \right) \gamma_2(k) \right). \end{aligned}$$

El procedimiento mostrado permite calcular dos de los cuatro coeficientes arbitrarios de las soluciones generales en las regiones I y II, en efecto la ecuación (2.2.4) determina dos de los coeficientes (c_2 y d_2) en términos de los otros dos (c_1 y d_1). Para determinar los dos coeficientes restantes es necesario aplicar las condiciones asintóticas en el infinito que establece el espacio $H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1\})$. Observe que las soluciones obtenidas son del tipo exponencial, para que satisfagan las condiciones asintóticas en el infinito es necesario que sus exponentes sean números reales, es decir

$$\gamma_i \in \mathbb{R}, \quad \Rightarrow \quad k^2 - q_i \geq 0$$

de otra manera las exponenciales serían oscilatorias y no pertenecerían al espacio $H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1\})$. Por lo tanto, es necesario que se satisfagan las siguientes condiciones simultáneamente: $k^2 - q_1 \geq 0$ y $k^2 - q_2 \geq 0$. Esto implica que

$$k^2 \geq \min\{q_2, q_1\}. \quad (2.2.5)$$

Si k^2 satisface la condición (2.2.5) entonces las soluciones que pertenecen al espacio $H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1\})$ se obtienen a partir de fijar los coeficientes $c_2 = 0$ y $d_1 = 0$. Esto conduce a la siguiente ecuación matricial

$$\begin{pmatrix} 0 \\ d_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2\gamma_2} M_1 \begin{pmatrix} c_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{c_1}{2\gamma_2} \begin{pmatrix} m_{11}^{(1)}(k) \\ m_{21}^{(1)}(k) \end{pmatrix}.$$

Al igualar entradas correspondientes de la ecuación se obtiene la ecuación de dispersión $\kappa(k) = 0$ del problema, donde κ es una función definida como

$$\kappa(k) = \alpha_{21}^{(1)} + \alpha_{22}^{(1)} \gamma_1(k) + \left(\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{12}^{(1)} \gamma_1(k) \right) \gamma_2(k), \quad (2.2.6)$$

la cual coincide con la entrada $m_{11}(k)$ de la matriz M_1 . Los ceros de la ecuación $\kappa(k) = 0$ determinan los eigen-valores del problema espectral.

Observación 2.1. En el caso cuando los niveles del potencial son nulos, es decir, cuando $q_1 \equiv 0$ y $q_2 \equiv 0$ resulta que γ_1 y γ_2 coinciden con k de modo que la relación de dispersión (2.2.6) en efecto se reduce con la relación de dispersión (2.1.5) del problema con potencial nulo abordado en la subsección 2.1.1.

Sea k_i un cero de la ecuación $\kappa(k) = 0$, que satisface la condición (2.2.5). El eigen-valor correspondiente del problema es $\lambda_i = -k_i^2$, que está asociado a la eigen-función definida como

$$u_i(x) = \begin{cases} e^{\gamma_1(k_i)x}, & -\infty < x < h_1, \\ d_2(k_i) e^{-\gamma_2(k_i)x}, & h_1 < x < \infty, \end{cases} \quad (2.2.7)$$

donde

$$d_2(k) = e^{-h_1(\gamma_1(k) + \gamma_2(k))} \left(\alpha_{21}^{(1)} - \alpha_{22}^{(1)} \gamma_1(k) + \left(\alpha_{11}^{(1)} - \alpha_{12}^{(1)} \gamma_1(k) \right) \gamma_2(k) \right).$$

2.2.2. Solución del problema con valores en la frontera ante dos puntos de discontinuidad

Consideremos ahora que existen dos puntos de discontinuidad, el punto $x = h_1$ considerado en la subsección anterior y un nuevo punto $x = h_2$. En este caso q_r está definido como

$$q_r(x) = \begin{cases} q_1, & -\infty < x < h_1, \\ q_2, & h_1 < x < h_2, \\ q_3, & h_2 < x < \infty, \end{cases}$$

donde $q_1 < 0$, $q_2 < 0$ y $q_3 < 0$ representan los niveles del potencial regular del operador de Schrödinger S_0 como podemos ver en la Figura 2.2.2.

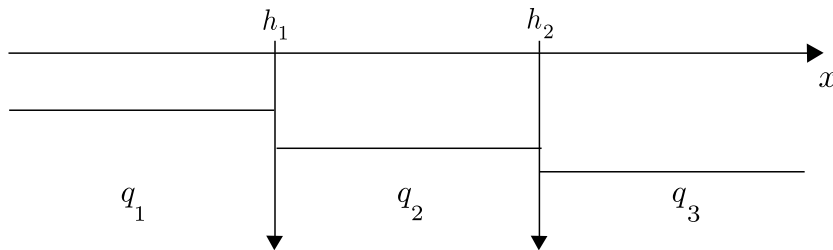


Figura 2.2.2. Representación del potencial singular q_s y del potencial regular q_r constante a trozos.

El operador no-acotado asociado al operador de Schrödinger S_0 está dado por

$$\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}} = -\frac{d^2}{dx^2} + q_r(x), \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{h_1, h_2\},$$

las condiciones de frontera en h_1 y h_2 representadas de forma matricial son

$$\begin{pmatrix} u_{\text{II}}(h_1) \\ u'_{\text{II}}(h_1) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} u_{\text{I}}(h_1) \\ u'_{\text{I}}(h_1) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} u_{\text{III}}(h_2) \\ u'_{\text{III}}(h_2) \end{pmatrix} = A_2 \begin{pmatrix} u_{\text{II}}(h_2) \\ u'_{\text{II}}(h_2) \end{pmatrix}, \quad (2.2.8)$$

donde las entradas de las matrices A_1, A_2 son tales que $\det A_1 = 1, \det A_2 = 1$. El dominio del operador $\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}}$ está definido como

$$\text{Dom} (\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}}) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1, h_2\}) : \begin{pmatrix} u(h_i^+) \\ u'(h_i^+) \end{pmatrix} = A_i \begin{pmatrix} u(h_i^-) \\ u'(h_i^-) \end{pmatrix}, i = 1, 2 \right\}.$$

Consideremos el siguiente problema de eigen-valores

$$\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}} u = \lambda u, \quad u \in \text{Dom} (\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}}) \quad (2.2.9)$$

donde $\lambda = -k^2 \in \mathbb{R}$ es el parámetro espectral, el cual satisface la siguiente condición

$$k^2 \geq \text{mín} \{q_3, q_2, q_1\}. \quad (2.2.10)$$

Al considerar las soluciones de la ecuación diferencial (2.2.9) el eje real se divide ahora en tres secciones, de tal forma que la restricción de las soluciones en cada región se denotarán como u_{I} para el intervalo $(-\infty, h_1)$, u_{II} para el intervalo (h_1, h_2) , y u_{III} para el intervalo (h_2, ∞) . Busquemos soluciones que pertenecen a $\text{Dom} (\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}})$. En cada región la solución general de la ecuación diferencial se compone de dos soluciones linealmente independientes del tipo $e^{\pm\gamma_i x}$ donde $\gamma_i := \sqrt{k^2 - q_i}$ ($i = 1, 2, 3$), es decir,

$$\begin{aligned} u_{\text{I}}(x) &= c_1 e^{\gamma_1 x} + d_1 e^{-\gamma_1 x}, & -\infty < x < h_1, \\ u_{\text{II}}(x) &= c_2 e^{\gamma_2 x} + d_2 e^{-\gamma_2 x}, & h_1 < x < h_2, \\ u_{\text{III}}(x) &= c_3 e^{\gamma_3 x} + d_3 e^{-\gamma_3 x}, & h_2 < x < \infty, \end{aligned}$$

donde c_i, d_i son coeficientes arbitrarios. En la Subsección (2.2.1) obtuvimos la relación entre los coeficientes c_2 y d_2 en términos de c_1 y d_1 . Lo siguiente es calcular los coeficientes c_3 y d_3 en términos de c_2 y d_2 y posteriormente, a través de la representación matricial, expresar los coeficientes c_3 y d_3 en términos de c_1 y d_1 .

Al evaluar las condiciones de frontera en el punto $x = h_2$ necesitamos los términos

$$\begin{aligned} u_{\text{II}}(h_2) &= c_2 e^{\gamma_2 h_2} + d_2 e^{-\gamma_2 h_2}, \\ u_{\text{III}}(h_2) &= c_3 e^{\gamma_3 h_2} + d_3 e^{-\gamma_3 h_2}, \\ u'_{\text{II}}(h_2) &= \gamma_2 (c_2 e^{\gamma_2 h_2} - d_2 e^{-\gamma_2 h_2}), \\ u'_{\text{III}}(h_2) &= \gamma_3 (c_3 e^{\gamma_3 h_2} - d_3 e^{-\gamma_3 h_2}), \end{aligned}$$

al sustituir en (2.2.8) obtenemos

$$\begin{pmatrix} c_3 e^{\gamma_3 h_2} + d_3 e^{-\gamma_3 h_2} \\ \gamma_3 (c_3 e^{\gamma_3 h_2} - d_3 e^{-\gamma_3 h_2}) \end{pmatrix} = A_2 \begin{pmatrix} c_2 e^{\gamma_2 h_2} + d_2 e^{-\gamma_2 h_2} \\ \gamma_2 (c_2 e^{\gamma_2 h_2} - d_2 e^{-\gamma_2 h_2}) \end{pmatrix}.$$

Al realizar operaciones matriciales la ecuación anterior se expresa como

$$\begin{pmatrix} e^{\gamma_3 h_2} & e^{-\gamma_3 h_2} \\ \gamma_3 e^{\gamma_3 h_2} & -\gamma_3 e^{-\gamma_3 h_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_3 \\ d_3 \end{pmatrix} = A_2 \begin{pmatrix} e^{\gamma_2 h_2} & e^{-\gamma_2 h_2} \\ \gamma_2 e^{\gamma_2 h_2} & -\gamma_2 e^{-\gamma_2 h_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_2 \\ d_2 \end{pmatrix},$$

de la cual se obtiene una expresión para los coeficientes c_3 y d_3 en términos de los coeficientes c_2 y d_2

$$\begin{pmatrix} c_3 \\ d_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\gamma_3 h_2} & e^{-\gamma_3 h_2} \\ \gamma_3 e^{\gamma_3 h_2} & -\gamma_3 e^{-\gamma_3 h_2} \end{pmatrix}^{-1} A_2 \begin{pmatrix} e^{\gamma_2 h_2} & e^{-\gamma_2 h_2} \\ \gamma_2 e^{\gamma_2 h_2} & -\gamma_2 e^{-\gamma_2 h_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_2 \\ d_2 \end{pmatrix}.$$

Al calcular la matriz inversa indicada y realizar las multiplicaciones matriciales indicadas tenemos

$$\begin{pmatrix} c_3 \\ d_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2\gamma_3} M_2 \begin{pmatrix} c_2 \\ d_2 \end{pmatrix}. \quad (2.2.11)$$

donde M_2 es una matriz asociada a la discontinuidad en $x = h_2$. Las entradas de la matriz M_2 están dadas de manera explícita como

$$\begin{aligned} m_{11}^{(2)}(k) &= e^{h_2(\gamma_2(k) - \gamma_3(k))} \left(\alpha_{21}^{(2)} + \alpha_{22}^{(2)} \gamma_2(k) + \left(\alpha_{11}^{(2)} + \alpha_{12}^{(2)} \gamma_2(k) \right) \gamma_3(k) \right), \\ m_{12}^{(2)}(k) &= e^{h_2(\gamma_2(k) + \gamma_3(k))} \left(-\alpha_{21}^{(2)} - \alpha_{22}^{(2)} \gamma_2(k) + \left(\alpha_{11}^{(2)} + \alpha_{12}^{(2)} \gamma_2(k) \right) \gamma_3(k) \right), \\ m_{21}^{(2)}(k) &= e^{-h_2(\gamma_2(k) + \gamma_3(k))} \left(\alpha_{21}^{(2)} - \alpha_{22}^{(2)} \gamma_2(k) + \left(\alpha_{11}^{(2)} - \alpha_{12}^{(2)} \gamma_2(k) \right) \gamma_3(k) \right), \\ m_{22}^{(2)}(k) &= e^{-h_2(\gamma_2(k) - \gamma_3(k))} \left(-\alpha_{21}^{(2)} + \alpha_{22}^{(2)} \gamma_2(k) + \left(\alpha_{11}^{(2)} - \alpha_{12}^{(2)} \gamma_2(k) \right) \gamma_3(k) \right). \end{aligned}$$

Recordemos de la subsección anterior que los coeficientes c_2 y d_2 quedaron expresados en términos de c_1 y d_1 , por lo tanto al acoplar estas expresiones obtenemos una forma de calcular los coeficientes c_3 y d_3 en términos de c_1 y d_1 , es decir,

$$\begin{pmatrix} c_3 \\ d_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{4\gamma_3(k)\gamma_2(k)} M_2 M_1 \begin{pmatrix} c_1 \\ d_1 \end{pmatrix}.$$

Al realizar las operaciones matriciales resulta la siguiente matriz

$$(M_2 M_1)(k) = \begin{pmatrix} m_{11}(k) & m_{12}(k) \\ m_{21}(k) & m_{22}(k) \end{pmatrix},$$

cuyas entradas están dadas explícitamente por

$$\begin{aligned} m_{11}(k) &= e^{h_1(\gamma_1 - \gamma_2) - h_2(\gamma_2 + \gamma_3)} \left(- (e^{2h_1\gamma_2} - e^{2h_2\gamma_2}) \left(\left(\alpha_{21}^{(1)} + \gamma_1 \alpha_{22}^{(1)} \right) \left(\alpha_{21}^{(2)} + \alpha_{11}^{(2)} \gamma_3 \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \gamma_2 \left(\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{12}^{(1)} \right) \left(\alpha_{22}^{(2)} + \alpha_{12}^{(2)} \gamma_3 \right) \right) + (e^{2h_1\gamma_2} + e^{2h_2\gamma_2}) \gamma_2 \left(\left(\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{12}^{(1)} \right) \alpha_{21}^{(2)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \left(\alpha_{21}^{(1)} + \alpha_{22}^{(1)} \right) \alpha_{22}^{(2)} + \gamma_3 \left(\left(\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{12}^{(1)} \right) \alpha_{11}^{(2)} + \left(\alpha_{21}^{(1)} + \alpha_{22}^{(1)} \right) \alpha_{12}^{(2)} \right) \right), \\ m_{12}(k) &= e^{-h_1(\gamma_1 + \gamma_2) - h_2(\gamma_2 + \gamma_3)} \left(- (e^{2h_1\gamma_2} - e^{2h_2\gamma_2}) \left(\left(\alpha_{21}^{(1)} + \gamma_1 \alpha_{22}^{(1)} \right) \left(\alpha_{21}^{(2)} + \alpha_{11}^{(2)} \gamma_3 \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \gamma_2 \left(\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{12}^{(1)} \right) \left(\alpha_{22}^{(2)} + \alpha_{12}^{(2)} \gamma_3 \right) \right) + (e^{2h_1\gamma_2} + e^{2h_2\gamma_2}) \gamma_2 \left(\left(\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{12}^{(1)} \right) \alpha_{21}^{(2)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \left(\alpha_{21}^{(1)} + \alpha_{22}^{(1)} \right) \alpha_{22}^{(2)} + \gamma_3 \left(\left(\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{12}^{(1)} \right) \alpha_{11}^{(2)} + \left(\alpha_{21}^{(1)} + \alpha_{22}^{(1)} \right) \alpha_{12}^{(2)} \right) \right), \\ m_{21}(k) &= e^{h_1(\gamma_1 - \gamma_2) + h_2(\gamma_2 + \gamma_3)} \left(e^{2\gamma_2(h_1 - h_2)} \left(\alpha_{21}^{(1)} - \gamma_2 \alpha_{11}^{(1)} + \gamma_1 \left(\alpha_{22}^{(2)} - \alpha_{12}^{(2)} \gamma_2 \right) \right) \left(\alpha_{21}^{(2)} - \alpha_{11}^{(2)} \gamma_3 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \gamma_2 \left(\alpha_{12}^{(2)} \gamma_3 - \alpha_{22}^{(2)} \right) \right) + \left(\alpha_{21}^{(1)} + \alpha_{11}^{(1)} \gamma_2 + \gamma_1 \left(\alpha_{22}^{(2)} + \alpha_{12}^{(2)} \gamma_2 \right) \right) \\ &\quad \left(\alpha_{11}^{(2)} \gamma_3 - \alpha_{21}^{(2)} + \gamma_2 \left(\alpha_{12}^{(2)} - \alpha_{22}^{(2)} \gamma_3 \right) \right), \\ m_{22}(k) &= e^{-h_1(\gamma_1 - \gamma_2) - h_2(\gamma_2 - \gamma_3)} \left(-e^{2\gamma_2(h_2 - h_1)} \left(\alpha_{21}^{(1)} + \gamma_2 \alpha_{11}^{(1)} - \gamma_1 \left(\alpha_{22}^{(2)} + \alpha_{12}^{(2)} \gamma_2 \right) \right) \left(\alpha_{21}^{(2)} - \alpha_{11}^{(2)} \gamma_3 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \gamma_2 \left(\alpha_{22}^{(2)} - \alpha_{12}^{(2)} \gamma_3 \right) \right) + \left(\alpha_{21}^{(1)} - \alpha_{11}^{(1)} \gamma_2 + \gamma_1 \left(\alpha_{12}^{(2)} \gamma_2 - \alpha_{22}^{(2)} \right) \right) \\ &\quad \left(\alpha_{21}^{(2)} - \alpha_{11}^{(2)} \gamma_3 + \gamma_2 \left(\alpha_{12}^{(2)} - \alpha_{22}^{(2)} \gamma_3 \right) \right), \end{aligned}$$

donde por cuestiones de claridad se ha suprimido la dependencia explícita de las funciones γ_i ($i = 1, 2, 3$) con el parámetro k . Con el objeto de que las soluciones pertenezcan al espacio $H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1, h_2\})$ se necesita que los coeficientes c_3 y d_1 sean iguales a cero. De esta manera la ecuación matricial se reduce a

$$\begin{pmatrix} 0 \\ d_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{4\gamma_3(k)\gamma_2(k)} \begin{pmatrix} m_{11}(k) & m_{12}(k) \\ m_{21}(k) & m_{22}(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

De la ecuación matricial resulta la ecuación de dispersión $\kappa(k) = 0$ para el problema con dos discontinuidades,

que de manera explícita está dada por la función

$$\begin{aligned} \kappa(k) := & e^{h_1(\gamma_1 - \gamma_2) - h_2(\gamma_2 + \gamma_3)} \left(- (e^{2h_1\gamma_2} - e^{2h_2\gamma_2}) \left((\alpha_{21}^{(1)} + \gamma_1\alpha_{22}^{(1)}) (\alpha_{21}^{(2)} + \alpha_{11}^{(2)}\gamma_3) \right. \right. \\ & + (\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{12}^{(1)})\gamma_2 (\alpha_{22}^{(2)} + \alpha_{12}^{(2)}\gamma_3) \left. \left. \right) + (e^{2h_1\gamma_2} + e^{2h_2\gamma_2})\gamma_2 \left((\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{12}^{(1)})\alpha_{21}^{(2)} \right. \right. \\ & \left. \left. + (\alpha_{21}^{(1)} + \alpha_{22}^{(1)})\alpha_{22}^{(2)} + \gamma_3 \left((\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{12}^{(1)})\alpha_{11}^{(2)} + (\alpha_{21}^{(1)} + \alpha_{22}^{(1)})\alpha_{12}^{(2)} \right) \right) \right). \end{aligned}$$

Sea k_i un cero de la ecuación $\kappa(k) = 0$, que satisface la condición (2.2.10), entonces el eigen-valor correspondiente es $\lambda_i = -k_i^2$. La eigen-función asociada está dada por la función continua a trozos

$$u_i(x) = \begin{cases} e^{\gamma_1(k_i)x}, & -\infty < x < h_1, \\ c_2 e^{\gamma_2(k_i)x} + d_2 e^{-\gamma_2(k_i)x}, & h_1 < x < h_2, \\ d_3 e^{-\gamma_3(k_i)x}, & h_2 < x < \infty, \end{cases} \quad (2.2.12)$$

donde los coeficientes c_2 , d_2 , d_3 se encuentran de manera explícita a partir de las expresiones matriciales anteriores.

2.2.3. Solución del problema con valores en la frontera ante N puntos de discontinuidad

Consideremos el caso cuando el potencial singular q_s consiste de N interacciones con soporte en el conjunto de puntos $\{h_1, \dots, h_N\}$ y donde el potencial regular q_r está definido por la función constante a trozos

$$q_r(x) = \begin{cases} q_1, & -\infty < x < h_1, \\ q_2, & h_1 < x < h_2, \\ \vdots & \vdots \\ q_{N+1}, & h_N < x < \infty, \end{cases}$$

donde $q_i < 0$ ($i = 1, \dots, N+1$) representan los escalones del potencial entre dos interacciones puntuales, como se muestra en la Figura 2.2.3.

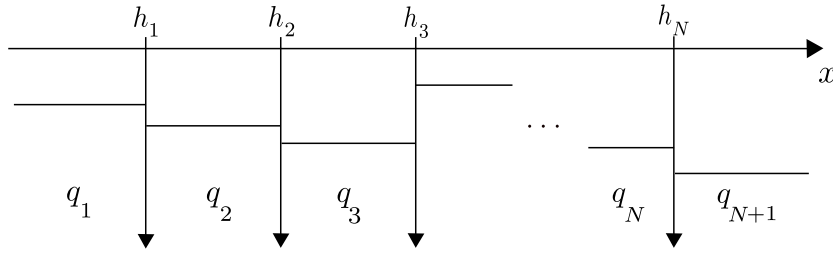


Figura 2.2.3. Niveles del potencial q_r y potencial singular q_s con soporte en los puntos $\{h_1, \dots, h_N\}$.

El operador no-acotado asociado en este caso es

$$\mathcal{H}_{\{A_1, \dots, A_N\}} = -\frac{d^2}{dx^2} + q_r(x), \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{h_1, \dots, h_N\}.$$

En los puntos h_i ($i = 1, 2, \dots, N$) las condiciones de frontera expresadas en forma matricial son

$$\begin{pmatrix} u(h_i^+) \\ u'(h_i^+) \end{pmatrix} = A_i \begin{pmatrix} u(h_i^-) \\ u'(h_i^-) \end{pmatrix},$$

donde las matrices A_i asociadas a las interacciones en los puntos $x = h_i$ tienen la forma

$$A_i = \begin{pmatrix} \alpha_{11}^{(i)} & \alpha_{12}^{(i)} \\ \alpha_{21}^{(i)} & \alpha_{22}^{(i)} \end{pmatrix},$$

cuyas entradas $\alpha_{jk}^{(i)} \in \mathbb{R}$ son tales que $\det A_i = 1$ ($i = 1, \dots, N$). El dominio del operador está definido como

$$\text{Dom} (\mathcal{H}_{\{A_1, \dots, A_N\}}) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1, \dots, h_N\}) : \begin{pmatrix} u(h_i^+) \\ u'(h_i^+) \end{pmatrix} = A_i \begin{pmatrix} u(h_i^-) \\ u'(h_i^-) \end{pmatrix}, i = 1, \dots, N \right\}.$$

Consideremos la ecuación que involucra eigen-valores

$$\mathcal{H}_{\{A_1, \dots, A_N\}} u = \lambda u, \quad u \in \text{Dom} (\mathcal{H}_{\{A_1, \dots, A_N\}}), \quad (2.2.13)$$

donde $\lambda = -k^2 \in \mathbb{R}$ es el parámetro espectral el cual satisface la siguiente condición

$$k^2 \geq \text{mín} \{q_{N+1}, \dots, q_2, q_1\}. \quad (2.2.14)$$

En cada región se tienen dos soluciones linealmente independientes de tipo $e^{\pm\gamma_i x}$ donde $\gamma_i(k) := \sqrt{k^2 - q_i}$, el cual está asociado al valor q_i del potencial correspondiente al i -ésimo escalón, entonces las soluciones generales de la ecuación diferencial están representadas como

$$\begin{aligned} u_{\text{I}}(x) &= c_1 e^{\gamma_1 x} + d_1 e^{-\gamma_1 x}, & -\infty < x < h_1, \\ u_{\text{II}}(x) &= c_2 e^{\gamma_2 x} + d_2 e^{-\gamma_2 x}, & h_1 < x < h_2 \\ &\vdots & \vdots \\ u_N(x) &= c_N e^{\gamma_N x} + d_N e^{-\gamma_N x}, & h_{N-1} < x < h_N, \\ u_{N+1}(x) &= c_{N+1} e^{\gamma_{N+1} x} + d_{N+1} e^{-\gamma_{N+1} x}, & h_N < x < \infty, \end{aligned}$$

donde c_i, d_i ($i = 1, \dots, N+1$) son coeficientes arbitrarios.

Podemos establecer una relación matricial entre los coeficientes de la $(N+1)$ -ésima región y la anterior, la cual representaremos como

$$\begin{pmatrix} c_{N+1} \\ d_{N+1} \end{pmatrix} = \frac{1}{2\gamma_{N+1}(k)} M_N \begin{pmatrix} c_N \\ d_N \end{pmatrix}. \quad (2.2.15)$$

Considerando las relaciones (2.2.4) y (2.2.11) que obtuvimos anteriormente podemos observar las siguientes relaciones recursivas

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} c_{N+1} \\ d_{N+1} \end{pmatrix} &= \frac{1}{2\gamma_{N+1}} M_N \begin{pmatrix} c_N \\ d_N \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} c_{N+1} \\ d_{N+1} \end{pmatrix} &= \frac{1}{4\gamma_{N+1}\gamma_N} M_N M_{N-1} \begin{pmatrix} c_{N-1} \\ d_{N-1} \end{pmatrix}, \\ &\vdots \\ \begin{pmatrix} c_{N+1} \\ d_{N+1} \end{pmatrix} &= \frac{1}{2N\gamma_{N+1}\gamma_N \dots \gamma_2} M_N M_{N-1} \dots M_1 \begin{pmatrix} c_1 \\ d_1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

En el $(N+1)$ -ésimo caso el producto de las matrices M_i ($i = 1, \dots, N$) da lugar a una matriz global que podemos definir de la siguiente manera

$$\mathbf{M}(k) = (M_N \dots M_1)(k) = \begin{pmatrix} m_{11}(k) & m_{12}(k) \\ m_{21}(k) & m_{22}(k) \end{pmatrix}.$$

Para que las soluciones del problema espectral pertenezcan a $H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1, \dots, h_N\})$ se necesita que los coeficientes $c_{N+1} = 0$ y $d_1 = 0$, esto da lugar a la ecuación matricial

$$\begin{pmatrix} 0 \\ d_{N+1} \end{pmatrix} = \zeta(k) \mathbf{M} \begin{pmatrix} c_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \zeta(k) \begin{pmatrix} m_{11}(k) & m_{12}(k) \\ m_{21}(k) & m_{22}(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ 0 \end{pmatrix} = c_1 \zeta(k) \begin{pmatrix} m_{11}(k) \\ m_{21}(k) \end{pmatrix},$$

donde la función ζ se define como

$$\zeta(k) = \frac{1}{2N\gamma_{N+1}(k)\gamma_N(k)\dots\gamma_2(k)}.$$

La igualdad matricial da lugar a la ecuación $c_1 m_{11}(k) = 0$ que representa la ecuación de dispersión del problema espectral. Definamos la función característica

$$\kappa(k) = m_{11}(k),$$

entonces la ecuación de dispersión del problema puede expresarse como $\kappa(k) = 0$. Por lo tanto los ceros k_i de esta ecuación que satisfacen (2.2.14) están relacionados con los eigen-valores λ_i de acuerdo con

$$\lambda_i = -k_i^2, \quad i = 1, 2, \dots,$$

las correspondientes eigen-funciones se definen por la función continua a trozos

$$u_i(x) := \begin{cases} e^{\gamma_1(k_i)x}, & -\infty < x < h_1, \\ c_2 e^{\gamma_2(k_i)x} + d_2 e^{-\gamma_2(k_i)x}, & h_1 < x < h_2, \\ \vdots & \vdots \\ c_N e^{\gamma_N(k_i)x} + d_N e^{-\gamma_N(k_i)x}, & h_{N-1} < x < h_N, \\ d_{N+1} e^{-\gamma_{N+1}(k_i)x}, & h_N < x < \infty, \end{cases} \quad (2.2.16)$$

y los coeficientes c_i, d_i ($i = 1, \dots, N+1$) se determinan a partir de las relaciones matriciales anteriores.

2.2.4. Normalización de las eigen-funciones

Al normalizar las eigen-funciones u_i obtenidas anteriormente ((2.2.7), (2.2.12), (2.2.16)) para el caso de potenciales regulares q_r escalonados, de acuerdo con la norma en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ llegamos a la expresión para la constante de normalización

$$L_i = \left(\int_{-\infty}^{h_1} |u_i(x)|^2 dx + \int_{h_1}^{h_2} |u_i(x)|^2 dx + \dots + \int_{h_N}^{\infty} |u_i(x)|^2 dx \right)^{1/2}.$$

De modo que la eigen-función normalizada φ_i en este caso está definida por una función a trozos

$$\varphi_i(x) = \frac{1}{L_i} \begin{cases} e^{\gamma_1(k_i)x}, & -\infty < x < h_1, \\ c_2 e^{\gamma_2(k_i)x} + d_2 e^{-\gamma_2(k_i)x}, & h_1 < x < h_2, \\ \vdots & \vdots \\ c_N e^{\gamma_N(k_i)x} + d_N e^{-\gamma_N(k_i)x}, & h_{N-1} < x < h_N, \\ d_{N+1} e^{-\gamma_{N+1}(k_i)x}, & h_N < x < \infty. \end{cases}$$

2.3. Estados ligados ante un potencial arbitrario e interacciones puntuales

Considerando los casos anteriores podemos ver que este tipo de problemas se pueden modelar usando métodos matriciales recursivos. A continuación consideramos un problema más general que incluye los casos anteriores. En esta sección construiremos un método matricial recursivo para los problemas espectrales de los operadores no-acotados de Schrödinger unidimensionales con potenciales regulares y con condiciones en la frontera puntuales. En la Subsección 2.3.1 consideraremos primero el caso de dos interacciones puntuales y un potencial regular localizado entre éstas, posteriormente generalizamos el caso para N interacciones puntuales. La forma de abordar una ecuación de Schrödinger con un potencial acotado arbitrario consiste en el uso del método SPPS, el cual es usado en esta sección para encontrar la ecuación de dispersión de los problemas espectrales como series de potencias del parámetro espectral. A diferencia de los casos considerados en las Secciones 2.1 y 2.2 donde era posible obtener soluciones exactas para los potenciales considerados, en esta sección no es posible garantizar las soluciones en forma cerrada o en forma analítica para potenciales arbitrarios acotados. En este sentido el método SPPS surge como una técnica para encontrar soluciones exactas de los problemas espectrales considerados.

2.3.1. Caso para dos discontinuidades

Consideremos la ecuación formal de Schrödinger

$$S_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + q_r(x) + q_s(x), \quad x \in \mathbb{R},$$

donde el potencial regular q_r con soporte compacto en (h_1, h_2) está definido como una función continua a trozos

$$q_r(x) = \begin{cases} q_0(x), & h_1 \leq x \leq h_2, \\ 0, & \text{en otro caso,} \end{cases}$$

donde $q_0 \in \mathcal{L}^\infty(h_1, h_2)$. El soporte del potencial se encuentra en el intervalo $[h_1, h_2]$. El potencial singular consiste de dos interacciones puntuales localizadas en h_1 y h_2 , representadas por distribuciones de primer orden, ver Figura (2.3.1). En cada punto h_i ($i = 1, 2$) se define una matriz A_i de 2×2 que relaciona las soluciones de la ecuación de Schrödinger por la derecha y la izquierda del punto singular de la siguiente manera

$$\begin{pmatrix} u_{1,2}(h_1) \\ u'_{1,2}(h_1) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} u_1(h_1) \\ u'_1(h_1) \end{pmatrix}, \quad (2.3.1)$$

$$\begin{pmatrix} u_2(h_2) \\ u'_2(h_2) \end{pmatrix} = A_2 \begin{pmatrix} u_{1,2}(h_2) \\ u'_{1,2}(h_2) \end{pmatrix}. \quad (2.3.2)$$

Las matrices satisfacen la propiedad $\det A_i = 1$ ($i = 1, 2$). En estas condiciones puntuales denotemos por $u_{-\infty,1} \equiv u_1$ a la solución de la ecuación de Schrödinger restringida al intervalo $(-\infty, h_1)$, de forma similar $u_{1,2}$ representa la restricción de la solución en el intervalo (h_1, h_2) , mientras que $u_{2,\infty} \equiv u_2$ es la restricción de la solución en el intervalo (h_2, ∞) . Con estas notaciones el primer número del subíndice de la solución representa el punto inicial en el intervalo donde la solución se restringe, mientras que el segundo número representa el punto final; cuando el punto tiene a $\pm\infty$ se omite simplemente.

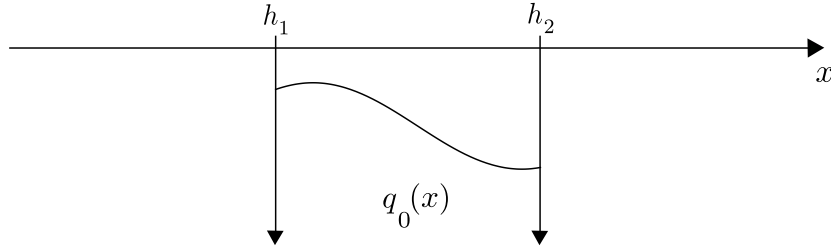


Figura 2.3.1. Potencial regular q_r con soporte compacto entre dos interacciones puntuales.

En este caso, el operador no-acotado asociado a S_0 se define por el operador de Schrödinger

$$\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}} = -\frac{d^2}{dx^2} + q_r(x), \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{h_1, h_2\},$$

cuyo dominio está definido por el conjunto

$$\text{Dom}(\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}}) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1, h_2\}) : \begin{pmatrix} u(h_i^+) \\ u'(h_i^+) \end{pmatrix} = A_i \begin{pmatrix} u(h_i^-) \\ u'(h_i^-) \end{pmatrix}, i = 1, 2 \right\}.$$

Consideremos el problema de eigen-valores

$$\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}} u(x) = \lambda u(x), \quad u \in \text{Dom}(\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}}), \quad (2.3.3)$$

donde $\lambda \in \mathbb{R}$ es el parámetro espectral. Para el análisis de los estados ligados es necesario considerar que el parámetro λ de la ecuación (2.3.3) es negativo, es decir, $\lambda = -k^2$, $k > 0$. Denotemos por $\varphi_{1,1}$ y $\varphi_{2,1}$ dos soluciones linealmente independientes de la ecuación

$$-\frac{d^2 u_{1,2}(x)}{dx^2} + q_0(x) u_{1,2}(x) = -k^2 u_{1,2}(x), \quad h_1 < x < h_2, \quad (2.3.4)$$

donde el primer número del subíndice de estas soluciones representa una etiqueta, mientras que el segundo número denota que estas soluciones están asociadas al intervalo (h_1, h_2) .

Asuma que las soluciones $\varphi_{1,1}$ y $\varphi_{2,1}$ satisfacen las condiciones de Cauchy en el punto h_1

$$\begin{aligned}\varphi_{1,1}(h_1) &= 1, & \varphi_{2,1}(h_1) &= 0, \\ \varphi'_{1,1}(h_1) &= 0, & \varphi'_{2,1}(h_1) &= 1.\end{aligned}$$

Con base en lo anterior, las soluciones generales de la ecuación (2.3.3) en los tres intervalos considerados están representadas como

$$\begin{aligned}u_1(x) &= c_1 e^{k(x-h_1)} + d_1 e^{-k(x-h_1)}, & -\infty < x < h_1, \\ u_{1,2}(x) &= c_{1,1} \varphi_{1,1}(x) + d_{1,1} \varphi_{2,1}(x), & h_1 < x < h_2, \\ u_2(x) &= c_2 e^{k(x-h_2)} + d_2 e^{-k(x-h_2)}, & h_2 < x < \infty,\end{aligned}$$

donde $c_1, c_{1,1}, c_2, d_1, d_{1,1}, d_2$ son coeficientes arbitrarios. Para la solución en el intervalo (h_1, h_2) determinamos los coeficientes $c_{1,1}$ y $d_{1,1}$ al evaluar la solución y su derivada en el punto h_1 de la siguiente manera

$$\begin{aligned}u_{1,2}(h_1) &= c_{1,1} \varphi_{1,1}(h_1) + d_{1,1} \varphi_{2,1}(h_1) = c_{1,1}, \\ u'_{1,2}(h_1) &= c_{1,1} \varphi'_{1,1}(h_1) + d_{1,1} \varphi'_{2,1}(h_1) = d_{1,1},\end{aligned}$$

de modo que

$$u_{1,2}(x) = u_{1,2}(h_1) \varphi_{1,1}(x) + u'_{1,2}(h_1) \varphi_{2,1}(x)$$

es una solución general expresada en términos de lo que ocurre en el punto h_1 . Construyamos una solución global que satisfaga las condiciones de frontera en los puntos h_1 y h_2 . Evaluando las soluciones generales y sus derivadas en los puntos h_1 y h_2 , tenemos

$$u_1(h_1) = c_1 + d_1, \tag{2.3.5a}$$

$$u'_1(h_1) = kc_1 - kd_1, \tag{2.3.5b}$$

$$u_2(h_2) = c_2 + d_2, \tag{2.3.5c}$$

$$u'_2(h_2) = kc_2 - kd_2, \tag{2.3.5d}$$

$$u_{1,2}(h_2) = u_{1,2}(h_1) \varphi_{1,1}(h_2) + u'_{1,2}(h_1) \varphi_{2,1}(h_2), \tag{2.3.5e}$$

$$u'_{1,2}(h_2) = u_{1,2}(h_1) \varphi'_{1,1}(h_2) + u'_{1,2}(h_1) \varphi'_{2,1}(h_2). \tag{2.3.5f}$$

Consideremos el vector columna del lado derecho de la ecuación matricial (2.3.2) el cual queda expresado como un producto de matrices

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix} u_{1,2}(h_2^-) \\ u'_{1,2}(h_2^-) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} u_{1,2}(h_1) \varphi_{1,1}(h_2) + u'_{1,2}(h_1) \varphi_{2,1}(h_2) \\ u_{1,2}(h_1) \varphi'_{1,1}(h_2) + u'_{1,2}(h_1) \varphi'_{2,1}(h_2) \end{pmatrix}, \\ &= \begin{pmatrix} \varphi_{1,1}(h_2) & \varphi_{2,1}(h_2) \\ \varphi'_{1,1}(h_2) & \varphi'_{2,1}(h_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{1,2}(h_1) \\ u'_{1,2}(h_1) \end{pmatrix}, \\ &= M_{1,2} \begin{pmatrix} u_{1,2}(h_1) \\ u'_{1,2}(h_1) \end{pmatrix},\end{aligned}$$

donde hemos introducido la matriz de monodromía $M_{1,2}$ asociada a las interacciones localizadas en h_1, h_2 , la cual se define por

$$M_{1,2} := \begin{pmatrix} \varphi_{1,1}(h_2) & \varphi_{2,1}(h_2) \\ \varphi'_{1,1}(h_2) & \varphi'_{2,1}(h_2) \end{pmatrix}.$$

De acuerdo con esto, la ecuación matricial (2.3.2) queda expresada como

$$\begin{pmatrix} u_2(h_2^+) \\ u'_2(h_2^+) \end{pmatrix} = A_2 M_{1,2} \begin{pmatrix} u_{1,2}(h_1) \\ u'_{1,2}(h_1) \end{pmatrix}.$$

Finalmente, al acoplar la expresión anterior con la ecuación (2.3.1) se obtiene una relación matricial

$$\begin{pmatrix} u_2(h_2^+) \\ u_2'(h_2^+) \end{pmatrix} = A_2 M_{1,2} A_1 \begin{pmatrix} u_1(h_1^-) \\ u_1'(h_1^-) \end{pmatrix} \quad (2.3.6)$$

que relaciona las soluciones a la izquierda del punto h_1 con la solución a la derecha de h_2 .

Queda por sustituir las soluciones (2.3.5a), (2.3.5b), (2.3.5c), (2.3.5d) en la ecuación matricial (2.3.6) lo cual produce

$$\begin{pmatrix} c_2 + d_2 \\ kc_2 - kd_2 \end{pmatrix} = A_2 M_{1,2} A_1 \begin{pmatrix} c_1 + d_1 \\ kc_1 - kd_1 \end{pmatrix}.$$

Los vectores columna a la izquierda y derecha de esta ecuación se pueden representar como productos matriciales

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ k & -k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_2 \\ d_2 \end{pmatrix} = A_2 M_{1,2} A_1 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ k & -k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ d_1 \end{pmatrix}.$$

De esta expresión se obtiene de forma explícita una relación entre los coeficientes c_2 , d_2 y c_1 , d_1 como sigue

$$\begin{pmatrix} c_2 \\ d_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ k & -k \end{pmatrix}^{-1} A_2 M_{1,2} A_1 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ k & -k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ d_1 \end{pmatrix}.$$

Con el objeto de que las soluciones pertenezcan al espacio $H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1, h_2\})$ se necesita que $c_2 = 0$ y $d_1 = 0$. Esto convierte la ecuación matricial anterior en la siguiente

$$\begin{pmatrix} 0 \\ d_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2k} c_1 \begin{pmatrix} k & 1 \\ k & -1 \end{pmatrix} A_2 M_{1,2} A_1 \begin{pmatrix} 1 \\ k \end{pmatrix}, \quad k > 0. \quad (2.3.7)$$

Al realizar los productos matriciales indicados e igualar la matriz resultante del lado derecho con el vector columna del lado izquierdo podemos encontrar la ecuación de dispersión del problema, así como una expresión para el coeficiente d_2 . La ecuación de dispersión $\kappa(k) = 0$ se obtiene a partir de la función característica κ que coincide con la entrada m_{11} del vector columna resultante de la multiplicación matricial indicada en el lado derecho de la ecuación (2.3.7), la cual está dada como

$$\begin{aligned} \kappa(k) = & \left((\alpha_{21}^{(2)} + \alpha_{11}^{(2)} k) \varphi_{1,1}(h_2) + (\alpha_{22}^{(2)} + \alpha_{12}^{(2)} k) \varphi'_{1,1}(h_2) \right) (\alpha_{11}^{(1)} + k\alpha_{12}^{(1)}) \\ & + \left((\alpha_{21}^{(2)} + \alpha_{11}^{(2)} k) \varphi_{2,1}(h_2) + (\alpha_{22}^{(2)} + \alpha_{12}^{(2)} k) \varphi'_{2,1}(h_2) \right) (\alpha_{21}^{(1)} + k\alpha_{22}^{(1)}). \end{aligned}$$

los ceros k_i de la ecuación $\kappa(k) = 0$ que satisfacen $k_i > 0$, determinan los eigen-valores del problema espectral de acuerdo con $\lambda_i = -k_i^2$. La eigen-función asociada al eigen-valor λ_i está definida como

$$u_i(x) = \begin{cases} e^{k_i(x-h_1)}, & -\infty < x < h_1, \\ u_{1,2}(h_1; k_i) \varphi_{1,1}(k_i, x) + u'_{1,2}(h_1; k_i) \varphi_{2,1}(k_i, x), & h_1 < x < h_2, \\ d_2(k_i) e^{-k_i(x-h_2)}, & h_2 < x < \infty, \end{cases}$$

donde el coeficiente d_2 se determina a partir de la relación matricial (2.3.7).

2.3.2. Caso para N discontinuidades

Consideremos al operador formal de Schrödinger que denotamos por S_0 el cual está definido como

$$S_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + q_r(x) + q_s(x), \quad x \in \mathbb{R},$$

donde el potencial regular q_r con soporte compacto en (h_1, h_N) se encuentra definido por una función continua a trozos

$$q_r(x) = \begin{cases} q_0, & h_1 \leq x \leq h_N, \\ 0, & \text{en otro caso,} \end{cases}$$

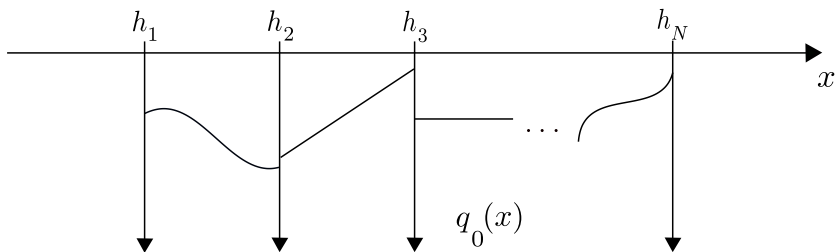


Figura 2.3.2. Potencial regular q_r continuo a trozos, donde entre cada par de interacciones puntuales se localiza un trozo diferente de la función q_0 .

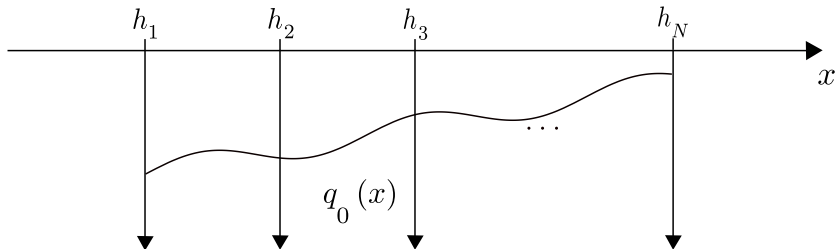


Figura 2.3.3. Potencial regular q_r continuo en el intervalo completo (h_1, h_N) .

donde $q_0 \in \mathcal{L}^\infty(\mathbb{R})$ es un función con soporte compacto. Al considerar un potencial de esta forma se pueden abordar distintos casos como los mostrados en las Figuras 2.3.2, 2.3.3 y 2.3.4. Por otra parte, el potencial singular q_s consiste de distribuciones de primer orden con soporte en los puntos h_i ($i = 1, \dots, N$). Las condiciones de frontera en cada punto h_i ($i = 1, \dots, N$) son representadas por matrices cuadradas A_i que permiten relacionar las soluciones de la ecuación de Schrödinger a la derecha de cada interacción en términos de la solución a la izquierda de ésta

$$\begin{pmatrix} u_{i,i+1}(h_i^+) \\ u'_{i,i+1}(h_i^+) \end{pmatrix} = A_i \begin{pmatrix} u_{i-1,i}(h_i^-) \\ u'_{i-1,i}(h_i^-) \end{pmatrix},$$

donde las matrices A_i satisfacen la propiedad $\det A_i = 1$. En estas condiciones estamos empleando la notación $u_{i,i+1}(x)$ que representa la restricción de la solución en el intervalo $[h_i, h_{i+1}]$, donde $i = 1, \dots, N$. De forma similar, denotamos por $u_{-\infty,1}(x) \equiv u_1(x)$ la restricción de la solución en el intervalo $(-\infty, h_1)$, y finalmente $u_{N,\infty}(x) \equiv u_N(x)$ a la restricción de la solución en el intervalo (h_N, ∞) . El uso de esta notación implica que el primer subíndice de las soluciones está asociado al punto inicial del intervalo donde la solución se restringe y el segundo número está asociado al punto final del intervalo, excepto en los extremos, es decir, en $\pm\infty$.

El operador no-acotado asociado al operador S_0 se define como

$$\mathcal{H}_{\{A_1, \dots, A_N\}} = -\frac{d^2}{dx^2} + q_r(x), \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{h_1, \dots, h_N\},$$

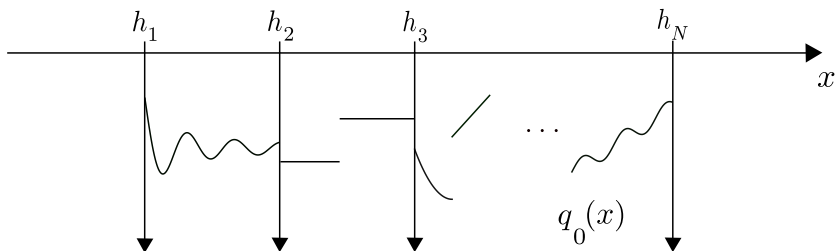


Figura 2.3.4. Potencial regular q_r continuo a trozos los cuales no necesariamente coinciden con los puntos de interacción.

cuyo dominio se representa por el conjunto de funciones

$$\text{Dom} (\mathcal{H}_{\{A_1, \dots, A_N\}}) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1, \dots, h_N\}) : \begin{pmatrix} u(h_i^+) \\ u'(h_i^+) \end{pmatrix} = A_i \begin{pmatrix} u(h_i^-) \\ u'(h_i^-) \end{pmatrix}, i = 1, \dots, N \right\}.$$

Consideremos el siguiente problema de eigen-valores

$$\mathcal{H}_{\{A_1, \dots, A_N\}} u(x) = \lambda u(x), \quad u \in \text{Dom} (\mathcal{H}_{\{A_1, \dots, A_N\}}), \quad (2.3.8)$$

donde el parámetro espectral $\lambda \in \mathbb{R}$ se representa por $\lambda = -k^2$, $k > 0$. Las soluciones generales de la ecuación (2.3.8) en cada intervalo están representadas como

$$\begin{aligned} u_1(x) &= c_1 e^{k(x-h_1)} + d_1 e^{-k(x-h_1)}, & -\infty < x < h_1, \\ & \vdots & \vdots \\ u_{i,i+1}(x) &= c_{1,i} \varphi_{1,i}(x) + d_{1,i} \varphi_{2,i}(x), & h_i < x < h_{i+1}, \quad (i = 1, \dots, N-1) \\ & \vdots & \vdots \\ u_N(x) &= c_N e^{k(x-h_N)} + d_N e^{-k(x-h_N)}, & h_N < x < \infty, \end{aligned}$$

donde $c_1, d_1; c_{1,i}, d_{1,i}$ ($i = 1, \dots, N-1$); c_N, d_N , son coeficientes arbitrarios. Las soluciones en los intervalos (h_i, h_{i+1}) ($i = 1, \dots, N-1$) consisten en combinaciones lineales de dos soluciones $\varphi_{1,i}$ y $\varphi_{2,i}$ linealmente independientes de la ecuación

$$-\frac{d^2 u_{i,i+1}(x)}{dx^2} + q_{i,i+1}(x) u_{i,i+1}(x) = -k^2 u_{i,i+1}(x), \quad h_i < x < h_{i+1}, \quad (2.3.9)$$

que satisfacen las condiciones de Cauchy

$$\varphi_{1,i}(h_i) = 1, \quad \varphi_{2,i}(h_i) = 0, \quad (2.3.10a)$$

$$\varphi'_{1,i}(h_i) = 0, \quad \varphi'_{2,i}(h_i) = 1. \quad (2.3.10b)$$

En la ecuación anterior denotamos por $q_{i,i+1}$ a la restricción del potencial regular q_r en el intervalo (h_i, h_{i+1}) . Los coeficientes $c_{1,i}, d_{1,i}$ de la solución general $u_{i,i+1}$ se determinan al evaluar esta solución y su derivada en el punto h_i , es decir,

$$\begin{aligned} u_{i,i+1}(h_i) &= c_{1,i} \varphi_{1,i}(h_i) + d_{1,i} \varphi_{2,i}(h_i) = c_{1,i}, \\ u'_{i,i+1}(h_i) &= c_{1,i} \varphi'_{1,i}(h_i) + d_{1,i} \varphi'_{2,i}(h_i) = d_{1,i}, \end{aligned}$$

de esta manera la solución en el intervalo (h_i, h_{i+1}) se expresa como

$$u_{i,i+1}(x) = u_{i,i+1}(h_i) \varphi_{1,i}(x) + u'_{i,i+1}(h_i) \varphi_{2,i}(x) \quad h_i < x < h_{i+1}.$$

A continuación, consideremos las condiciones en la frontera asociadas con cada punto h_i , que en términos de las notaciones utilizadas se escriben como

$$\begin{pmatrix} u_{i,i+1}(h_i^+) \\ u'_{i,i+1}(h_i^+) \end{pmatrix} = A_i \begin{pmatrix} u_{i-1,i}(h_i^-) \\ u'_{i-1,i}(h_i^-) \end{pmatrix}, \quad (2.3.11)$$

donde, por inducción, la expresión para la solución $u_{i-1,i}$ tiene la forma

$$u_{i-1,i}(x) = u_{i-1,i}(h_{i-1}) \varphi_{1,i-1}(x) + u'_{i-1,i}(h_{i-1}) \varphi_{2,i-1}(x), \quad h_{i-1} < x < h_i.$$

Ahora consideremos el vector columna del lado derecho de la expresión (2.3.11), el cual representamos como un producto matricial de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} u_{i-1,i}(h_i^-) \\ u'_{i-1,i}(h_i^-) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} u_{i-1,i}(h_{i-1}) \varphi_{1,i-1}(h_i) + u'_{i-1,i}(h_{i-1}) \varphi_{2,i-1}(h_i) \\ u_{i-1,i}(h_{i-1}) \varphi'_{1,i-1}(h_i) + u'_{i-1,i}(h_{i-1}) \varphi'_{2,i-1}(h_i) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \varphi_{1,i-1}(h_i) & \varphi_{2,i-1}(h_i) \\ \varphi'_{1,i-1}(h_i) & \varphi'_{2,i-1}(h_i) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{i-1,i}(h_{i-1}) \\ u'_{i-1,i}(h_{i-1}) \end{pmatrix} \\ &= M_{i-1,i} \begin{pmatrix} u_{i-1,i}(h_{i-1}) \\ u'_{i-1,i}(h_{i-1}) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

donde la matriz de monodromía asociada a las interacciones h_{i-1} y h_i se denota por $M_{i-1,i}$, la cual se define por

$$M_{i-1,i} := \begin{pmatrix} \varphi_{1,i-1}(h_i) & \varphi_{2,i-1}(h_i) \\ \varphi'_{1,i-1}(h_i) & \varphi'_{2,i-1}(h_i) \end{pmatrix}, \quad i = 2, \dots, N. \quad (2.3.12)$$

De acuerdo con esto, la ecuación matricial (2.3.11) toma la forma

$$\begin{pmatrix} u_{i,i+1}(h_i^+) \\ u'_{i,i+1}(h_i^+) \end{pmatrix} = A_i M_{i-1,i} \begin{pmatrix} u_{i-1,i}(h_{i-1}) \\ u'_{i-1,i}(h_{i-1}) \end{pmatrix}, \quad i = 2, \dots, N, \quad (2.3.13)$$

que relaciona a las interacciones en los puntos h_i y h_{i-1} . Es posible obtener otras relaciones al considerar de forma recursiva la misma relación matricial como lo vimos en la Subsección 2.3.1, es decir:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} u_{2,3}(h_2^+) \\ u'_{2,3}(h_2^+) \end{pmatrix} &= A_2 \begin{pmatrix} u_{1,2}(h_2^-) \\ u'_{1,2}(h_2^-) \end{pmatrix} = A_2 M_{1,2} \begin{pmatrix} u_{1,2}(h_1) \\ u'_{1,2}(h_1) \end{pmatrix}. \\ \begin{pmatrix} u_{3,4}(h_3^+) \\ u'_{3,4}(h_3^+) \end{pmatrix} &= A_3 \begin{pmatrix} u_{2,3}(h_3^-) \\ u'_{2,3}(h_3^-) \end{pmatrix} = A_3 M_{2,3} \begin{pmatrix} u_{2,3}(h_2) \\ u'_{2,3}(h_2) \end{pmatrix}, \\ &= A_3 M_{2,3} A_2 M_{1,2} \begin{pmatrix} u_{1,2}(h_1) \\ u'_{1,2}(h_1) \end{pmatrix}. \\ &\vdots \\ \begin{pmatrix} u_N(h_N^+) \\ u'_N(h_N^+) \end{pmatrix} &= A_N \begin{pmatrix} u_{N-1,N}(h_N^-) \\ u'_{N-1,N}(h_N^-) \end{pmatrix} \\ &= A_N M_{N-1,N} \begin{pmatrix} u_{N-1,N}(h_{N-1}^-) \\ u'_{N-1,N}(h_{N-1}^-) \end{pmatrix} \\ &= A_N M_{N-1,N} A_{N-1} M_{N-2,N-1} \cdots A_3 M_{2,3} A_2 M_{1,2} \begin{pmatrix} u_{1,2}(h_1) \\ u'_{1,2}(h_1) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.3.14)$$

donde la última iteración correspondiente a $i = N$ hemos asumido (abusando de la notación) que la (hipotética) solución $u_{N,N+1}$ de la relación recursiva (2.3.13) coincide con la solución u_N en el punto h_N . En la relación matricial (2.3.14) se puede establecer la relación entre la solución $u_{1,2}$ y su derivada, con la solución u_1 y su derivada de acuerdo con la siguiente igualdad

$$\begin{pmatrix} u_{1,2}(h_1^+) \\ u'_{1,2}(h_1^+) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} u_1(h_1^-) \\ u'_1(h_1^-) \end{pmatrix}.$$

Esto conduce a la siguiente ecuación matricial

$$\begin{pmatrix} u_N(h_N^+) \\ u'_N(h_N^+) \end{pmatrix} = A_N M_{N-1,N} A_{N-1} M_{N-2,N-1} \cdots A_3 M_{2,3} A_2 M_{1,2} A_1 \begin{pmatrix} u_1(h_1^-) \\ u'_1(h_1^-) \end{pmatrix}. \quad (2.3.15)$$

Al evaluar las soluciones u_1 y u_N , y sus respectivas derivadas en los puntos h_1 y h_N , obtenemos

$$u_1(h_1) = c_1 + d_1, \quad (2.3.16a)$$

$$u'_1(h_1) = kc_1 - kd_1, \quad (2.3.16b)$$

$$u_N(h_N) = c_N + d_N, \quad (2.3.16c)$$

$$u'_N(h_N) = kc_N - kd_N. \quad (2.3.16d)$$

Sustituyendo (2.3.16) en la ecuación matricial (2.3.15) podemos obtener una relación entre los coeficientes c_N , d_N y los coeficientes c_1 y d_1 como sigue

$$\begin{pmatrix} c_N + d_N \\ kc_N - kd_N \end{pmatrix} = A_N M_{N-1,N} A_{N-1} \cdots A_2 M_{1,2} A_1 \begin{pmatrix} c_1 + d_1 \\ kc_1 - kd_1 \end{pmatrix}.$$

Al realizar operaciones matriciales obtenemos de forma explícita tal relación

$$\begin{pmatrix} c_N \\ d_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ k & -k \end{pmatrix}^{-1} A_N M_{N-1,N} A_{N-1} \cdots A_2 M_{1,2} A_1 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ k & -k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ d_1 \end{pmatrix}.$$

Al calcular la matriz inversa indicada y aplicar las condiciones asintóticas en el infinito que implican $c_N = 0$ y $d_1 = 0$, se obtiene la siguiente ecuación matricial

$$\begin{pmatrix} 0 \\ d_N \end{pmatrix} = \frac{1}{2k} c_1 \begin{pmatrix} k & 1 \\ k & -1 \end{pmatrix} A_N M_{N-1,N} A_{N-1} \cdots A_2 M_{1,2} A_1 \begin{pmatrix} 1 \\ k \end{pmatrix}, \quad (2.3.17)$$

de modo que al igualar los elementos del vector columna de la izquierda con el resultante de la derecha obtenemos la ecuación de dispersión del problema y el coeficiente d_N . El elemento m_{11} del vector columna de la derecha coincide con la función característica $\kappa = \kappa(k)$. Los ceros k_i de la ecuación de dispersión $\kappa(k) = 0$ que satisfacen $k_i > 0$, determinan los eigen-valores del problema espectral de acuerdo con $\lambda_i = -k_i^2$. La eigen-función asociada a cada eigen-valor λ_i está definida por una función a trozos de la siguiente manera

$$u_i(x) = \begin{cases} e^{k_i(x-h_1)}, & -\infty < x < h_1, \\ u_{1,2}(h_1; k_i) \varphi_{1,1}(x; k_i) + u'_{1,2}(h_1; k_i) \varphi_{2,1}(x; k_i), & h_1 < x < h_2, \\ \vdots & \vdots \\ u_{i,i+1}(h_i; k_i) \varphi_{1,i}(x; k_i) + u'_{i,i+1}(h_i; k_i) \varphi_{2,i}(x; k_i), & h_i < x < h_{i+1}, \\ \vdots & \vdots \\ u_{N-1,N}(h_{N-1}; k_i) \varphi_{1,N-1}(x; k_i) + u'_{N-1,N}(h_{N-1}; k_i) \varphi_{2,N-1}(x; k_i), & h_{N-1} < x < h_N \\ d_N(k_i) e^{-k_i(x-h_2)}, & h_N < x < \infty. \end{cases}$$

2.4. Enfoque SPPS para el análisis de los estados ligados

En los casos abordados en las secciones (2.1) y (2.2) las soluciones de la ecuación de Schrödinger en cada restricción son exactas, lo cual no podría garantizarse para un potencial q_0 arbitrario en la mayoría de las ocasiones. En la mayoría de las ocasiones la búsqueda de soluciones de la ecuación de Schrödinger podría implicar el uso de algún método numérico tal como el método de disparo, o los métodos de discretización como el método de diferencias finitas, o los métodos variacionales como el método del elemento finito. Sin embargo, el método SPPS puede aplicarse en la mayoría de las ocasiones cuando las funciones potenciales satisfacen ciertas condiciones de regularidad. Las soluciones que se obtienen a partir del método SPPS se expresan como series de potencias del parámetro espectral. Recalamos el hecho de que el método SPPS es un método exacto, pero la representación de sus soluciones puede dar lugar a un método numérico que dé soluciones aproximadas. Esto consiste en el truncamiento de las series de potencias hasta cierto número finito de términos. Dado que las series convergen uniformemente el error debido al truncamiento decrece uniformemente conforme el número de términos de las series aumenta. Con esta representación obtenemos un método sencillo y potente para la solución numérica de problemas con valores en la frontera y espectrales, entre otros.

Denotemos por $q_{i,i+1}$ a la restricción del potencial regular q_0 en el intervalo $[h_i, h_{i+1}]$ y sea $v_{0,i}$ una solución particular de la ecuación homogénea

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + q_{i,i+1}(x) \right) v_{0,i}(x) = 0, \quad h_i < x < h_{i+1},$$

que satisface las condiciones de regularidad $v_{0,i}^2, 1/v_{0,i}^2 \in \mathcal{C}[h_i, h_{i+1}]$, entonces un par de soluciones linealmente independientes de la ecuación

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + q_{i,i+1}(x) \right) u_{i,i+1}(x) = \lambda u_{i,i+1}, \quad h_i < x < h_{i+1},$$

denotadas por $v_{1,i}$ y $v_{2,i}$ se pueden construir como series de potencias del parámetro λ como sigue

$$v_{1,i}(x) = v_{0,i}(x) \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \tilde{X}_i^{(2n)}(x), \quad v_{2,i}(x) = v_{0,i}(x) \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n X_i^{(2n+1)}(x), \quad (2.4.1)$$

donde las funciones $X_i^{(n)}$ y $\tilde{X}_i^{(n)}$ se definen a partir del procedimiento de integración recursiva siguiente

$$\tilde{X}_i^{(0)} \equiv 1, \quad X_i^{(0)} \equiv 1,$$

$$\tilde{X}_i^{(n)}(x) = \begin{cases} \int_{x_{0,i}}^x \tilde{X}_i^{(n-1)}(s) v_{0,i}^2(s) ds, & n \text{ impar,} \\ -\int_{x_{0,i}}^x \tilde{X}_i^{(n-1)}(s) \frac{1}{v_{0,i}^2(s)} ds & n \text{ par,} \end{cases}$$

$$X_i^{(n)}(x) = \begin{cases} -\int_{x_{0,i}}^x X_i^{(n-1)}(s) \frac{1}{v_{0,i}^2(s)} ds, & n \text{ impar,} \\ \int_{x_{0,i}}^x X_i^{(n-1)}(s) v_{0,i}^2(s) ds, & n \text{ par,} \end{cases}$$

y donde $x_{0,i}$ es un punto arbitrario del intervalo $[h_i, h_{i+1}]$, sin embargo, si el punto $x_{0,i}$ se elije como el punto inicial del intervalo, es decir, $h_i = x_{0,i}$, entonces los cálculos se simplifican grandemente. Más aún, las series (2.4.1) convergen uniformemente en el intervalo $[h_i, h_{i+1}]$. Por lo tanto, la diferenciación de estas series se puede realizar término a término con lo cual obtenemos una representación en series de potencias de las derivadas de estas soluciones

$$v'_{1,i}(x) = \frac{v'_{0,i}(x)}{v_{0,i}(x)} v_{1,i}(x) - \frac{1}{v_{0,i}(x)} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \tilde{X}_i^{(2n-1)}(x),$$

$$v'_{2,i}(x) = \frac{v'_{0,i}(x)}{v_{0,i}(x)} v_{2,i}(x) - \frac{1}{v_{0,i}(x)} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n X_i^{(2n)}(x).$$

Todas las potencias formales $\tilde{X}_i^{(n)}$ y $\tilde{X}_i^{(n)}$ se anulan en el punto $x_{0,i}$ excepto $\tilde{X}_i^{(0)}$ y $X_i^{(0)}$, las cuales por definición son iguales a 1. Por lo tanto, las soluciones $v_{1,i}$ y $v_{2,i}$ satisfacen las condiciones de Cauchy siguientes

$$v_{1,i}(x_{0,i}) = v_{0,i}(x_{0,i}), \quad v_{2,i}(x_{0,i}) = 0, \quad (2.4.2a)$$

$$v'_{1,i}(x_{0,i}) = v'_{0,i}(x_{0,i}), \quad v'_{2,i}(x_{0,i}) = -1/v_{0,i}(x_{0,i}). \quad (2.4.2b)$$

La independencia lineal de las soluciones $v_{1,i}$ y $v_{2,i}$ se demuestra ya que el Wronskiano correspondiente es igual a uno.

Observe que estas condiciones de Cauchy no corresponden con las condiciones (2.3.10) exigidas para las soluciones $\varphi_{1,i}$ y $\varphi_{2,i}$. Sin embargo, es posible obtener las soluciones $\varphi_{1,i}$ y $\varphi_{2,i}$ como combinaciones lineales de las soluciones $v_{1,i}$ y $v_{2,i}$ como sigue

$$\varphi_{1,i}(x) = \tilde{c}_{1,i} v_{1,i}(x) + \tilde{d}_{1,i} v_{2,i}(x), \quad (2.4.3)$$

$$\varphi_{2,i}(x) = \tilde{c}_{2,i} v_{1,i}(x) + \tilde{d}_{2,i} v_{2,i}(x), \quad (2.4.4)$$

donde $\tilde{c}_{1,i}$, $\tilde{c}_{2,i}$, $\tilde{d}_{1,i}$ y $\tilde{d}_{2,i}$ son coeficientes a determinar. Elijamos $x_{0,i} = h_i$ en el proceso de integración recursiva, entonces la evaluación de (2.4.3) y su derivada en h_i da lugar a un sistema de ecuaciones

$$\varphi_{1,i}(h_i) = \tilde{c}_{1,i} v_{1,i}(h_i) + \tilde{d}_{1,i} v_{2,i}(h_i) = 1,$$

$$\varphi'_{1,i}(h_i) = \tilde{c}_{1,i} v'_{1,i}(h_i) + \tilde{d}_{1,i} v'_{2,i}(h_i) = 0,$$

con $\tilde{c}_{1,i}$ y $\tilde{d}_{1,i}$ como incógnitas. La solución de este sistema es

$$\tilde{c}_{1,i} = \frac{1}{v_{0,i}(h_i)}, \quad \tilde{d}_{1,i} = -v'_{0,i}(h_i).$$

De modo similar, la evaluación de (2.4.4) y su derivada en h_i da lugar a otro sistema de ecuaciones

$$\varphi_{2,i}(h_i) = \tilde{c}_{2,i} v_{1,i}(h_i) + \tilde{d}_{2,i} v_{2,i}(h_i) = 0,$$

$$\varphi'_{2,i}(h_i) = \tilde{c}_{2,i} v'_{1,i}(h_i) + \tilde{d}_{2,i} v'_{2,i}(h_i) = 1,$$

con $\tilde{c}_{2,i}$ y $\tilde{d}_{2,i}$ como incógnitas, cuya solución es

$$\tilde{c}_{2,i} = 0, \quad \tilde{d}_{2,i} = -v_{0,i}(h_i).$$

De esta manera, las soluciones $\varphi_{1,i}$ y $\varphi_{2,i}$ quedan expresadas en términos de las soluciones $v_{1,i}$ y $v_{2,i}$ como sigue

$$\varphi_{1,i}(x) = \frac{1}{v_{0,i}(h_i)} v_{1,i}(x) - v'_{0,i}(h_i) v_{2,i}(x), \quad (2.4.5)$$

$$\varphi_{2,i}(x) = -v_{0,i}(h_i) v_{2,i}(x), \quad (2.4.6)$$

las cuales satisfacen las condiciones de Cauchy (2.3.10) requeridas. Estas soluciones así construidas quedan expresadas como series de potencias del parámetro espectral λ .

Recordemos que la solución $u_{i,i+1}$ en el intervalo (h_i, h_{i+1}) es una combinación lineal compuesta por las soluciones $\varphi_{1,i}$ y $\varphi_{2,i}$ de la siguiente manera

$$u_{i,i+1}(x) = u_{i,i+1}(h_i) \varphi_{1,i}(x) + u'_{i,i+1}(h_i) \varphi_{2,i}(x)$$

por lo que al expresar esta solución en términos (2.4.5) y (2.4.6) se llega a la siguiente expresión

$$u_{i,i+1}(x) = \frac{u_{i,i+1}(h_i)}{v_{0,i}(h_i)} v_{1,i}(x) - u'_{i,i+1}(h_i) (v_{0,i}(h_i) + v'_{0,i}(h_i)) v_{2,i}(x), \quad h_i < x < h_{i+1}$$

en términos de las series de potencias la solución anterior toma la siguiente forma

$$\begin{aligned} u_{i,i+1}(x) &= \frac{u_{i,i+1}(h_i) v_{0,i}(x)}{v_{0,i}(h_i)} \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \tilde{X}_i^{(2n)}(x) \\ &\quad - u'_{i,i+1}(h_i) v_{0,i}(x) (v_{0,i}(h_i) - v'_{0,i}(h_i)) \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n X_i^{(2n+1)}(x), \quad h_i < x < h_{i+1}. \end{aligned}$$

A partir de las soluciones (2.4.5) y (2.4.6) se obtiene de forma explícita las entradas de la matriz de monodromía $M_{i-1,i}$ (2.3.12)

$$M_{i-1,i} := \begin{pmatrix} \varphi_{1,i-1}(h_i) & \varphi_{2,i-1}(h_i) \\ \varphi'_{1,i-1}(h_i) & \varphi'_{2,i-1}(h_i) \end{pmatrix}, \quad i = 2, \dots, N$$

donde

$$\varphi_{1,i-1}(h_i) = \frac{1}{v_{0,i}(h_{i-1})} v_{0,i}(h_i) \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \tilde{X}_i^{(2n)}(h_i) - v'_{0,i-1}(h_{i-1}) v_{0,i}(h_i) \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n X_i^{(2n+1)}(h_i),$$

$$\varphi_{2,i-1}(h_i) = -v_{0,i-1}(h_{i-1}) v_{0,i}(h_i) \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n X_i^{(2n+1)}(h_i),$$

$$\varphi'_{1,i-1}(h_i) = \frac{1}{v_{0,i-1}(h_{i-1})} \left(v'_{0,i}(h_i) - \frac{1}{v_{0,i}(h_i)} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \tilde{X}_i^{(2n-1)}(h_i) \right) + \frac{v'_{0,i-1}(h_{i-1})}{v_{0,i}(h_i)} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n X_i^{(2n)}(h_i),$$

$$\varphi'_{2,i-1}(h_i) = v_{0,i-1}(h_{i-1}) v'_{2,i-1}(x) \left(\frac{1}{v_{0,i}(h_i)} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n X_i^{(2n)}(h_i) \right),$$

2.4.1. Cálculo de la solución particular $v_{0,i}$ a partir del método SPPS

Para obtener la solución particular $v_{0,i}$ recurrimos nuevamente al método SPPS. Sea $w_{0,i}$ una solución de la ecuación homogénea

$$-\frac{d^2}{dx^2} w_{0,i}(x) = 0, \quad h_i < x < h_{i+1},$$

en el intervalo (h_i, h_{i+1}) que satisface las condiciones de regularidad $q_0 w_{0,i}^2, w_{0,i}^{-2} \in \mathcal{C}[h_i, h_{i+1}]$, entonces las soluciones linealmente independientes de la ecuación

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + q_{i,i+1}(x)\right)v_{0,i}(x) = 0, \quad h_i < x < h_{i+1},$$

denotadas por $w_{1,i}$ y $w_{2,i}$ se pueden construir como series de potencias formales

$$w_{1,i}(x) := w_{0,i}(x) \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \tilde{Y}_i^{(2n)}(x), \quad w_{2,i}(x) := w_{0,i}(x) \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n Y_i^{(2n+1)}(x),$$

donde las funciones $\tilde{Y}_i^{(n)}, Y_i^{(n)}$ son calculadas de acuerdo a otro procedimiento de integración recursiva el cual involucra ahora al potencial q_0

$$\tilde{Y}_i^{(0)} \equiv 1, \quad Y_i^{(0)} \equiv 1,$$

$$\tilde{Y}_i^{(n)}(x) := \begin{cases} \int_{x'_{0,i}}^x \tilde{Y}_i^{(n-1)}(s) q_0(s) ds, & n \text{ impar,} \\ \int_{x'_{0,i}}^x \tilde{Y}_i^{(n-1)}(s) ds, & n \text{ par,} \end{cases}$$

$$Y_i^{(n)}(x) := \begin{cases} \int_{x'_{0,i}}^x Y_i^{(n-1)}(s) ds, & n \text{ impar,} \\ \int_{x'_{0,i}}^x Y_i^{(n-1)}(s) q_0(s) ds, & n \text{ par,} \end{cases}$$

y donde $x'_{0,i}$ es un punto arbitrario en $[h_i, h_{i+1}]$. Más aún, las series de potencias formales convergen uniformemente en $[h_i, h_{i+1}]$ y admiten una diferenciación término a término.

La solución particular $v_{0,i}$ se puede construir de la siguiente manera

$$v_{0,i} := w_{1,i} + iw_{2,i},$$

y de acuerdo con el Teorema de oscilación de Sturm se garantiza que la solución construida de esta manera nunca se anula.

2.4.2. Implementación computacional

Para realizar la implementación numérica que nos permita encontrar soluciones aproximadas en términos de series de potencias del parámetro espectral λ debemos considerar la precisión del proceso de integración recursiva para el cálculo de las integrales $\tilde{X}_i^{(n)}(x)$ y $X_i^{(n)}(x)$, así como la convergencia de las series de potencias (2.4.1). Al tratarse de la implementación numérica de las series tenemos que tomar en cuenta que éstas tienen que ser truncadas hasta un número finito Q de potencias formales

$$\tilde{v}_{1,i}(x) = v_{0,i}(x) \sum_{n=0}^Q \lambda^n \tilde{X}_i^{(2n)}(x), \quad \tilde{v}_{2,i}(x) = v_{0,i}(x) \sum_{n=0}^Q \lambda^n X_i^{(2n+1)}(x), \quad (2.4.7)$$

estas expresiones representan aproximaciones de las soluciones $v_{1,i}$ y $v_{2,i}$. Debido a la convergencia uniforme de las series se puede ver que los errores

$$\lim_{Q \rightarrow \infty} |v_{1,i}(x) - \tilde{v}_{1,i}(x)| = 0, \quad \lim_{Q \rightarrow \infty} |v_{2,i}(x) - \tilde{v}_{2,i}(x)| = 0$$

decrecen uniformemente conforme el número de términos aumenta [35]. Considerando las soluciones aproximadas (2.4.7), es posible determinar una aproximación para la matriz de monodromía asociada con las interacciones localizadas en h_i, h_{i+1} , la cual se representa como

$$\tilde{M}_{i,i+1} := \begin{pmatrix} \tilde{\varphi}_{1,i}(h_{i+1}) & \tilde{\varphi}_{2,i}(h_{i+1}) \\ \tilde{\varphi}'_{1,i}(h_{i+1}) & \tilde{\varphi}'_{2,i}(h_{i+1}) \end{pmatrix},$$

donde

$$\tilde{\varphi}_{1,i}(x) := \frac{1}{\tilde{v}_{0,i}(h_i)} \tilde{v}_{1,i}(x) - \tilde{v}'_{0,i}(h_i) \tilde{v}_{2,i}(x), \quad (2.4.8)$$

$$\tilde{\varphi}_{2,i}(x) := -\tilde{v}_{0,i}(h_i) \tilde{v}_{2,i}(x). \quad (2.4.9)$$

A partir de esta aproximación de la matriz de monodromía podemos obtener una expresión aproximada de la ecuación (2.3.17), es decir,

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{d}_N \end{pmatrix} = \frac{1}{2k} c_1 \begin{pmatrix} k & 1 \\ k & -1 \end{pmatrix} A_N \tilde{M}_{N-1,N} A_{N-1} \cdots A_2 \tilde{M}_{1,2} A_1 \begin{pmatrix} 1 \\ k \end{pmatrix}, \quad (2.4.10)$$

a partir de la cual obtenemos una aproximación de la ecuación de dispersión del problema, la cual se representa por $\tilde{\kappa}(k) = 0$, donde $\tilde{\kappa}$ es una aproximación de la función característica κ , la cual coincide con el elemento \tilde{m}_{11} del vector columna del lado derecho de la ecuación (2.4.10). Finalmente los ceros k_i de la ecuación $\tilde{\kappa}(k) = 0$ que satisfacen $k_i > 0$, determinan aproximaciones de los eigen-valores del problema espectral $\tilde{\lambda}_i = -k_i^2$. La eigen-función asociada a cada eigen-valor $\tilde{\lambda}_i$ está definida por una función a trozos de la siguiente manera

$$\tilde{u}_i(x) = \begin{cases} e^{k_i(x-h_1)}, & -\infty < x < h_1, \\ \tilde{u}_{1,2}(h_1; k_i) \tilde{\varphi}_{1,1}(x; k_i) + \tilde{u}'_{1,2}(h_1; k_i) \tilde{\varphi}_{2,1}(x; k_i), & h_1 < x < h_2, \\ \vdots & \vdots \\ \tilde{u}_{i,i+1}(h_i; k_i) \tilde{\varphi}_{1,i}(x; k_i) + \tilde{u}'_{i,i+1}(h_i; k_i) \tilde{\varphi}_{2,i}(x; k_i), & h_i < x < h_{i+1}, \\ \vdots & \vdots \\ \tilde{u}_{N-1,N}(h_{N-1}; k_i) \tilde{\varphi}_{1,N-1}(x; k_i) + \tilde{u}'_{N-1,N}(h_{N-1}; k_i) \tilde{\varphi}_{2,N-1}(x; k_i), & h_{N-1} < x < h_N \\ \tilde{d}_N(k_i) e^{-k_i(x-h_2)}, & h_N < x < \infty. \end{cases}$$

Capítulo 3

Resultados numéricos del problema de eigen-valores con potenciales regulares nulos y escalonados a trozos

3.1. Resultados numéricos con potencial regular nulo

Ejemplo 3.1. Consideremos el problema espectral

$$\mathcal{H}_{A_1} u = \lambda u, \quad u \in \text{Dom} (\mathcal{H}_{A_1}),$$

donde $\mathcal{H}_{A_1} = -d^2/dx^2$, $x \in \mathbb{R} \setminus \{h_1\}$, es el operador no-acotado asociado al operador formal de Schrödinger S_0 dado por

$$S_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + q_s \quad x \in \mathbb{R}$$

con un potencial regular nulo, es decir, $q_r \equiv 0$, cuyo dominio está definido por

$$\text{Dom} (\mathcal{H}_{A_1}) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1\}) : \begin{pmatrix} u_{\text{II}}(h_1) \\ u'_{\text{II}}(h_1) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} u_{\text{I}}(h_1) \\ u'_{\text{I}}(h_1) \end{pmatrix} \right\},$$

donde A_1 es la matriz asociada con las condiciones de frontera que establece el potencial singular, la cual se considera igual a

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha_1 & 1 \end{pmatrix},$$

que corresponde con una interacción tipo delta de Dirac, con intensidad $\alpha_1 < 0$. Las interacciones de este tipo establecen la continuidad de la función y el salto en su derivada en el punto h_1 . Si tomamos $\alpha_1 = -1$ la ecuación de dispersión $\kappa(k) = 0$ para este problema se define a partir de la función analítica

$$\kappa(k) = 1 - \frac{1}{2k}$$

cuyo único cero es $k_1 = 0,5$, por lo tanto, el eigen-valor asociado es $\lambda_1 = -0,25$. La eigen-función normalizada correspondiente a este eigen-valor es

$$\varphi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{cases} e^{k_1 x}, & -\infty < x \leq h_1, \\ e^{-k_1 x}, & h_1 \leq x < \infty, \end{cases}$$

cuya gráfica se muestra en la Figura 3.1.1, donde podemos ver que efectivamente esta solución es continua en el punto h_1 . Además, podemos notar que la eigen-función decrece conforme $x \rightarrow \pm\infty$.

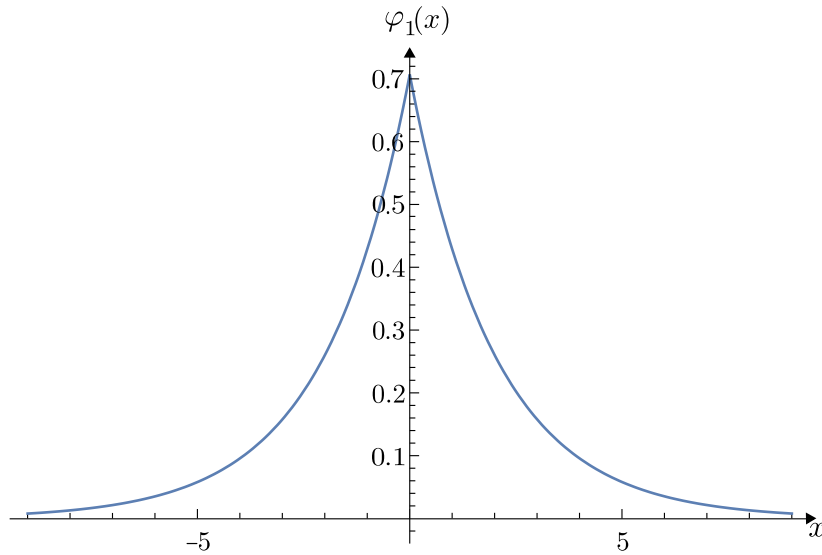


Figura 3.1.1. Eigen-función correspondiente a $\lambda_1 = -0,25$ del Ejemplo 3.1.

La derivada de esta eigen-función es

$$\varphi_1'(x) = \frac{k_1}{\sqrt{2}} \begin{cases} e^{k_1 x}, & -\infty < x < h_1, \\ -e^{-k_1 x}, & h_1 < x < \infty, \end{cases}$$

donde en la gráfica (ver Fig. 3.1.2) podemos ver la discontinuidad en la derivada que establecen las condiciones de frontera para las interacciones tipo delta de Dirac.

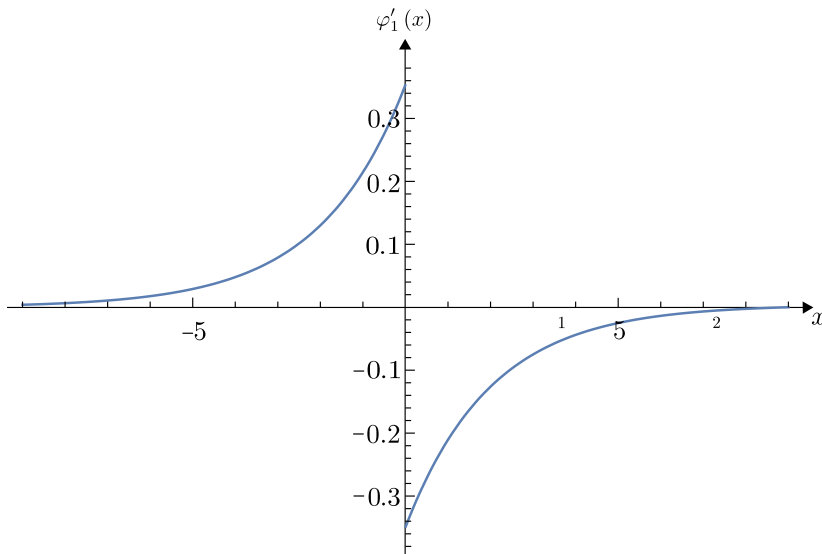


Figura 3.1.2. Derivada de la eigen-función asociada al eigen-valor λ_1 del Ejemplo 3.1.

Ejemplo 3.2. Continuando el ejemplo anterior, consideramos los siguientes valores $\alpha_1 = -2$ y $\alpha_1 = -3$ en la intensidad de la delta de Dirac, como se muestra en la Figura 3.1.3. En la ecuación de dispersión $\kappa(k) = 0$

la función κ toma las siguientes formas dependiendo del valor de la intensidad α_1

$$\begin{aligned}\kappa(k) &= 1 - \frac{1}{k}, & (\alpha_1 = -2), \\ \kappa(k) &= 1 - \frac{3}{2k}, & (\alpha_1 = -3).\end{aligned}$$

Estas expresiones tienen un único cero en $k_1 = 1$ ($\alpha_1 = -2$) y $k_1 = 1,5$ ($\alpha_1 = -3$), respectivamente, cuyos eigen-valores asociados son $\lambda_1 = -1$ ($\alpha_1 = -2$) y $\lambda_1 = -2,25$ ($\alpha_1 = -3$). Observemos que en ambos casos tenemos un eigen-valor único. Si la interpretación de dichas eigen-funciones se considera en el ámbito de la mecánica cuántica podemos observar que las interacciones con intensidades más negativas tienen una densidad de probabilidad más localizada alrededor del punto h_i donde la interacción se localiza. Por otra parte, las intensidades más positivas tienen una densidad de probabilidad más dispersa alrededor del punto h_i . Sin embargo, en ambos casos el máximo de la densidad de probabilidad ocurre en el punto donde está la interacción.

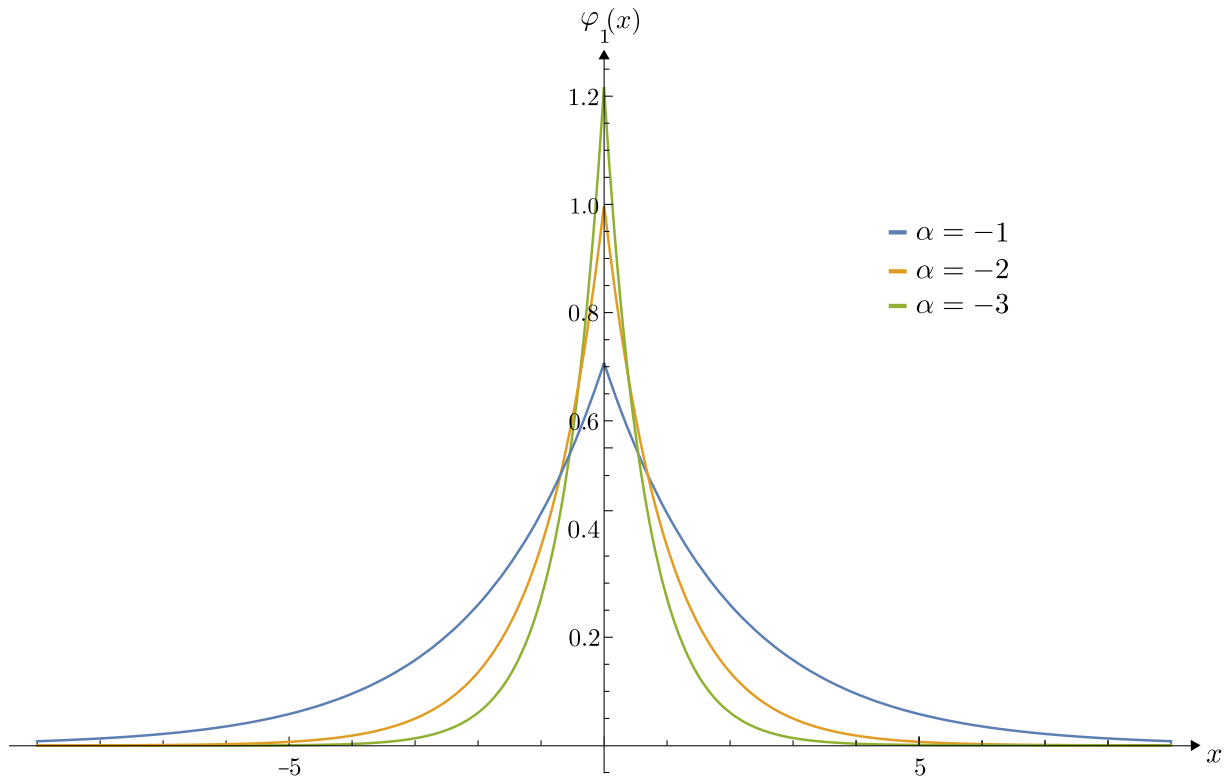


Figura 3.1.3. Eigen-funciones normalizadas del Ejemplo 3.2 para distintos valores de la intensidad de la interacción.

Ejemplo 3.3. Consideremos el sistema cuántico con dos interacciones puntuales tipo delta de Dirac localizadas en donde $h_1 = 0$ y $h_2 = 2$ cuyo Hamiltoniano se describe por el operador de Schrödinger

$$\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}} u = \lambda u, \quad u \in \text{Dom}(\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}}),$$

donde $\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}} = -d^2/dx^2$, $x \in \mathbb{R} \setminus \{0, 2\}$, es el operador no-acotado asociado al operador formal de Schrödinger S_0 dado por

$$S_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + q_s, \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{0, 2\}.$$

En los puntos donde se localizan las interacciones tipo δ las condiciones de frontera se representan en forma matricial como

$$\begin{pmatrix} u_{\text{II}}(0) \\ u'_{\text{II}}(0) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} u_{\text{I}}(0) \\ u'_{\text{I}}(0) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} u_{\text{III}}(2) \\ u'_{\text{III}}(2) \end{pmatrix} = A_2 \begin{pmatrix} u_{\text{II}}(2) \\ u'_{\text{II}}(2) \end{pmatrix},$$

donde las matrices A_i ($i = 1, 2$) son

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha_1 & 1 \end{pmatrix}, \quad A_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha_2 & 1 \end{pmatrix}, \quad \alpha_1, \alpha_2 < 0.$$

El dominio del operador $\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}}$ está definido por el conjunto de funciones

$$\text{Dom} (\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}}) = \left\{ u \in H^2 (\mathbb{R} \setminus \{h_1, h_2\}) : \begin{pmatrix} u(h_i^+) \\ u'(h_i^+) \end{pmatrix} = A_i \begin{pmatrix} u(h_i^-) \\ u'(h_i^-) \end{pmatrix}, i = 1, 2 \right\}.$$

Supongamos que $\alpha_1 = \alpha_2 = -2$, en este caso la expresión para la función κ toma la forma

$$\kappa(k) = -e^{-4k} + (-1 + k)^2.$$

Para obtener los ceros de la ecuación de dispersión $\kappa(k) = 0$ usamos la instrucción `NSolve` del software Wolfram Mathematica. Los valores $k_i > 0$ que se obtuvieron son $k_1 = 1,10886$, $k_2 = 0,796812$. En ese caso los eigen-valores del problema son $\lambda_1 = -1,229563$, $\lambda_2 = -0,634909$.

La expresión para la eigen-función normalizada del sistema asociada con el parámetro k_i se puede representar por la función continua a trozos

$$\varphi_i(x) = \frac{1}{L_i} \begin{cases} e^{k_i x}, & -\infty < x \leq 0, \\ \frac{1}{k} e^{-k_i x} (1 + e^{2k_i x} (-1 + k_i)), & 0 \leq x \leq 2, \\ \frac{1}{k_i^2} e^{-k_i x} (1 + e^{4k_i} (-1 + k_i) + k_i), & 2 \leq x < \infty, \end{cases}$$

donde L_i ($i = 1, 2$) es la constante de normalización calculada a partir de la norma en $\mathcal{L}^2 (\mathbb{R} \setminus \{0, 2\})$. En este caso las constantes de normalización toman los valores $L_1 = 1,407382$, $L_2 = 1,367460$. Las gráficas de las eigen-funciones normalizadas se muestran en la Fig 3.1.4 y 3.1.5.

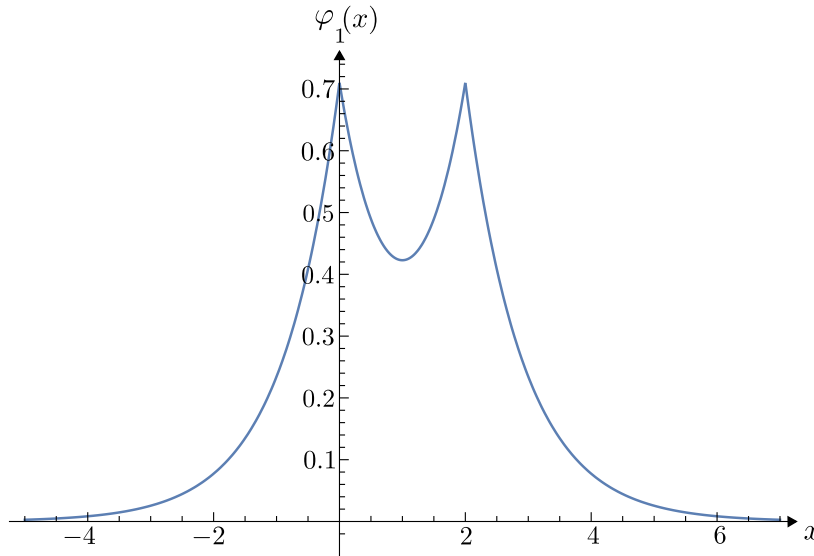


Figura 3.1.4. Estado base del sistema cuántico del Ejemplo 3.3 correspondiente a $\lambda_1 = -1,229563$.

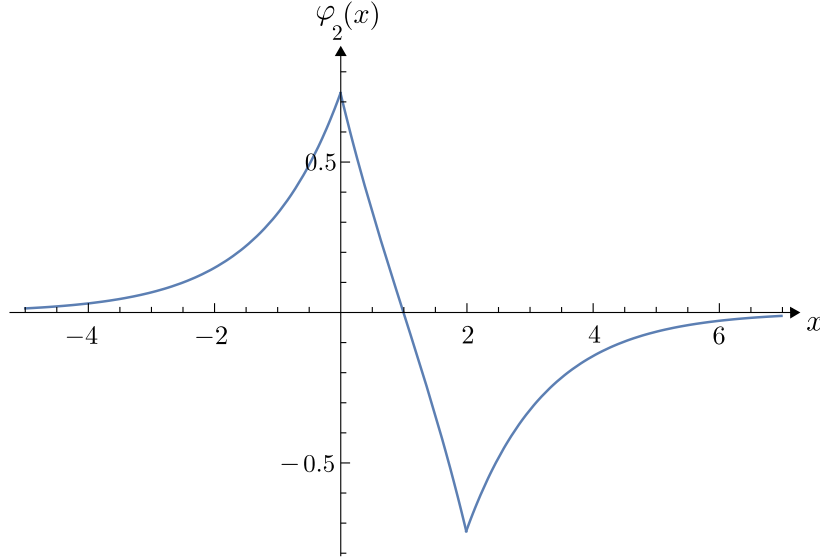


Figura 3.1.5. Primer estado excitado correspondiente al eigen-valor $\lambda_2 = -0,634909$ del Ejemplo 3.3.

Ejemplo 3.4. Consideremos un problema con tres interacciones tipo delta de Dirac localizadas en los siguientes puntos: $h_1 = 0$, $h_2 = 2$ y $h_3 = 4$ cuyas intensidades son $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = -2$. En los puntos donde se localizan las interacciones tipo δ las condiciones de frontera se representan en forma matricial como

$$\begin{pmatrix} u_{\text{II}}(0) \\ u'_{\text{II}}(0) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} u_{\text{I}}(0) \\ u'_{\text{I}}(0) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} u_{\text{III}}(2) \\ u'_{\text{III}}(2) \end{pmatrix} = A_2 \begin{pmatrix} u_{\text{II}}(2) \\ u'_{\text{II}}(2) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} u_{\text{IV}}(4) \\ u'_{\text{IV}}(4) \end{pmatrix} = A_3 \begin{pmatrix} u_{\text{III}}(4) \\ u'_{\text{III}}(4) \end{pmatrix},$$

donde las matrices A_i ($i = 1, 2, 3$) de condiciones de frontera son

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha_1 & 1 \end{pmatrix}, \quad A_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha_2 & 1 \end{pmatrix}, \quad A_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha_3 & 1 \end{pmatrix}.$$

Sea $\mathcal{H}_{\{A_1, A_2, A_3\}} = -d^2/dx^2$, $x \in \mathbb{R} \setminus \{h_1, h_2, h_3\}$, el Hamiltoniano del sistema cuyo dominio se define por

$$\text{Dom}(\mathcal{H}_{\{A_1, A_2, A_3\}}) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1, h_2, h_3\}) : \begin{pmatrix} u(h_i^+) \\ u'(h_i^+) \end{pmatrix} = A_i \begin{pmatrix} u(h_i^-) \\ u'(h_i^-) \end{pmatrix}, i = 1, 2, 3 \right\}.$$

Consideremos el problema de eigen-valores descrito por la ecuación

$$\mathcal{H}_{\{A_1, A_2, A_3\}} u = \lambda u, \quad u \in \text{Dom}(\mathcal{H}_{\{A_1, A_2, A_3\}}).$$

En este caso la expresión para la función característica κ es

$$\kappa(k) = \frac{e^{-8k} \left(-1 - 2e^{4k}(-1+k) + e^{8k}(-1+k)^3 - k \right)}{k^3},$$

de modo que los eigen-valores del operador $\mathcal{H}_{\{A_1, A_2, A_3\}}$ se determinan por los ceros de la ecuación de dispersión $\kappa(k) = 0$. Numéricamente, los ceros de esta ecuación se determinan usando la instrucción `NSolve` de Wolfram Mathematica. En este caso los ceros $k_i > 0$ que se obtienen son $k_1 = 1,147626$, $k_2 = 0,980172$, $k_3 = 0,649819$, y los eigen-valores correspondientes son $\lambda_1 = -1,317045$, $\lambda_2 = -0,960737$ y $\lambda_3 = -0,422264$. La eigen-función normalizada φ_i asociada al parámetro k_i tienen la siguiente forma

$$\varphi_i(x) = \frac{1}{L_i} \begin{cases} e^{k_i x}, & -\infty < x \leq 0, \\ \frac{1}{k} e^{-k_i x} (1 + e^{2k_i x} (-1 + k_i)), & 0 \leq x \leq 2, \\ \frac{1}{k_i^2} e^{k_i x} \left(1 + e^{2k_i(-2+x)} (-1 + e^{4k_i} (-1 + k_i)^2) + e^{4k_i} (-1 + k_i) + k_i \right), & 2 \leq x \leq 4, \\ \frac{1}{k_i^3} e^{-k_i x} \left(e^{8k_i} (-1 + k_i)^2 + (1 + k_i)^2 + e^{4k_i} (-2 + k_i^2) \right), & 4 \leq x < \infty, \end{cases}$$

donde L_i es la constante de normalización calculada a partir de la norma en el espacio $\mathcal{L}^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1, h_2, h_3\})$. En este ejemplo las constantes de normalización son $L_1 = 1,95689$, $L_2 = 1,38442$ y $L_3 = 1,96054$. En las Figura 3.1.6 en la Figura 3.1.7 presentamos el primer estado excitado y finalmente, en la Figura 3.1.8 está representado el segundo estado excitado.

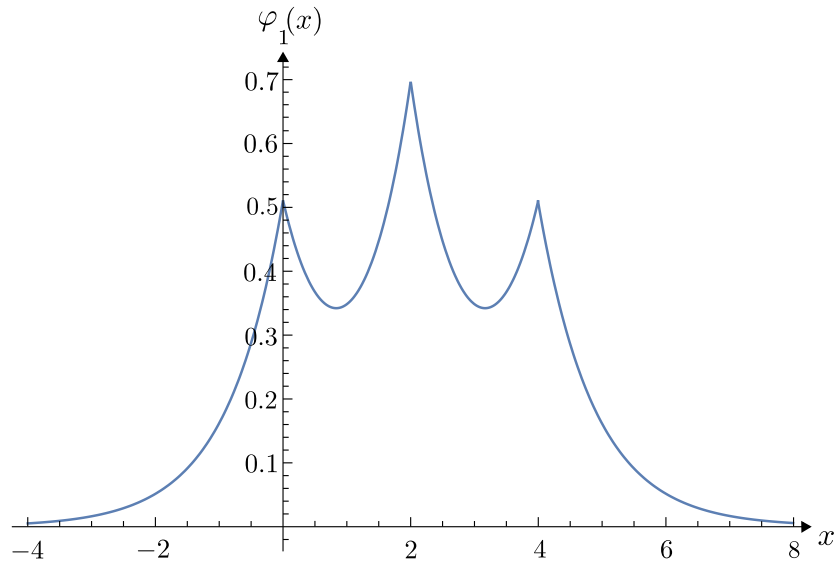


Figura 3.1.6. Estado base del Ejemplo 3.4 correspondiente a $\lambda_1 = -1,317045$.

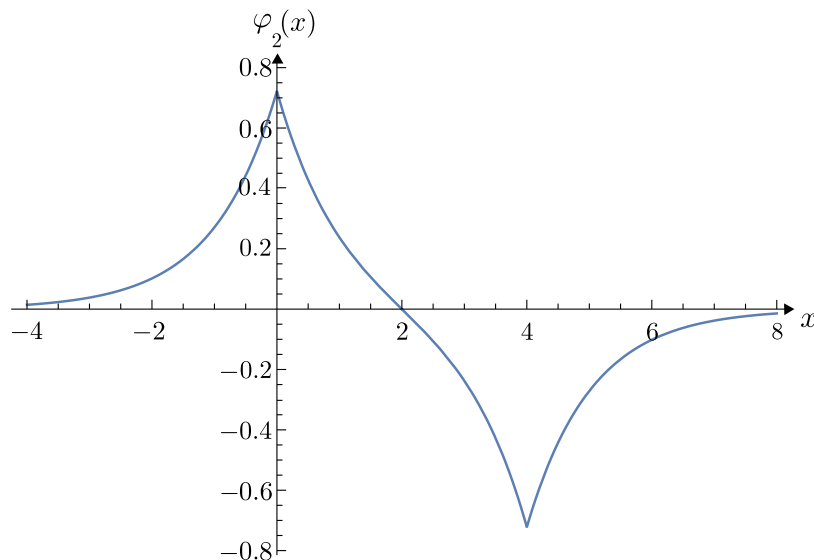


Figura 3.1.7. Primer estado excitado del Ejemplo 3.4 correspondiente a $\lambda_2 = -0,960737$.

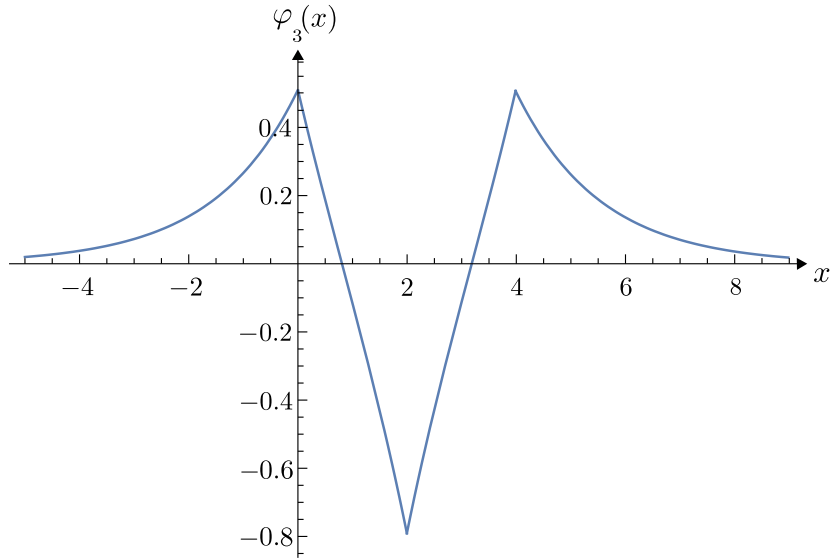


Figura 3.1.8. Segundo estado excitado del Ejemplo 3.4 correspondiente a $\lambda_3 = -0,422264$.

Los Ejemplos 3.1-3.4 pueden tener diferentes interpretaciones dependiendo del ámbito donde se implemente. Consideramos interacciones tipo δ en los ejemplos anteriores, en el ámbito de la mecánica cuántica podemos ver que en los lugares donde la probabilidad de encontrar a la partícula es mayor coincide con los puntos donde está definidas las interacciones; en electrodinámica, por ejemplo en la Figura 3.1.4, las interacciones puntuales coinciden con los lugares donde la intensidad del campo eléctrico o magnético es mayor. Por otra parte, si se tratase de una guía de onda las interacciones puntuales representan las paredes de dicha guía las cuales representan láminas de grosor muy pequeño.

Finalmente, en las gráficas 3.1.5, 3.1.7 y 3.1.8 podemos ver que existen nodos y picos, los cuales resultan de una superposición de dos o más ondas que al interferir producen una interferencia constructiva (picos) o destructiva (nodos).

Ejemplo 3.5. Consideremos el siguiente problema de eigen-valores

$$\mathcal{H}_{A_1} u = \lambda u, \quad u \in \text{Dom} (\mathcal{H}_{A_1}),$$

donde $\mathcal{H}_{A_1} = -d^2/dx^2$, $x \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, es el operador no-acotado asociado al operador formal de Schrödinger

$$S_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + \beta_1 \delta'(x), \quad x \in \mathbb{R}$$

con un potencial regular nulo y $\lambda \in \mathbb{R}$ es el parámetro espectral. El dominio de este operador está definido por

$$\text{Dom} (\mathcal{H}_{A_1}) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{0\}) : \begin{pmatrix} u_{\text{II}}(0) \\ u'_{\text{II}}(0) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} u_{\text{I}}(0) \\ u'_{\text{I}}(0) \end{pmatrix} \right\},$$

donde la matriz de condiciones de frontera asociada al punto 0 es

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & \beta_1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

las cuales establecen la continuidad de la derivada y el salto de la función en el punto h_1 . Supongamos que la intensidad de la interacción tipo δ' es $\beta_1 = -1$, entonces la ecuación de dispersión $\kappa(k) = 0$ se define a partir de la función

$$\kappa(k) = 1 - \frac{k}{2}.$$

En este caso la ecuación de dispersión tiene un único cero $k > 0$ dado por $k_1 = 2$, de modo que el eigen-valor correspondiente es $\lambda_1 = -4$ y la eigen-función normalizada asociada al parámetro k_1 es

$$\varphi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{cases} e^{k_1 x}, & -\infty < x < 0, \\ -e^{-k_1 x}, & 0 < x < \infty. \end{cases}$$

La derivada de la eigen-función normalizada es

$$\varphi_1'(x) = \frac{k_1}{\sqrt{2}} \begin{cases} e^{k_1 x}, & -\infty < x \leq 0, \\ e^{-k_1 x}, & 0 \leq x < \infty. \end{cases}$$

Podemos observar en la Figura 3.1.9 la discontinuidad de la eigen-función en el punto $x = 0$, mientras que en la Figura 3.1.10 se observa la continuidad de su derivada, tal como lo establecen las condiciones matriciales anteriores.

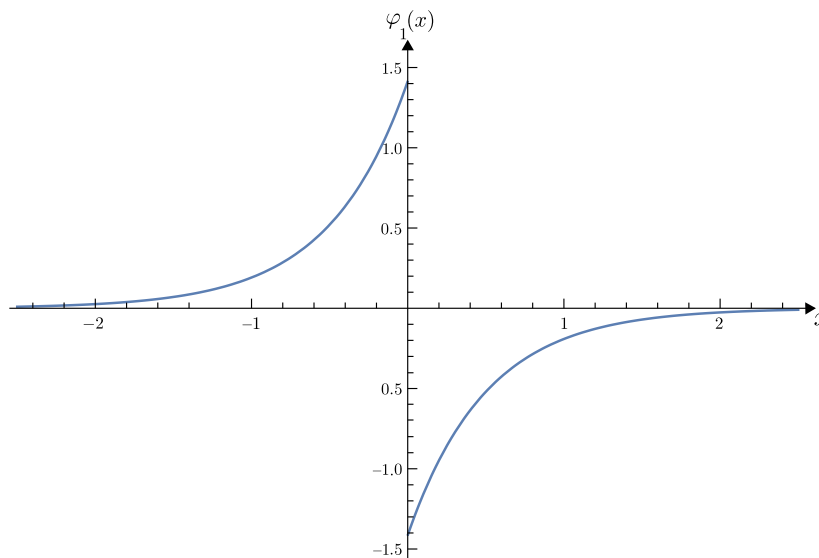


Figura 3.1.9. Eigen-función correspondiente a $\lambda_1 = -4$.

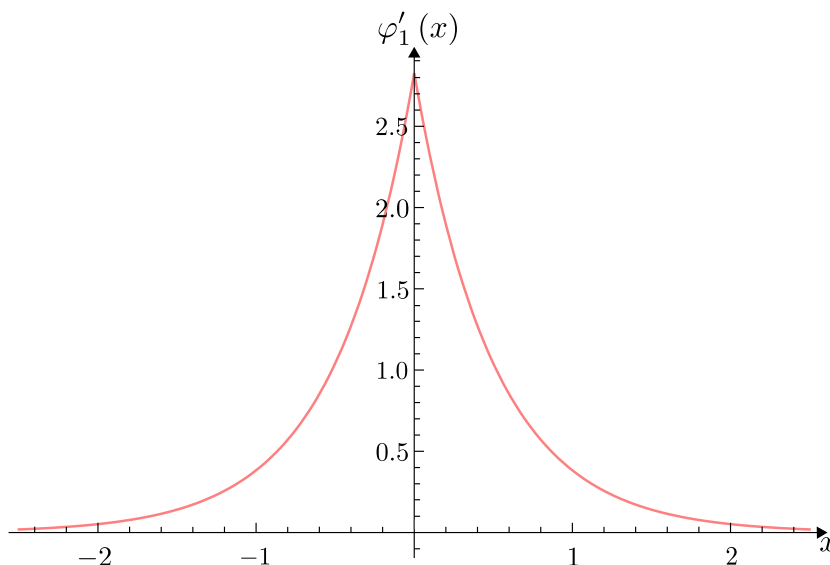


Figura 3.1.10. Derivada de la eigen-función correspondiente a $\lambda_1 = -4$.

Ejemplo 3.6. Consideremos un problema espectral con dos interacciones tipo δ' localizadas en $h_1 = 0$ y $h_2 = 2$ descrito como

$$\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}} u = \lambda u, \quad u \in \text{Dom} (\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}}),$$

donde el Hamiltoniano $\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}} = -d^2/dx^2$, $x \in \mathbb{R} \setminus \{0, 2\}$ cuyas intensidades son $\beta_1 = \beta_2 = -1$. En los puntos donde se localizan las interacciones tipo δ' las condiciones de frontera se representan en forma matricial como

$$\begin{pmatrix} u_{\text{II}}(0) \\ u'_{\text{II}}(0) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} u_{\text{I}}(0) \\ u'_{\text{I}}(0) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} u_{\text{III}}(2) \\ u'_{\text{III}}(2) \end{pmatrix} = A_2 \begin{pmatrix} u_{\text{II}}(2) \\ u'_{\text{II}}(2) \end{pmatrix},$$

donde las matrices A_i ($i = 1, 2$) de condiciones de frontera puntuales en forma matricial son

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A_2 = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

El dominio del operador $\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}}$ está definido por el conjunto de funciones

$$\text{Dom} (\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}}) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1, h_2\}) : \begin{pmatrix} u(h_i^+) \\ u'(h_i^+) \end{pmatrix} = A_i \begin{pmatrix} u(h_i^-) \\ u'(h_i^-) \end{pmatrix}, i = 1, 2 \right\}.$$

Entonces la expresión para κ toma la forma

$$\kappa(k) = e^{4k}(-2+k)^2 - k^2.$$

Usamos la instrucción `NSolve` del software Wolfram Mathematica para conocer los ceros $k_i > 0$ de la ecuación de dispersión $\kappa(k) = 0$. Los valores obtenidos son $k_1 = 2,034764$, $k_2 = 1,961179$. Los eigen-valores correspondientes $\lambda_i = -k_i^2$ son $\lambda_1 = -4,14027$, $\lambda_2 = -3,84623$. La eigen-funciones normalizada se representa por la función continua a trozos

$$\varphi_i = \frac{1}{L_i} \begin{cases} e^{k_i x}, & -\infty < x < h_1 \\ (1 - k_i) \cosh(k_i x) + \sinh(k_i x), & h_1 < x < h_2, \\ \frac{1}{4} k_i e^{-k_i x} (e^{4k_i} (k_i - 2) - k_i - 2), & h_2 < x < \infty, \end{cases}$$

donde L_i ($i = 1, 2$) es la constante de normalización calculada a partir de la norma en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1, h_2\})$. Las constantes de normalización toman los siguientes valores $L_1 = 1,034764$, $L_2 = 0,961179$. Las gráficas de las eigen-funciones de este problema se muestran en las Figuras 3.1.11 y 3.1.12. Observe las discontinuidades de las eigen-funciones en los puntos donde se encuentran localizadas las distribuciones δ' .

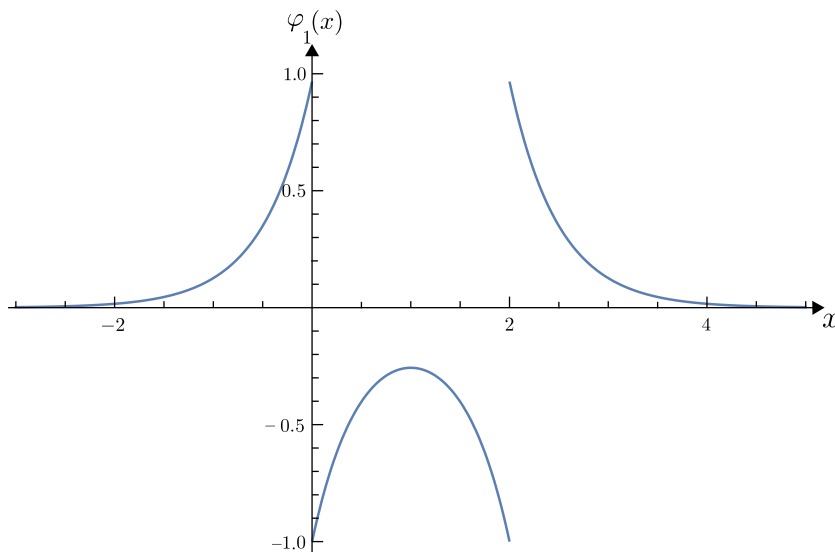


Figura 3.1.11. Eigen-función correspondiente a $\lambda_1 = -4,14027$ del Ejemplo 3.6.

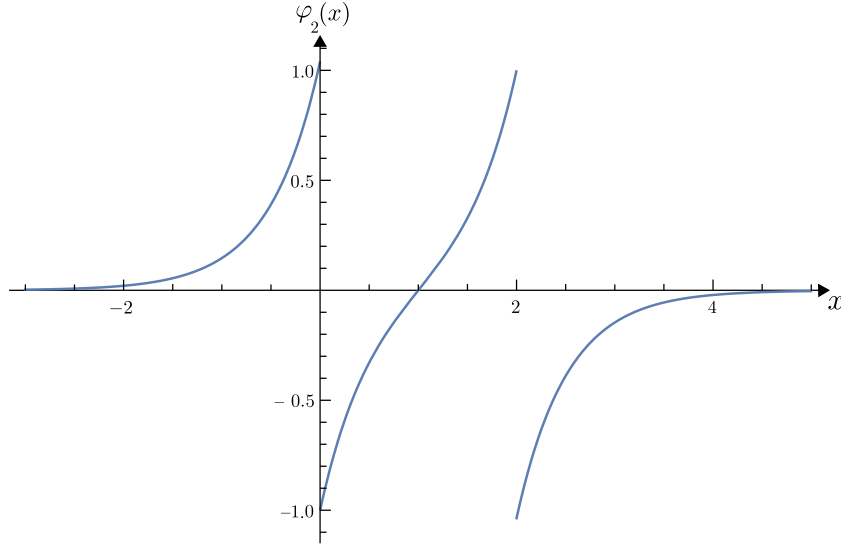


Figura 3.1.12. Eigen-función correspondiente a $\lambda_2 = -3,84623$ del Ejemplo 3.6.

Ejemplo 3.7. Consideremos el problema espectral

$$\mathcal{H}_{A_i} u = \lambda u, \quad u \in \text{Dom} (\mathcal{H}_{A_i}),$$

donde $\mathcal{H}_{A_i} = -d^2/dx^2$, $x \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, es el operador no-acotado asociado al operador formal de Schrödinger S_0 dado por

$$S_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + \alpha_1 \delta(x) + \beta_1 \delta'(x), \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{0\},$$

donde $\alpha_1, \beta_1 < 0$ en el punto donde se localiza la combinación de interacciones tipo delta de Dirac y su primera derivada las condiciones de frontera se representan en forma matricial como

$$\begin{pmatrix} u_{\text{II}}(0) \\ u'_{\text{II}}(0) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} u_{\text{I}}(0) \\ u'_{\text{I}}(0) \end{pmatrix}$$

donde la matriz A_1 en este caso en particular es

$$A_1 = \begin{pmatrix} \frac{1 - \frac{1}{4}\alpha_1\beta_1}{1 + \frac{1}{4}\alpha_1\beta_1} & -\frac{\beta_1}{1 + \frac{1}{4}\alpha_1\beta_1} \\ \frac{\alpha_1}{1 + \frac{1}{4}\alpha_1\beta_1} & \frac{1 - \frac{1}{4}\alpha_1\beta_1}{1 + \frac{1}{4}\alpha_1\beta_1} \end{pmatrix}, \quad \alpha\beta \neq 4.$$

Entonces, el dominio del operador $\mathcal{H}_{\{A_1\}}$ es

$$\text{Dom} (\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}}) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{0\}) : \begin{pmatrix} u(0) \\ u'(0) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} u(0) \\ u'(0) \end{pmatrix} \right\}.$$

Proponemos que la intensidad de las interacciones sean $\alpha_1 = -3$ y $\beta_1 = -2$.

La ecuación de dispersión $\kappa(k) = 0$, donde

$$\kappa(k) = \frac{2k^2 - k - 3}{5k}.$$

Se puede ver que el único cero es $k_1 = 1,5$, por lo tanto, el eigen-valor correspondiente es $\lambda_1 = -2,25$. La eigen-función normalizada correspondiente es

$$\varphi_1(x) = \frac{1}{0,81649} \begin{cases} e^{k_1 x}, & -\infty < x \leq 0, \\ e^{-k_1 x}, & 0 \leq x < \infty, \end{cases}$$

cuya gráfica se muestra en la Figura 3.1.13.

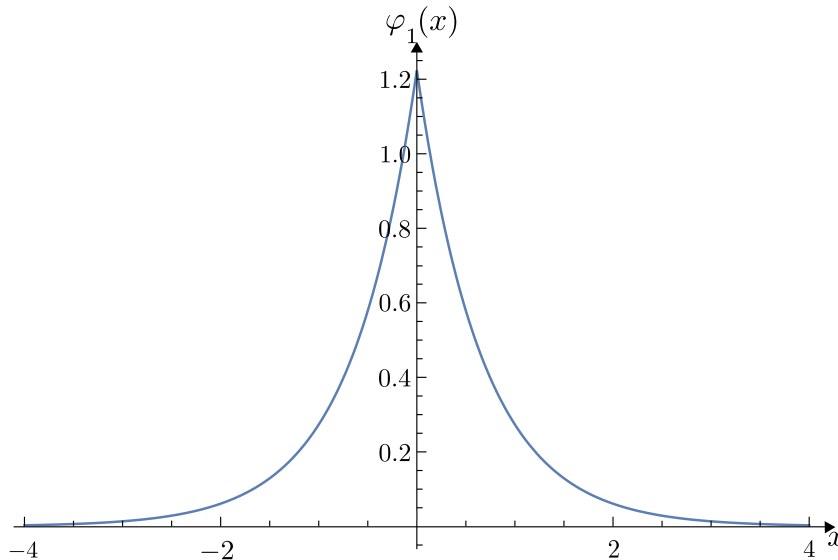


Figura 3.1.13. Eigen-función asociada al eigen-valor $\lambda_1 = 2,25$ del Ejemplo 3.7.

Observación 3.1. De los ejemplos 3.3, 3.4, 3.6 resaltamos el hecho de que no existe degeneración de eigen-valores, esto ocurre por la condición de que el determinante de la matriz de condiciones en frontera sea igual a uno. Con ello se cumple el principio de exclusión de Pauli, el cual establece que si un estado cuántico ya se ocupa por una partícula, la siguiente partícula debe ir a un estado superior de energía que se encuentre libre, completándose los estados vacíos desde la energía más baja hasta la más alta, esto evita que la partícula caiga constantemente a su estado más base o fundamental.

3.2. Eigen-valores de un sistema con potenciales escalonados e interacciones puntuales

Ejemplo 3.8. Consideremos el problema de eigen-valores

$$\mathcal{H}_{A_1} u = \lambda u, \quad u \in \text{Dom}(\mathcal{H}_{A_1}),$$

donde \mathcal{H}_{A_1} es el operador no-acotado asociado al operador de Schrödinger S_0 con un potencial regular q_r escalonado a trozos

$$q_r(x) = \begin{cases} q_1, & \infty < x \leq h_1, \\ q_2, & h_1 \leq x < \infty, \end{cases}, \quad q_1, q_2 < 0$$

y λ el parámetro espectral, el dominio de este operador está definido

$$\text{Dom}(\mathcal{H}_{A_1}) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1\}) : \begin{pmatrix} u_{\text{II}}(h_1) \\ u'_{\text{II}}(h_1) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} u_{\text{I}}(h_1) \\ u'_{\text{I}}(h_1) \end{pmatrix} \right\},$$

donde las condiciones de frontera para $h_1 = 0$ en forma matricial son

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha_1 & 1 \end{pmatrix},$$

consideramos la intensidad de la delta de Dirac $\alpha_1 = -2$ y los potenciales $q_1 = -2$ y $q_2 = -4$. La ecuación correspondiente es

$$\kappa(k) = -2 + \sqrt{k^2 - 4} + \sqrt{k^2 - 2},$$

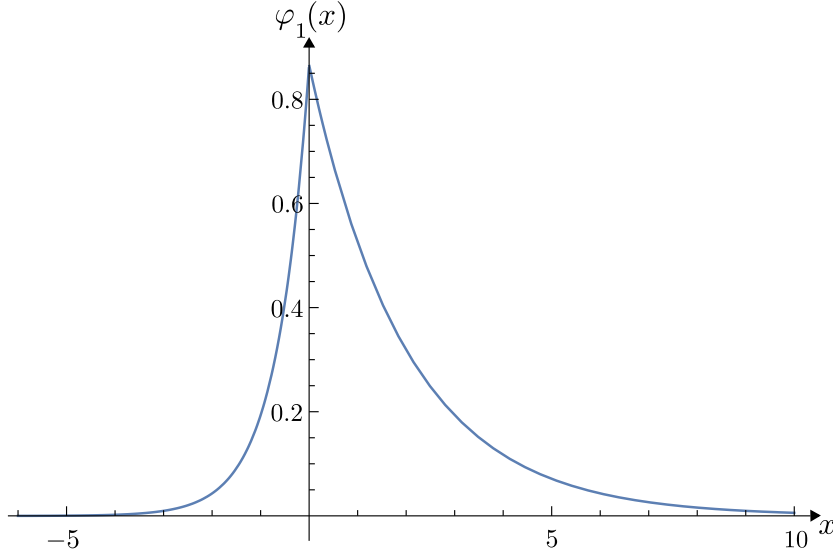


Figura 3.2.1. Eigen-función correspondiente a $\lambda_1 = -4,25$ del Ejemplo 3.8.

por medio de la instrucción `NSolve` del software Wolfram Mathematica 11.0.1.0 obtenemos los ceros de la ecuación de dispersión $\kappa(k)$, en este ejemplo obtenemos un único cero en $k_1 = 2,06155$, el eigen-valor correspondiente es $\lambda_1 = -4,25$. La eigen-función está dada como

$$\varphi_1(x) = \frac{1}{L_1} \begin{cases} e^{\gamma_1(k_1)x}, & -\infty < x \leq h_1 \\ d_1(k_1) e^{-\gamma_2(k_1)x}, & h_1 \leq x < \infty, \end{cases}$$

donde $L_1 = 1,1547$ y

$$d_1(\gamma_1) = \frac{2 + \sqrt{\gamma^2 - 4} - \sqrt{\gamma^2 - 2}}{2\sqrt{\gamma^2 - 4}},$$

la gráfica de la eigen-función se muestra a continuación. Note que la eigen-función para el Ejemplo 3.8 decrece más rápido si el potencial regular es mayor. A diferencia de nuestros primeros resultados podemos ver que la Figura 3.2.1 ya no es simétrica a comparación de la Figura 3.1.1.

Ejemplo 3.9. Consideremos el problema con dos interacciones tipo delta de Dirac localizadas en los puntos $h_1 = 0$ y $h_2 = 2$, donde el problema espectral está dada como

$$\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}} u = \lambda u, \quad u \in \text{Dom}(\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}}).$$

En este caso q_r está definido como

$$q_r(x) = \begin{cases} q_1, & -\infty < x \leq h_1, \\ q_2, & h_1 \leq x \leq h_2, \\ q_3, & h_2 \leq x < \infty, \end{cases} \quad q_1, q_2, q_3 < 0$$

donde q_1 , q_2 y q_3 representan tres niveles del potencial regular, la representación matricial de las condiciones de frontera es

$$\begin{pmatrix} u_{\text{II}}(h_1) \\ u'_{\text{II}}(h_1) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} u_{\text{I}}(h_1) \\ u'_{\text{I}}(h_1) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} u_{\text{III}}(h_2) \\ u'_{\text{III}}(h_2) \end{pmatrix} = A_2 \begin{pmatrix} u_{\text{II}}(h_2) \\ u'_{\text{II}}(h_2) \end{pmatrix},$$

donde las matrices A_i ($i = 1, 2$) de condiciones de frontera puntuales en forma matricial son

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha_1 & 1 \end{pmatrix}, \quad A_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha_2 & 1 \end{pmatrix},$$

proponemos que las intensidades de las deltas de Dirac son $\alpha_1 = \alpha_2 = -2$. El dominio del operador $\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}}$ está definido como

$$\text{Dom} (\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}}) = \left\{ u \in H^2 (\mathbb{R} \setminus \{h_1, h_2\}) : \begin{pmatrix} u(h_i^+) \\ u'(h_i^+) \end{pmatrix} = A_i \begin{pmatrix} u(h_i^-) \\ u'(h_i^-) \end{pmatrix}, i = 1, 2 \right\}.$$

Proponemos que los niveles del potencial escalonado tomen los siguientes valores: $q_1 = q_3 = -2$ y $q_2 = -4$. La ecuación de dispersión $\kappa(k) = 0$, se define a partir de

$$\kappa(k) = 1 - k^2 + 2\sqrt{k^2 - 2} + (\sqrt{k^2 - 2} - 2) \sqrt{k^2 - 4} + e^{4\sqrt{k^2 - 4}} (k^2 - 1 - 2\sqrt{k^2 - 2} + (\sqrt{k^2 - 2} - 2) \sqrt{k^2 - 4})$$

donde los ceros de la ecuación de dispersión $k_i > 0$ fueron calculados por dos procedimientos: a partir de la instrucción `FindRoot` y de manera gráfica. En la Figura 3.2.2 mostramos la gráfica de la función analítica κ donde vemos que los ceros se encuentran en los valores de $k_1 = 1,85265$ y $k_2 = 2,11873$, estos valores coinciden con los obtenidos a partir de la instrucción `FindRoot`.

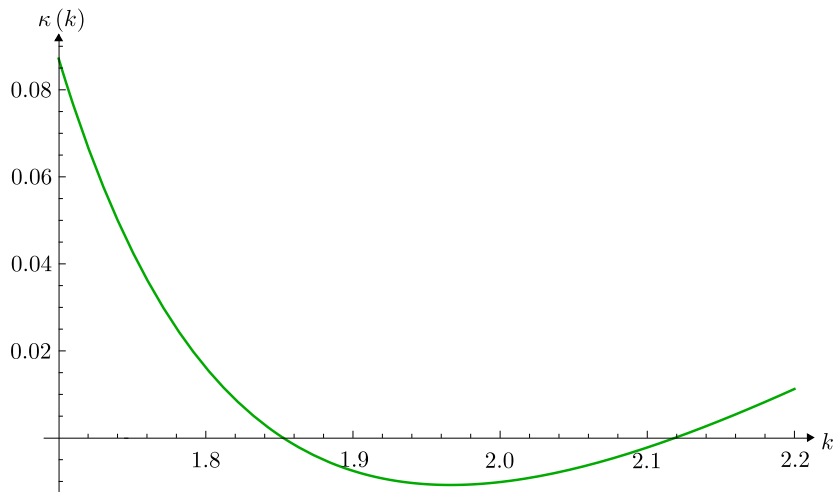


Figura 3.2.2. Gráfica de la función κ del Ejemplo 3.9.

Los eigen-valores correspondientes son $\lambda_1 = -4,48903$ y $\lambda_2 = -3,43232$, las eigen-funciones correspondientes se muestran en las Figuras 3.2.3 y 3.2.4.

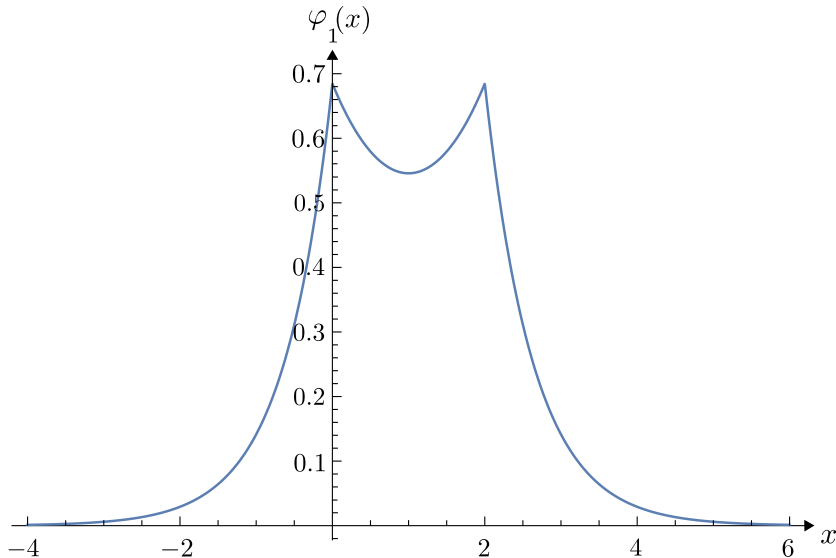


Figura 3.2.3. Eigen-función correspondiente a $\lambda_1 = -4,48903$ del Ejemplo 3.9.

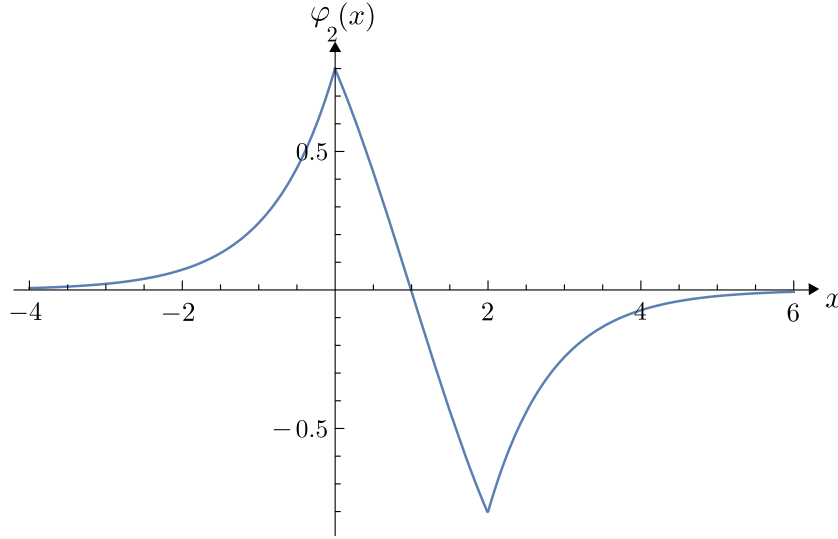


Figura 3.2.4. Eigen-función correspondiente a $\lambda_2 = -3,43232$ del Ejemplo 3.9.

Ejemplo 3.10. Consideremos el siguiente problema de eigen-valores con una interacción δ' localizada en $h_1 = 0$

$$\mathcal{H}_{A_1} u = \lambda u, \quad u \in \text{Dom}(\mathcal{H}_{A_1}),$$

donde $\mathcal{H}_{A_1} = -d^2/dx^2 + q_r(x)$, $x \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ es el operador no-acotado asociado al operador de Schrödinger S_0 con un potencial regular q_r escalonado a trozos

$$q_r(x) = \begin{cases} q_1, & -\infty < x < 0, \\ q_2, & 0 < x < \infty, \end{cases} \quad q_1, q_2 < 0$$

y $\lambda = -k_i^2$ es el parámetro espectral.

El dominio del operador \mathcal{H}_{A_1} está definido por el conjunto de funciones

$$\text{Dom}(\mathcal{H}_{A_1}) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1\}) : \begin{pmatrix} u_{\text{II}}(0) \\ u'_{\text{II}}(0) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} u_1(0) \\ u'_1(0) \end{pmatrix} \right\},$$

donde la matriz de condiciones de frontera asociada a la interacción δ' ubicada en 0 es

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & \beta_1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Proponemos que la intensidad de la derivada de la delta de Dirac sea $\beta_1 = -2$ y los potenciales $q_1 = -2$ y $q_2 = -4$. La ecuación de dispersión $\kappa(k) = 0$ donde

$$\kappa(k) = \frac{1}{2} + \sqrt{k^2 - 2} \left(\frac{1}{2\sqrt{k^2 - 4}} - 1 \right)$$

fue resuelta con la instrucción `NSolve` de Wolfram Mathematica 11.0.1.0 y el valor obtenido $k > 0$ fue $k_1 = 2,12876$, el eigen-valor correspondiente es $\lambda_1 = -4,53162$. La eigen-función correspondiente queda expresada como

$$\varphi_1(x) = \frac{1}{L_1} \begin{cases} e^{\gamma_1(k_1)x}, & -\infty < x < 0, \\ d_2(k_1) e^{-\gamma_2(k_1)x}, & 0 < x < \infty, \end{cases}$$

donde la constante de normalización es $L_1 = 1,89205$ y el coeficiente

$$d_1(k_1) = \frac{1}{2} - \sqrt{k_1^2 - 2} \left(\frac{1}{2\sqrt{k_1^2 - 4}} + 1 \right),$$

la gráfica correspondiente se muestra en la Figura 3.2.5.

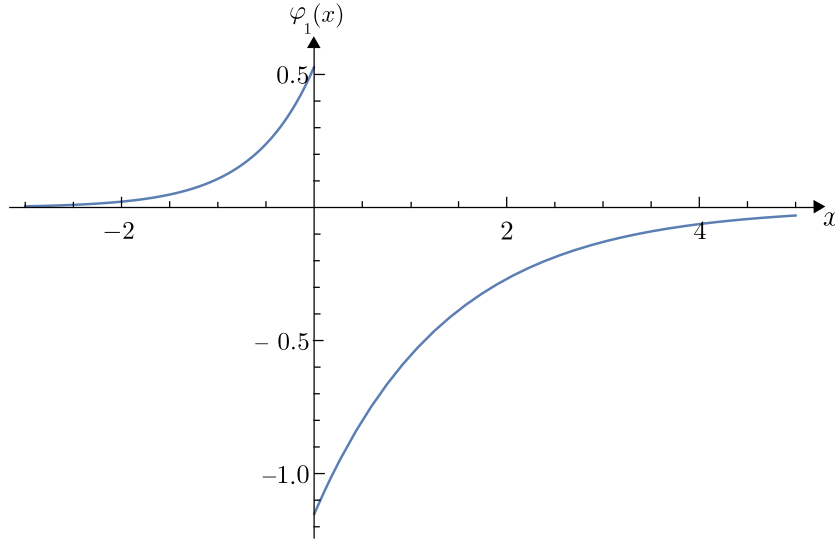


Figura 3.2.5. Eigen-función correspondiente a λ_1 del Ejemplo 3.10.

Ejemplo 3.11. En este ejemplo consideremos el problema que involucra dos interacciones tipo δ' con soporte en los puntos h_1 y h_2 , donde el problema de eigen-valores

$$\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}} u = \lambda u, \quad u \in \text{Dom} (\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}}),$$

En este caso q_r está definido como

$$q_r(x) = \begin{cases} q_1, & -\infty < x < h_1, \\ q_2, & h_1 < x < h_2, \\ q_3, & h_2 < x < \infty, \end{cases} \quad q_1, q_2, q_3 < 0$$

donde los niveles del potencial regular q_i toman los valores $q_1 = q_3 = -2$, $q_2 = -4$. Las condiciones en la frontera en forma matricial están dadas de la siguiente manera

$$\begin{pmatrix} u_{\text{II}}(h_1) \\ u'_{\text{II}}(h_1) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} u_{\text{I}}(h_1) \\ u'_{\text{I}}(h_1) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} u_{\text{III}}(h_2) \\ u'_{\text{III}}(h_2) \end{pmatrix} = A_2 \begin{pmatrix} u_{\text{II}}(h_2) \\ u'_{\text{II}}(h_2) \end{pmatrix},$$

donde las matrices A_i ($i = 1, 2$) asociadas a las condiciones puntuales en $h_1 = 0$ y $h_2 = 2$ son

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & \beta_1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A_2 = \begin{pmatrix} 1 & \beta_2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

El dominio del operador $\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}}$ es

$$\text{Dom} (\mathcal{H}_{\{A_1, A_2\}}) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{h_1, h_2\}) : \begin{pmatrix} u(h_i^+) \\ u'(h_i^+) \end{pmatrix} = A_i \begin{pmatrix} u(h_i^-) \\ u'(h_i^-) \end{pmatrix}, i = 1, 2 \right\}.$$

La intensidad de las interacciones δ' son $\beta_1 = \beta_2 = -2$, la expresión κ es

$$\begin{aligned} \kappa(k) = & 13 + 2k^4 - \left(\sqrt{k^2 - 2} + 4 \right) \sqrt{k^2 - 4} + 8\sqrt{k^2 - 2} + k^2 \left(2\sqrt{k^2 - 4} - 2\sqrt{k^2 - 2} - 11 \right) \\ & + e^{4\sqrt{k^2 - 4}} \left(-13 - 2k^4 - \left(\sqrt{k^2 - 2} + 4 \right) \sqrt{k^2 - 4} - 8\sqrt{k^2 - 2} + k^2 \left(2\sqrt{k^2 - 4} + 2\sqrt{k^2 - 2} + 11 \right) \right) \end{aligned}$$

la cual nos permite calcular la ecuación de dispersión $\kappa(k) = 0$, para encontrar los ceros $k_i > 0$ de esta expresión utilizamos la instrucción `FindRoot`, con lo cual llegamos a los valores $k_1 = 2,21582$ y $k_2 = 1,87935$.

Para verificar estos valores usamos el método gráfico de la función κ , como se muestra en la Figura 3.2.6, donde podemos observar que los valores obtenidos mediante la instrucción `FindRoot` efectivamente coinciden con los cruces por cero de la gráfica.

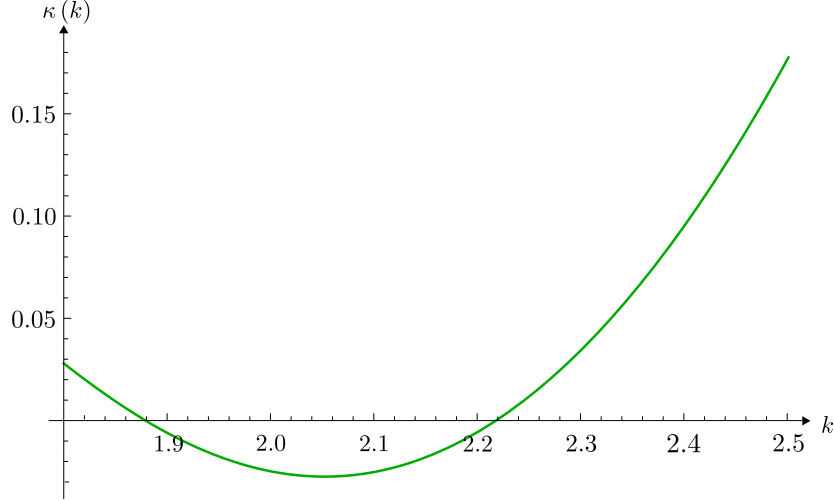


Figura 3.2.6. Gráfica de $\kappa(k)$ del Ejemplo 3.11.

Los eigen-valores asociados a k_1 y k_2 son $\lambda_1 = -3,53194$ y $\lambda_2 = -2,90987$ y las eigen-funciones normalizadas correspondientes están representadas por la siguiente expresión

$$\varphi_i(x) = \frac{1}{L_i} \begin{cases} e^{\gamma_1(k_i)x}, & -\infty < x < h_1, \\ c_2(k_i) e^{\gamma_2(k_i)x} + d_2(k_i) e^{\gamma_2(k_i)x}, & h_1 < x < h_2, \\ d_3(k_i) e^{\gamma_3(k_i)x}, & h_2 < x < \infty, \end{cases}$$

donde denotamos por L_i las constantes de normalización que en este ejemplo toman los valores $L_1 = 2,77951$ y $L_2 = 1,535$. Las expresiones de los coeficientes c_2 , d_2 y d_3 son

$$c_2(k_i) = \frac{1}{2} + \sqrt{k_i^2 - 2} \left(\frac{1}{2\sqrt{k_i^2 - 4}} - 1 \right),$$

$$d_2(k_i) = \frac{1}{2} - \sqrt{k_i^2 - 2} \left(\frac{1}{2\sqrt{k_i^2 - 4}} + 1 \right),$$

$$d_3(k_i) = -\frac{1}{2\sqrt{k_i^2 - 4}\sqrt{k_i^2 - 2}} e^{-2\sqrt{k_i^2 - 4} + 2\sqrt{k_i^2 - 2}} \left(17 + 2k_i^4 - 4\sqrt{k_i^2 - 4} + 2k_i^2 \left(\sqrt{k_i^2 - 4} - 6 \right) \right. \\ \left. + e^{4\sqrt{k_i^2 - 4}} \left(-17 - 2k_i^4 - 4\sqrt{k_i^2 - 4} + 2k_i^2 \left(\sqrt{k_i^2 - 4} + 6 \right) \right) \right)$$

las gráficas de las eigen-funciones correspondientes se muestran en las Figuras 3.2.7 y 3.2.8.

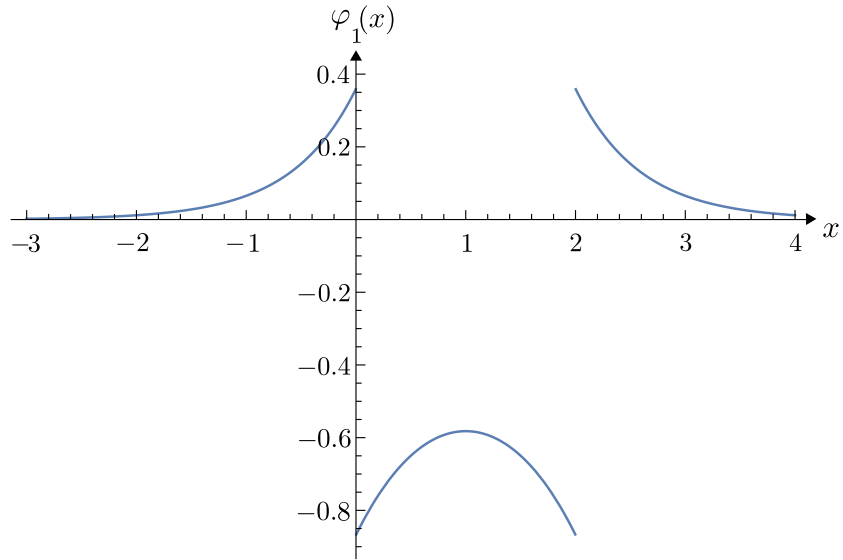


Figura 3.2.7. *Eigen-función correspondiente a $\lambda_1 = -3,53194$ del Ejemplo 3.11.*

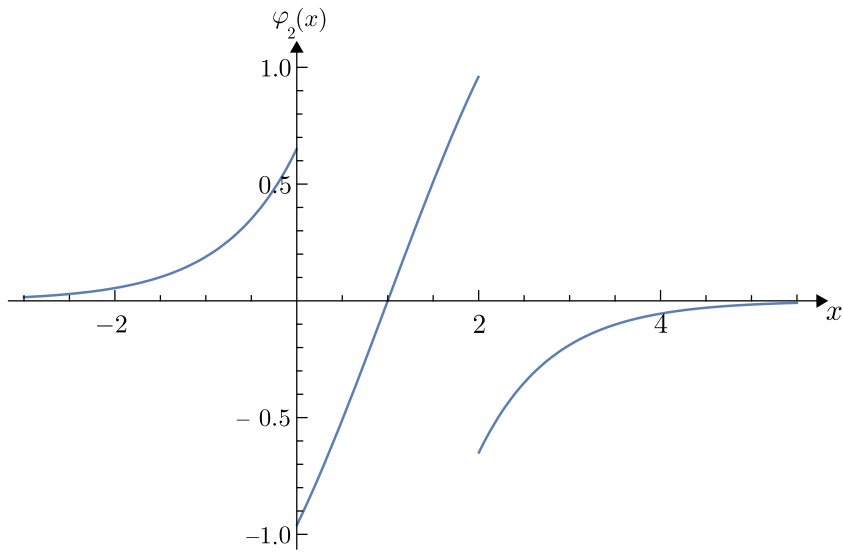


Figura 3.2.8. *Eigen-función asociada al eigen-valor $\lambda_2 = -2,90987$ del Ejemplo 3.11.*

En los Ejemplos 3.8-3.11 podemos ver claramente la influencia del potencial regular escalonado a trozos en la forma que tienen las eigen-funciones de cada estado del sistema cuántico.

Capítulo 4

Conclusiones y trabajo a futuro

4.1. Conclusiones

En el presente trabajo, hemos abordado problemas espectrales con potenciales compuestos por una parte regular y otra singular donde se involucran interacciones puntuales de primer tipo. A lo largo de esta Tesis construimos un método matricial recursivo para este tipo de problemas. La representación que se obtiene de las soluciones de la ecuación de Schrödinger da lugar a un método recursivo que permite su implementación numérica inmediata, además permite obtener las eigen-funciones asociadas a cada punto del espectro.

La construcción de este método matricial recursivo se realizó considerando las matrices de condiciones de frontera asociadas a interacciones puntuales de primer tipo, además, consideramos que las entradas de dichas matrices son tales que sus determinantes son iguales a uno, esto nos permite considerar problemas auto-adjuntos. Al realizar la construcción del método recursivo consideramos primero potenciales regulares nulos, y después potenciales escalonados donde pudimos observar que las expresiones para la ecuación de dispersión se daban en forma cerrada debido a que para este tipo de potenciales es posible encontrar soluciones exactas en cada restricción. Sin embargo, esta situación no prevalece con potenciales regulares arbitrarios, en donde fue necesario introducir las matrices de monodromía. Las entradas de dichas matrices se calcularon en términos de series de potencias del parámetro espectral por lo cual presentamos una aplicación del método SPPS para su construcción. Esta representación ofrece soluciones que convergen uniformemente, que pueden implementarse computacionalmente en forma directa. El método desarrollado permitió encontrar una relación matricial a partir de la cual se pudo encontrar una expresión para la ecuación de dispersión del problema espectral.

En los resultados numéricos podemos observar la influencia que tienen las diferentes interacciones en las eigen-funciones de los problemas abordados. Los ejemplos presentan el comportamiento esperado de acuerdo con las condiciones en frontera asociadas al potencial δ o δ' , es decir, cuando tenemos interacciones tipo delta de Dirac podemos ver que las eigen-funciones son continuas y sus derivadas presentan un salto en el punto donde se localizan las interacciones. Por el contrario, al considerar interacciones tipo δ' se observa la discontinuidad en las eigen-funciones y la continuidad en sus derivadas. Además pudimos ver que no se presentó la degeneración de los eigen-valores y esto cumple con el principio de exclusión de Pauli.

La interpretación física de las soluciones obtenidas dependerá del tipo de problema en donde se emplee el enfoque aquí desarrollado, por ejemplo, en la mecánica cuántica los picos de las eigen-funciones corresponden a los lugares donde es más probable encontrar a la partícula; por otra parte, el caso de una guía de ondas podría modelarse por un potencial tipo delta formado por dos discontinuidades, las cuales representarían las paredes de ésta.

En particular la representación matricial simplifica las operaciones a realizar. Además haciendo uso de este método podemos calcular expresiones para los coeficientes de transmisión y reflexión de cada problema, aunque en este trabajo no abordamos este caso.

4.2. Trabajo a futuro

Se pretende continuar con el desarrollo del análisis de los estados ligados de los sistemas cuánticos descritos por la ecuación unidimensional de Schrödinger, los cuales están caracterizados por funciones potenciales que comprenden una parte regular, en general, complejo-valuada y una parte singular expresada por distribuciones de primer orden. En particular:

- Analizar los problemas no-auto-adjuntos que involucran interacciones puntuales.
- Investigar la degeneración del espectro discreto de los operadores de Schrödinger que involucran interacciones puntuales.
- Determinar las eigen-funciones y las funciones de Jordan asociadas con los eigen-valores de multiplicidad mayor que uno.
- Desarrollar métodos matriciales para el análisis de los problemas espectrales de Schrödinger que involucran interacciones puntuales.
- Obtener teoremas de expansión en eigen-funciones que involucran a las eigen-funciones asociadas al espectro discreto, las eigen-funciones generalizadas asociadas al espectro continuo, y las funciones de Jordan asociadas a los eigen-valores degenerados.
- Desarrollar métodos numéricos para el análisis del espectro de los operadores de Schrödinger con interacciones puntuales.
- Desarrollar la codificación computacional de los métodos numéricos y abordar los temas relacionados con la implementación de los códigos numéricos que involucran el uso de memoria, el tiempo de cómputo, control del error, etc.
- Buscar aplicaciones de los resultados obtenidos en mecánica cuántica y electrodinámica.

Capítulo 5

Productos desarrollados

Se presentaron dos ponencias relacionadas con el trabajo que se ha ido desarrollando.

- 50 Congreso Nacional de la Sociedad Matemática Mexicana.
- XVI Congreso Nacional de Ingeniería Electromecánica y de Sistemas

Además se adjunta el trabajo que se envió al XVI Congreso Nacional de Ingeniería Electromecánica y de Sistemas.



**La Sociedad Matemática
Mexicana**

otorga el presente

RECONOCIMIENTO

A: **Leticia Olivera Ramírez**

Por la presentación de la ponencia:

Método matricial para el cálculo del espectro discreto de operadores de Schrödinger con interacciones puntuales
realizada dentro de las Actividades del 50 Congreso Nacional de la
Sociedad Matemática Mexicana, llevado a cabo
del 22 al 27 de Octubre de 2017, en CU, México.

Octubre de 2017
Ciudad de México, México.

Dr. Gelasio Salazar Anaya
Presidente de la SMM

50^o CONGRESO
NACIONAL
DE LA SOCIEDAD
MATEMÁTICA
MEXICANA

L - P - 253 - 7346





XVI Congreso Nacional de Ingeniería Electromecánica y de Sistemas

Otorga el Presente

DIPLOMA

A: Leticia Olivera-Ramírez, Vladimir S. Rabinovich y Víctor Barrera-Figueroa

Por su participación con el trabajo

Análisis espectral de operadores unidimensionales de Schrödinger con interacciones puntuales por medios matriciales

Ciudad de México, 13 al 17 de noviembre de 2017

DR. MIGUEL TOLEDO VELÁZQUEZ
Jefe de la Sección de Estudios de Posgrado e Investigación de la ESIME, Unidad Zacatenco

DR. RICARDO OCTAVIO MOTA PALOMINO
Director de la ESIME, Unidad Zacatenco

Análisis espectral de operadores unidimensionales de Schrödinger con interacciones puntuales por medios matriciales

L. Olivera-Ramírez¹, V. S. Rabinovich^{1,2}, V. Barrera-Figueroa¹

¹Instituto Politécnico Nacional, SEPI-UIITA-IPN, Av. Inst. Politécnico Nal. 2580 Col. Barrio Laguna Ticomán, C.P. 07340, Ciudad de México

²Instituto Politécnico Nacional, Departamento de Telecomunicaciones, SEPI-ESIME-IPN, Av. Inst. Politécnico Nal. S/N Col. Lindavista, C.P. 07738, Ciudad de México
e-mail: loliveram@yandex.com; vladimir.rabinovich@gmail.com; vbarreraf@ipn.mx

Resumen—En este trabajo se considera el operador unidimensional de Schrödinger estacionario donde el potencial está formalmente especificado por interacciones puntuales que pueden modelarse por condiciones de frontera puntuales especificadas por matrices cuadradas. Se hace un análisis espectral y se buscan soluciones en el espacio $L^2(\mathbb{R})$. Esto da lugar a un método matricial recursivo que conduce a la ecuación de dispersión del problema que define los eigen-valores del operador. Se presentan ejemplos numéricos de este método ante interacciones tipo δ y δ' .

Área temática- Ingeniería en Telecomunicaciones.

Palabras Clave—Interacciones puntuales; ecuación de Schrödinger unidimensional; condiciones en la frontera matriciales; método matricial recursivo; potencial singular.

Abstract—In this work we consider the one-dimensional stationary Schrödinger operator with potential formally given in terms of point interactions that can be modeled by square matrices. A spectral analysis is performed, and solutions in $L^2(\mathbb{R})$ are obtained. This gives rise to a recursive matrix method that leads to the corresponding dispersion equation for the problem that defines the eigenvalues of the operator. Some numerical examples involving δ and δ' interactions are presented.

Keywords— Point interactions; one-dimensional Schrödinger equation; matrix boundary conditions; matrix recursive method; singular potential.

I. INTRODUCCIÓN

Los operadores de Schrödinger con potenciales con soportes puntuales han sido estudiados ampliamente durante las últimas décadas, por ejemplo, el estudio de potenciales puntuales tipo δ de Dirac en grafos han sido

considerado debido a sus aplicaciones en la física mesoscópica. Tales operadores son Hamiltonianos de sistemas cuánticos que involucran alambres cuánticos [1]. También es usual encontrar operadores Hamiltonianos donde el soporte de la distribución de Dirac es el grafo completo [2]. Tales grafos se conocen como grafos con fugas (*leaky quantum graphs*). Problemas unidimensionales que involucran a la distribución de Dirac permiten modelar cristales unidimensionales y guías de ondas cuánticas [3].

Como es bien sabido, la dinámica de una partícula cuántica localizada a lo largo del eje real y que es sometida a una interacción puntual, puede ser tratada como una partícula libre fuera de la región de interacción donde el potencial se anula, mientras que en la región de interacción se pueden considerar las condiciones de frontera puntuales que resultan de integrar la ecuación de Schrödinger en una vecindad del potencial. En este sentido la teoría de las distribuciones conduce a las condiciones correctas que establece el potencial singular [4].

Los potenciales delta, o las interacciones puntuales, son una de las clases de potenciales ideales que conducen a soluciones exactas de la ecuación de Schrödinger y se usan como una herramienta pedagógica para ilustrar varios fenómenos físicamente importantes, donde la longitud de onda de De Broglie de las partículas es mucho mayor que el rango de la interacción. Estos potenciales tienen varias aplicaciones en casi todas las áreas de la física, ver, e.g., [5, 6]. Por ejemplo, en el caso donde los electrones se mueven en un cristal formado por iones fijos, los cuales pueden ser modelados por deltas de Dirac que producen un potencial periódico que representa al potencial global en el cristal. Esto conduce al bien conocido modelo de Kronig-Penney [7] ampliamente utilizado en la electrónica y la física del estado sólido. Otra aplicación es dada por dos potenciales delta de Dirac separados entre sí con intensidades opuestas que se utiliza como un modelo muy elemental para un dipolo eléctrico oscilante, que conduce a la descripción del elemento diferencial de una antena. En este caso el potencial resultante se expresa en términos de la derivada de la delta de Dirac [8]. Por otra parte, estructuras de guías de onda en forma de emparedado (*slab waveguide*) [9] son ampliamente utilizadas en la óptica integrada para producir estructuras que guíen

señales luminosas en chips de silicio. Estas estructuras se forman principalmente por tres capas homogéneas de materiales semiconductores. El salto del índice de refracción en las interfaces entre cada par de capas da lugar a condiciones en la frontera que favorecen el guiado de señales ópticas. De esta manera si en las interfaces se encuentra una corriente eléctrica laminar las condiciones en la frontera se modelarían en términos de las condiciones de salto que establece la delta de Dirac. Así mismo la transformada de Fourier con respecto a algunas coordenadas espaciales o la técnica de separación de variables pueden conducir a problemas espectrales unidimensionales como el abordado en el presente trabajo. Todo lo anterior pone de manifiesto la importancia del estudio de interacciones puntuales en los ámbitos de las telecomunicaciones, la electrónica y la mecánica cuántica.

La distribución de Dirac denotada por δ está definida a partir de un límite débil de la secuencia de funciones $f_\varepsilon(x)$ conforme $\varepsilon \rightarrow 0$ con respecto a una función de prueba φ que es una función continua en el dominio de interés Ω

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\Omega} f_\varepsilon(x) \varphi(x) dx = \varphi(0). \quad (0.1)$$

El funcional $\varphi(0)$ es llamado la distribución de Dirac, el cual se denota de la siguiente forma

$$\int_{\Omega} f_\varepsilon(x) \varphi(x) dx \rightarrow (\delta, \varphi), \quad \varepsilon \rightarrow 0. \quad (0.2)$$

Denotemos por \mathcal{D} el espacio de las funciones de prueba continuamente diferenciables con soporte compacto, es decir, funciones continuamente diferenciables dentro del soporte de las funciones. Sea $\varphi \in \mathcal{D}$, definiremos la derivada de la delta de Dirac en el sentido de las distribuciones por el funcional δ' correspondiente a

$$(\delta', \varphi) = -(\delta, \varphi') = -\varphi'(0). \quad (0.3)$$

Cuando se consideran potenciales singulares como la delta de Dirac y su derivada en la ecuación de Schrödinger es necesario considerar las condiciones de frontera adecuadas en los puntos de discontinuidad. El objetivo de este trabajo es obtener un método matricial recursivo para realizar el análisis espectral del operador de Schrödinger unidimensional donde el potencial formalmente está compuesto por interacciones puntuales. El contenido de este artículo es como sigue. En la Sección II se presentan el análisis efectuado para determinar el método recursivo considerando un problema con una discontinuidad, posteriormente dos y se generaliza el caso con N puntos de discontinuidad. En la Sección III, se presentan resultados numéricos y gráficos. Finalmente, en la Sección IV se presentan algunos comentarios finales y conclusiones.

II. DESARROLLO

Consideremos el operador diferencial

$$-\frac{d^2}{dx^2} + V(x), \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{h_0, h_1, \dots, h_N\}, \quad (0.4)$$

donde el potencial V está formalmente representado por distribuciones con soporte puntual en los puntos h_i , lo cual permite considerar por ejemplo, distribuciones tipo δ o δ' . En los puntos h_i el comportamiento de las soluciones de la ecuación diferencial es gobernado por las condiciones de frontera puntuales expresadas por

$$\begin{aligned} u(h_i^+) &= \alpha_{11}^{(i)} u(h_i^-) + \alpha_{12}^{(i)} u'(h_i^-), \\ u'(h_i^+) &= \alpha_{21}^{(i)} u(h_i^-) + \alpha_{22}^{(i)} u'(h_i^-), \end{aligned} \quad (0.5)$$

donde la notación anterior representa los límites laterales

$$\varphi(h^-) := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0, \varepsilon < 0} \varphi(h - \varepsilon), \quad \varphi(h^+) := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0, \varepsilon > 0} \varphi(h + \varepsilon). \quad (0.6)$$

Las condiciones en la frontera en h_i pueden escribirse en forma matricial como

$$\begin{pmatrix} u(h_i^+) \\ u'(h_i^+) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{11}^{(i)} & \alpha_{12}^{(i)} \\ \alpha_{21}^{(i)} & \alpha_{22}^{(i)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(h_i^-) \\ u'(h_i^-) \end{pmatrix} = A_i \begin{pmatrix} u(h_i^-) \\ u'(h_i^-) \end{pmatrix}, \quad (0.7)$$

donde A_i es una matriz cuadrada que representa los coeficientes $\alpha_{jk}^{(i)}$. Se buscan soluciones que satisfagan las condiciones asintóticas en el infinito

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} u(x) = 0. \quad (0.8)$$

Por lo tanto la expresión diferencial (0.4) junto con las condiciones de frontera puntuales (0.5), y las condiciones asintóticas en el infinito (0.8), definen un operador diferencial S_V dado por (0.4) que actúa en el espacio $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Si los coeficientes $\alpha_{jk}^{(i)}$ de las condiciones en la frontera son reales el operador S_V así definido es auto-adjunto en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, de modo que su espectro es real [8], el cual consiste de una parte discreta en el intervalo $(m_V, 0)$, y una parte continua en el intervalo $[0, \infty)$, donde m_V depende del potencial [10].

A. Solución del problema espectral ante un punto de discontinuidad

Consideremos una discontinuidad en el punto $x = h_0$ y busquemos soluciones del problema espectral

$$S_V u(x) = \lambda u(x), \quad u \in \text{Dom}(S_V), \quad (0.9)$$

donde $\lambda \in \mathbb{R}$ es el parámetro espectral. Denotemos por u_l a la solución de la ecuación en la región $(-\infty, h_0)$ y por u_r a la solución de la ecuación en la región (h_0, ∞) . En el punto de discontinuidad las condiciones en la frontera se representan en forma matricial como

$$\begin{pmatrix} u_r(h_0^+) \\ u_r'(h_0^+) \end{pmatrix} = A_0 \begin{pmatrix} u_l(h_0^-) \\ u_l'(h_0^-) \end{pmatrix}. \quad (0.10)$$

En la búsqueda de eigen-valores se considera $\lambda = -k^2$, donde $k > 0$. En cada región se tienen dos soluciones linealmente independientes de tipo $e^{\pm kx}$, entonces las soluciones generales de la ecuación diferencial están representadas como

$$\begin{aligned} u_I(x) &= c_0 e^{kx} + d_0 e^{-kx}, & -\infty < x \leq h_0, \\ u_{II}(x) &= c_1 e^{kx} + d_1 e^{-kx}, & h_0 \leq x < \infty, \end{aligned} \quad (0.11)$$

donde c_0, c_1, d_0, d_1 son coeficientes arbitrarios. Al evaluar las soluciones anteriores y sus derivadas en el punto $x = h_0$ se obtiene la siguiente relación matricial

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ d_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2k} M_0(k) \begin{pmatrix} c_0 \\ d_0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2k} \begin{pmatrix} m_{11}(k) & m_{12}(k) \\ m_{21}(k) & m_{22}(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ d_0 \end{pmatrix}, \quad (0.12)$$

donde las entradas de la matriz $M_0(k)$ son

$$\begin{aligned} m_{11}(k) &= \alpha_{21}^{(0)} + k(\alpha_{11}^{(0)} + \alpha_{22}^{(0)} + \alpha_{12}^{(0)}k), \\ m_{12}(k) &= e^{2kh_0}(-\alpha_{21}^{(0)} + k(\alpha_{11}^{(0)} - \alpha_{22}^{(0)} + \alpha_{12}^{(0)}k)), \\ m_{21}(k) &= e^{-2kh_0}(\alpha_{21}^{(0)} - k(-\alpha_{11}^{(0)} + \alpha_{22}^{(0)} + \alpha_{12}^{(0)}k)), \\ m_{22}(k) &= -\alpha_{21}^{(0)} + k(\alpha_{11}^{(0)} + \alpha_{22}^{(0)} - \alpha_{12}^{(0)}k). \end{aligned} \quad (0.13)$$

Las soluciones en $\text{Dom}(S_V)$ se consiguen al considerar las condiciones asintóticas en el infinito (0.8). Esto implica que $c_1 = 0$ y $d_0 = 0$, por lo tanto, al considerar estos coeficientes la ecuación matricial (0.12) toma la forma

$$\begin{pmatrix} 0 \\ d_1 \end{pmatrix} = \frac{c_0}{2k} \begin{pmatrix} \alpha_{21}^{(0)} + k(\alpha_{11}^{(0)} + \alpha_{22}^{(0)} + \alpha_{12}^{(0)}k) \\ e^{2kh_0}(-\alpha_{21}^{(0)} + k(\alpha_{11}^{(0)} - \alpha_{22}^{(0)} + \alpha_{12}^{(0)}k)) \end{pmatrix}. \quad (0.14)$$

La igualdad entre las entradas de las matrices del lado izquierdo y derecho conduce a la ecuación de dispersión del problema. Más precisamente, sea κ una función analítica de la variable k definida como

$$\kappa(k) = \alpha_{21}^{(0)} + k(\alpha_{11}^{(0)} + \alpha_{22}^{(0)} + \alpha_{12}^{(0)}k). \quad (0.15)$$

Los ceros de la ecuación de dispersión $\kappa(k) = 0$ permiten calcular los eigen-valores del operador S_V en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. En este caso, la ecuación de dispersión correspondiente a un punto de discontinuidad conduce a la ecuación polinomial cuadrática

$$\alpha_{21}^{(0)} + k(\alpha_{11}^{(0)} + \alpha_{22}^{(0)}) + \alpha_{12}^{(0)}k^2 = 0, \quad \alpha_{12}^{(0)} \neq 0, \quad (0.16)$$

cuyas soluciones se obtienen en forma explícita por

$$k_j = \frac{-\left(\alpha_{11}^{(0)} + \alpha_{22}^{(0)}\right) \pm \sqrt{\left(\alpha_{11}^{(0)} + \alpha_{22}^{(0)}\right)^2 - 4\alpha_{12}^{(0)}\alpha_{21}^{(0)}}}{2\alpha_{12}^{(0)}}. \quad (0.17)$$

La ecuación anterior da lugar a dos raíces polinomiales. De estas se debe de elegir aquella raíz $k_j > 0$ asociada a un eigenvalor del problema espectral. Esto se consigue al cumplir la condición

$$\alpha_{12}^{(0)}\alpha_{21}^{(0)} < 0. \quad (0.18)$$

Sea $k_0 > 0$ un cero de $\kappa(k) = 0$, el eigen-valor correspondiente es $\lambda_0 = -k_0^2$ y está asociado a la eigen-función normalizada

$$\varphi_0(x) = \frac{1}{L_0} \begin{cases} e^{k_0 x}, & -\infty < x \leq h_0 \\ d_1(k_0) e^{-k_0 x}, & h_0 \leq x < \infty \end{cases}. \quad (0.19)$$

donde la constante de normalización

$$L_0 = \sqrt{\int_{-\infty}^{h_0} |u_0(x)|^2 dx + \int_{h_0}^{\infty} |u_0(x)|^2 dx}. \quad (0.20)$$

Se calcula a partir de la norma en el espacio $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$

$$\|u\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |u(x)|^2 dx, \quad (0.21)$$

y

$$d_1 = e^{2k_0 h_0} \left(-\alpha_{21}^{(0)} + k_0 \left(\alpha_{11}^{(0)} - \alpha_{22}^{(0)} + \alpha_{12}^{(0)} k_0 \right) \right). \quad (0.22)$$

B. Solución del problema espectral ante dos puntos de discontinuidad

Consideremos que existen dos discontinuidades en $x = h_0$ y $x = h_1$. Denotemos las soluciones de la ecuación diferencial como u_I para el intervalo $(-\infty, h_0)$, u_{II} para (h_0, h_1) , y u_{III} en (h_1, ∞) . Las condiciones en la frontera para el punto $x = h_1$ tienen la forma matricial

$$\begin{pmatrix} u_{III}(h_1^+) \\ u'_{III}(h_1^+) \end{pmatrix} = A_1 \begin{pmatrix} u_{II}(h_1^-) \\ u'_{II}(h_1^-) \end{pmatrix} \quad (0.23)$$

donde A_1 es la matriz de coeficientes en $x = h_1$. Se buscan soluciones en $\text{Dom}(S_V)$ para el problema espectral. Sea $\lambda = -k^2$, $k > 0$, entonces en cada región las soluciones generales de la ecuación diferencial tienen la forma

$$\begin{aligned} u_I(x) &= c_0 e^{kx} + d_0 e^{-kx}, & -\infty < x \leq h_0, \\ u_{II}(x) &= c_1 e^{kx} + d_1 e^{-kx}, & h_0 \leq x \leq h_1, \\ u_{III}(x) &= c_2 e^{kx} + d_2 e^{-kx}, & h_1 \leq x < \infty, \end{aligned} \quad (0.24)$$

donde $c_0, c_1, c_2, d_0, d_1, d_2$ son coeficientes arbitrarios. Las condiciones en la frontera en el punto h_0 se aplicaron en la sección anterior. La aplicación de las condiciones en la frontera en el punto $x = h_1$ se representan por la ecuación matricial

$$\begin{pmatrix} c_2 \\ d_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2k} M_1(k) \begin{pmatrix} c_1 \\ d_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2k} \begin{pmatrix} m_{11}(k) & m_{12}(k) \\ m_{21}(k) & m_{22}(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ d_1 \end{pmatrix} \quad (0.25)$$

donde $M_1(k)$ está definida por sus entradas

$$\begin{aligned} m_{11}(k) &= \alpha_{21}^{(1)} + k(\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{22}^{(1)} + \alpha_{12}^{(1)}k), \\ m_{12}(k) &= e^{2kh_1} \left(-\alpha_{21}^{(1)} + k(\alpha_{11}^{(1)} - \alpha_{22}^{(1)} + \alpha_{12}^{(1)}k) \right), \\ m_{21}(k) &= e^{-2kh_1} \left(\alpha_{21}^{(1)} - k(-\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{22}^{(1)} + \alpha_{12}^{(1)}k) \right), \\ m_{22}(k) &= -\alpha_{21}^{(1)} + k(\alpha_{11}^{(1)} + \alpha_{22}^{(1)} - \alpha_{12}^{(1)}k). \end{aligned} \quad (0.26)$$

De acuerdo con el análisis anterior referente al punto $x = h_0$ se mostró en (0.12) que los coeficientes c_1 y d_1 están expresados en términos de c_0 y d_0 . Por otra parte, el análisis en el punto $x = h_1$, ecuación (0.25), muestra que los coeficientes c_2 y d_2 están expresados en términos de los coeficientes c_1 y d_1 . Por lo tanto al acoplar las expresiones (0.12) y (0.25) es posible calcular los coeficientes c_2 y d_2 en términos de c_0 y d_0 , a saber

$$\begin{pmatrix} c_2 \\ d_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{4k^2} M_1(k) M_0(k) \begin{pmatrix} c_0 \\ d_0 \end{pmatrix}. \quad (0.27)$$

La aplicación de las condiciones asintóticas en el infinito (0.8) implican que $c_2 = 0$ y $d_0 = 0$. De esto resulta una ecuación de dispersión $\kappa(k) = 0$ para el problema con dos discontinuidades, donde la función κ está definida como

$$\begin{aligned} \kappa(k) &= e^{-2kh_1} \left(e^{2kh_0} \left(\alpha_{21}^{(0)} - k(\alpha_{11}^{(0)} + k\alpha_{12}^{(0)} - \alpha_{22}^{(0)}) \right) \right. \\ &\quad \left(\alpha_{21}^{(1)} - k(-\alpha_{11}^{(1)} + k\alpha_{12}^{(1)} + \alpha_{22}^{(1)}) \right) \\ &\quad - e^{2kh_1} \left(\alpha_{21}^{(0)} + k(\alpha_{11}^{(0)} + k\alpha_{12}^{(0)} + \alpha_{22}^{(0)}) \right) \\ &\quad \left. \left(\alpha_{21}^{(1)} + k(\alpha_{11}^{(1)} + k\alpha_{12}^{(1)} + \alpha_{22}^{(1)}) \right) \right). \end{aligned} \quad (0.28)$$

Las soluciones $k_j > 0$ de esta ecuación definen los eigenvalores del problema de acuerdo con $\lambda_j = -k_j^2$. Entonces las eigenfunciones normalizadas correspondientes tienen la forma

$$\varphi_j(x) = \frac{1}{L_j} \begin{cases} e^{k_j x}, & -\infty < x \leq h_0 \\ c_1 e^{k_j x} + d_1 e^{-k_j x}, & h_0 \leq x < h_1 \\ d_2 e^{-k_j x}, & h_1 \leq x < \infty \end{cases}, \quad (0.29)$$

donde c_1 , d_1 , d_2 provienen de las ecuaciones matriciales (0.12) y (0.25) y la constante de normalización L_j se calcula de acuerdo con

$$L_j = \sqrt{\int_{-\infty}^{h_0} |u_j(x)|^2 dx + \int_{h_0}^{h_1} |u_j(x)|^2 dx + \int_{h_1}^{\infty} |u_j(x)|^2 dx}. \quad (0.30)$$

C. Solución del problema espectral ante N puntos de discontinuidad

Con base en los resultados anteriores es posible calcular los coeficientes asociados a la $(n+1)$ -ésima región en términos de los coeficientes de la región anterior, es decir,

$$\begin{pmatrix} c_{n+1} \\ d_{n+1} \end{pmatrix} = \frac{1}{2k} M_n(k) \begin{pmatrix} c_n \\ d_n \end{pmatrix} = \frac{1}{2k} \begin{pmatrix} m_{11}(k) & m_{12}(k) \\ m_{21}(k) & m_{22}(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_n \\ d_n \end{pmatrix}, \quad (0.31)$$

donde las entradas de la matriz de coeficientes M_n asociada a la $(n+1)$ -ésima discontinuidad son

$$\begin{aligned} m_{11}(k) &= \alpha_{21}^{(n)} + k(\alpha_{11}^{(n)} + \alpha_{22}^{(n)} + \alpha_{12}^{(n)}k), \\ m_{12}(k) &= e^{2kh_n} \left(-\alpha_{21}^{(n)} + k(\alpha_{11}^{(n)} - \alpha_{22}^{(n)} + \alpha_{12}^{(n)}k) \right), \\ m_{21}(k) &= e^{-2kh_n} \left(\alpha_{21}^{(n)} - k(-\alpha_{11}^{(n)} + \alpha_{22}^{(n)} + \alpha_{12}^{(n)}k) \right), \\ m_{22}(k) &= -\alpha_{21}^{(n)} + k(\alpha_{11}^{(n)} + \alpha_{22}^{(n)} - \alpha_{12}^{(n)}k). \end{aligned} \quad (0.32)$$

Lo anterior permite establecer el siguiente procedimiento matricial recursivo

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} c_{n+1} \\ d_{n+1} \end{pmatrix} &= \frac{1}{2k} M_n \begin{pmatrix} c_n \\ d_n \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} c_{n+1} \\ d_{n+1} \end{pmatrix} &= \frac{1}{4k^2} M_n M_{n-1} \begin{pmatrix} c_{n-1} \\ d_{n-1} \end{pmatrix}, \\ &\vdots \\ \begin{pmatrix} c_{n+1} \\ d_{n+1} \end{pmatrix} &= \frac{1}{2(n+1)k^{n+1}} M_n M_{n-1} \cdots M_0 \begin{pmatrix} c_0 \\ d_0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (0.33)$$

con el cual es posible calcular los coeficientes de la última región en términos de los coeficientes de la primera. Definamos una matriz global

$$\mathbf{M}(k) = M_n M_{n-1} \cdots M_0 = \begin{pmatrix} m_{11}(k) & m_{12}(k) \\ m_{21}(k) & m_{22}(k) \end{pmatrix} \quad (0.34)$$

la cual contiene la información de todas las interacciones puntuales consideradas en un problema dado. Si el número de discontinuidades es finito el producto matricial anterior podría calcularse computacionalmente de forma exacta. Sin embargo, si se consideran un número contable infinito de discontinuidades es posible encontrar estimaciones asintóticas de las entradas de la matriz global \mathbf{M} . La ecuación (0.34) constituye la ecuación central de este trabajo ya que a partir de ésta es posible encontrar la ecuación de dispersión del problema al tomar $c_{n+1} = 0$ y $d_0 = 0$ como lo establecen las condiciones asintóticas (0.8), es decir

$$\begin{pmatrix} 0 \\ d_{n+1} \end{pmatrix} = \Delta \begin{pmatrix} m_{11}(k) & m_{12}(k) \\ m_{21}(k) & m_{22}(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ 0 \end{pmatrix} = \Delta c_0 \begin{pmatrix} m_{11}(k) \\ m_{21}(k) \end{pmatrix}, \quad (0.35)$$

donde $\Delta = \frac{1}{2(n+1)k^{n+1}}$.

La igualdad entre las matrices del lado izquierdo y derecho da lugar a la ecuación de dispersión del problema, representada por

$$\Delta c_0 m_{11}(k) = 0. \quad (0.36)$$

Observe que para obtener el término m_{11} es necesario realizar el procedimiento matricial recursivo indicado anteriormente por lo cual no es posible obtener una expresión general en forma sencilla para una potencial arbitrario. En este sentido se podría emplear un programa computacional que desarrolle los productos matriciales indicados hasta obtener el término buscado. Los ceros $k_j > 0$ de esta ecuación permiten calcular los eigen-valores λ_j del problema de acuerdo con $\lambda_j = -k_j^2$.

Las eigen-funciones normalizadas correspondientes se definen por

$$\varphi_j(x) = \frac{1}{L_j} \begin{cases} e^{k_j x}, & -\infty < x \leq h_0, \\ c_1 e^{k_j x} + d_1 e^{-k_j x}, & h_0 \leq x \leq h_1, \\ \vdots & \vdots \\ c_{n-1} e^{k_j x} + d_{n-1} e^{-k_j x}, & h_{n-1} \leq x \leq h_n, \\ d_n e^{-k_j x}, & h_n \leq x < \infty, \end{cases} \quad (0.37)$$

donde L_j es la constante de normalización calculada por

$$L_j := \sqrt{\int_{-\infty}^{h_0} |u_j(x)|^2 dx + \int_{h_0}^{h_1} |u_j(x)|^2 dx + \dots + \int_{h_n}^{\infty} |u_j(x)|^2 dx}. \quad (0.38)$$

III. EJEMPLOS DE APLICACIÓN

El método recursivo nos permite realizar una implementación numérica inmediata, los siguientes resultados fueron obtenidos usando el software Wolfram Mathematica 11.0.1.0, donde para obtener los valores numéricos de los ceros de las ecuaciones de dispersión correspondientes se utilizó la instrucción NSolve y la instrucción Plot para obtener las gráficas correspondientes; los valores encontrados tienen precisión de máquina.

Ejemplo 1. Consideremos el siguiente potencial singular

$$V(x) = -\alpha_0 \delta(x), \quad \alpha_0 > 0. \quad (0.39)$$

Para obtener las condiciones en frontera que establece este potencial debemos de integrar la siguiente ecuación diferencial en una vecindad $(-\varepsilon, \varepsilon)$ del cero

$$-\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} u(x) \right) dx - \alpha_0 \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x) u(x) dx = \lambda \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} u(x) dx \quad (0.40)$$

$$-\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} d \left(\frac{d}{dx} u(x) \right) dx - \alpha_0 u(0) = \lambda \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} u(x) dx \quad (0.41)$$

La integral del lado izquierdo de (0.41) se reduce a

$$-\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} d \left(\frac{d}{dx} u(x) \right) dx = -\frac{d}{dx} u(x) \Big|_{-\varepsilon}^{\varepsilon} = -u'(\varepsilon) + u'(-\varepsilon). \quad (0.42)$$

En el límite cuando $\varepsilon \rightarrow 0$ se observa que la derivada u' tiene un salto en $x=0$

$$-u'(\varepsilon) + u'(-\varepsilon) - \alpha_0 u(0) = \lambda \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} u(x) dx, \quad (0.43)$$

Donde la integral del lado derecho se anula por la continuidad de u en $x=0$, es decir,

$$-u(0^+) + u(0^-) = 0 \quad (0.44)$$

lo cual conduce a las dos condiciones de frontera

$$u(0^+) - u(0^-) = 0 \quad (0.45)$$

$$u'(0^+) - u'(0^-) = -\alpha_0 u(0) \quad (0.46)$$

que establecen la continuidad de la función y el salto en su derivada en el punto $x=0$. Al reescribir estas ecuaciones en la forma

$$u(0^+) = u(0^-) \quad (0.47)$$

$$u'(0^+) = u'(0^-) - \alpha_0 u(0^-) \quad (0.48)$$

es evidente que pueden representarse de forma matricial como

$$\begin{pmatrix} u(0^+) \\ u'(0^+) \end{pmatrix} = A_0 \begin{pmatrix} u(0^-) \\ u'(0^-) \end{pmatrix} \quad (0.49)$$

donde

$$A_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\alpha_0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (0.50)$$

En este ejemplo el punto de discontinuidad corresponde a $h_0=0$. Si tomamos $\alpha_0=1$ la ecuación de dispersión $\kappa(k)=0$ se define a partir de la función analítica

$$\kappa(k) = 1 - \frac{1}{2k}. \quad (0.51)$$

El único cero de esta ecuación es $k_0=0.5$, el eigen-valor correspondiente es $\lambda_0=-0.25$. La eigen-función normalizada asociada a este eigen-valor es

$$\varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{cases} e^{k_0 x}, & -\infty < x \leq 0, \\ e^{-k_0 x}, & 0 \leq x < \infty, \end{cases} \quad (0.52)$$

su gráfica se muestra en la Figura 1.

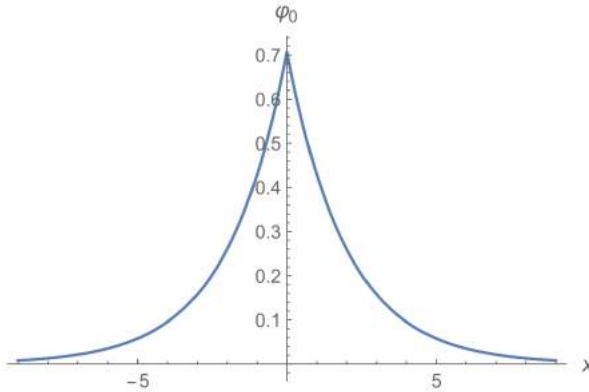


Figura 1. Eigen-función del Ejemplo 1 correspondiente a $\lambda_0 = -0.25$.

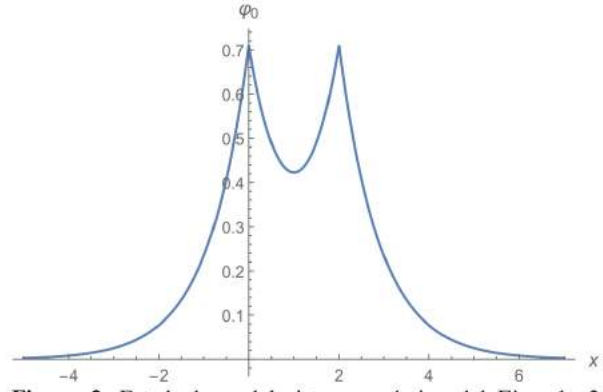


Figura 2. Estado base del sistema cuántico del Ejemplo 2 correspondiente a $\lambda_0 = -1.22957$.

Ejemplo 2. Consideremos un potencial V definido en términos de dos distribuciones de Dirac

$$V(x) = -\alpha_0 \delta(x) - \alpha_1 \delta(x-2), \quad \alpha_0, \alpha_1 > 0. \quad (0.53)$$

De acuerdo con el ejemplo anterior se puede ver que las condiciones puntuales que se establecen en los puntos $x=0$ y $x=2$ están expresadas en forma matricial como

$$A_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\alpha_0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\alpha_1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (0.54)$$

Supongamos que $\alpha_0 = \alpha_1 = 2$. En este caso la expresión para la función κ toma la forma

$$\kappa(k) = \frac{e^{-4k} (-1 + e^{4k} (-1 + k)^2)}{k^2}. \quad (0.55)$$

Los ceros de la ecuación de dispersión son $k_0 = 1.108857$, $k_1 = 0.796812$, que corresponden a los eigen-valores $\lambda_0 = -1.229563$, $\lambda_1 = -0.634909$. La expresión para las eigen-funciones normalizadas es

$$\varphi_j = \frac{1}{L_j} \begin{cases} e^{k_j x}, & -\infty < x \leq 0, \\ \frac{e^{-k_j x} (1 + e^{2k_j x} (-1 + k_j))}{k_j}, & 0 \leq x \leq 2, \\ \frac{(1 + e^{4k_j} (-1 + k_j) + k_j)}{k_j^2} e^{-k_j x}, & 2 \leq x < \infty, \end{cases} \quad (0.56)$$

$j = 0, 1$. Las constantes de normalización L_j calculadas a partir de la norma en $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ toman los siguientes valores $L_0 = 1.407382$, $L_1 = 1.367460$. Las gráficas de las eigen-funciones de este problema se muestran en las siguientes Figuras 2 y 3, respectivamente.

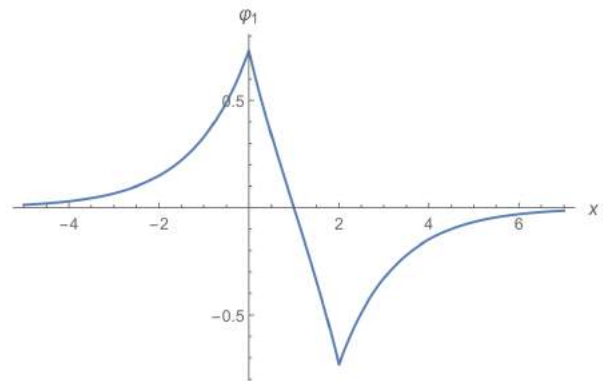


Figura 3. Primer estado excitado del Ejemplo 2 correspondiente a $\lambda_1 = 0.63491$.

Ejemplo 3. Consideremos el potencial singular

$$V(x) = -\beta_0 \delta'(x), \quad \beta_0 > 0 \quad (0.57)$$

el cual establece las siguientes condiciones de frontera en el punto de singularidad $x=0$

$$u(0^+) = u(0^-) - \beta_0 u'(0^-) \quad (0.58)$$

$$u'(0^+) = u'(0^-), \quad (0.59)$$

las cuales establecen la continuidad de la derivada y el salto de la función en el punto $x=0$. La manera en que se obtienen estas condiciones de frontera es similar al caso de la delta de Dirac, como se puede ver en [11]. Estas condiciones se expresan en su forma matricial como

$$A_0 = \begin{pmatrix} 1 & -\beta_0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (0.60)$$

Supongamos que $\beta_0 = 1$, entonces la ecuación de dispersión $\kappa(k) = 0$ se define a partir de la función

$$\kappa(k) = -\frac{1}{2}(-2+k). \quad (0.61)$$

En este caso la ecuación de dispersión tiene un único cero dado por $k_0=2$, de modo que el eigen-valor correspondiente es $\lambda_0=-4$ y la eigen-función normalizada correspondiente se define por

$$\varphi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{cases} e^{k_0 x}, & -\infty < x \leq 0, \\ -\frac{k_0}{2} e^{-k_0 x}, & 0 \leq x < \infty. \end{cases} \quad (0.62)$$

En la Figura 4 se muestra la gráfica de esta eigen-función. Observe que ésta es discontinua en $x=0$ tal como lo establecen las condiciones matriciales anteriores.

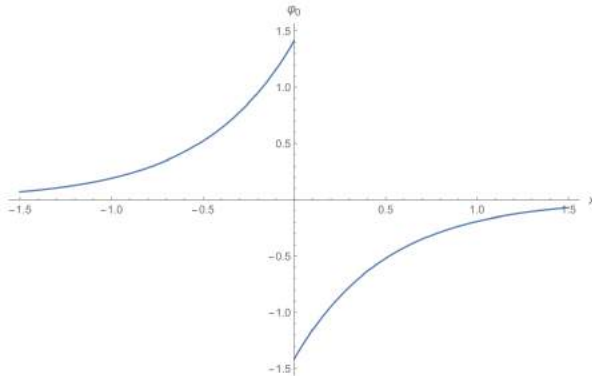


Figura 4. Eigen-función del Ejemplo 3 correspondiente a $\lambda_0=-4$.

Ejemplo 4. Consideremos ahora un problema con dos discontinuidades que definen el siguiente potencial

$$V(x) = -\beta_0 \delta'(x) - \beta_1 \delta'(x-2), \quad \beta_0, \beta_1 > 0 \quad (0.63)$$

donde las condiciones de frontera puntuales en $h_0=0$, $h_1=2$ en forma matricial son

$$A_0 = \begin{pmatrix} 1 & \beta_0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A_1 = \begin{pmatrix} 1 & \beta_1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (0.64)$$

Sean $\beta_0 = \beta_1 = -1$. En este caso la expresión para κ toma la forma

$$\kappa(k) = \frac{e^{-4k} (e^{4k} (-2+k)^2 - k^2)}{4}. \quad (0.65)$$

Los ceros de la ecuación de dispersión $\kappa(k)=0$ son $k_0=2.034764$, $k_1=1.961179$, y los eigen-valores correspondientes son $\lambda_0=-4.14027$, $\lambda_1=-3.84623$. La expresión para las eigen-funciones normalizadas se representan por la función continua a trozos

$$\varphi_j = \frac{1}{L_j} \begin{cases} e^{k_j x}, & -\infty < x \leq 0, \\ (1-k_j) \cosh(k_j x) + \sinh(k_j x), & 0 \leq x \leq 2, \\ \frac{k_j e^{-k_j x} (e^{4k_j} (k_j-2) - k_j - 2)}{4}, & 2 \leq x < \infty, \end{cases} \quad (0.66)$$

$j=0,1$ donde las constantes de normalización L_j en este caso son $L_0=1.034764$, $L_1=0.961179$. Las gráficas de las eigen-funciones de este problema se muestran en las Figuras 5 y 6. Observe las discontinuidades de las eigen-funciones en los puntos donde se encuentran localizadas las distribuciones δ' .

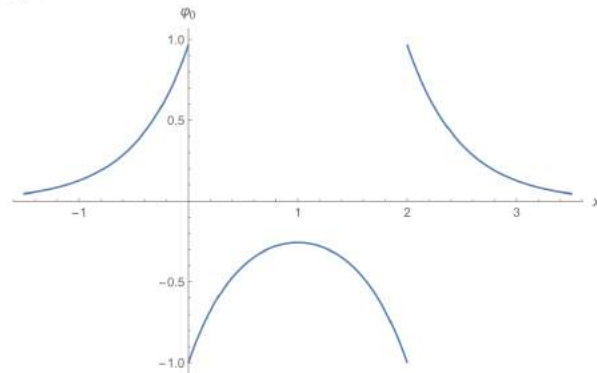


Figura 5. Eigen-función del Ejemplo 4 correspondiente a $\lambda_0=-4.14027$.

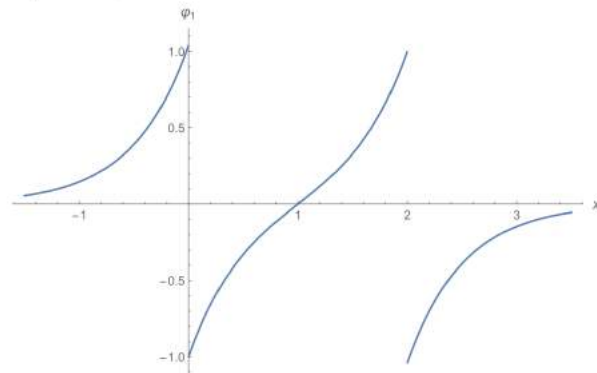


Figura 6. Eigen-función del Ejemplo 4 correspondiente a $\lambda_1=-3.84623$.

IV. CONCLUSIONES

El método presentado permite considerar interacciones puntuales como las distribuciones de Dirac δ y su derivada δ' , entre otras, y determinar el espectro discreto correspondiente a partir de una ecuación de dispersión que se da en forma cerrada y que resulta de diversas operaciones matriciales. La representación que se obtiene de las soluciones de la ecuación de Schrödinger da lugar a un método recursivo

que permite su implementación numérica inmediata, además permite obtener las eigen-funciones asociadas a cada punto del espectro. Con respecto a los resultados numéricos obtenidos su interpretación física dependerá del tipo de problema en el que se emplee, por ejemplo, en la mecánica cuántica los picos de las eigen-funciones corresponden al lugar donde es más probable encontrar a la partícula; por otra parte, el caso de una guía de onda podría modelarse por un potencial tipo delta formado por dos discontinuidades, las cuales representarían las paredes de ésta.

V. REFERENCIAS

- [1] Lobanos-Igor, Lotoreichik V. y Popov I., Lower bound on the spectrum of the Schrödinger operator in the plane with \mathcal{D} -potential supported by a curve. *Theor. Math. Phys.* 162 No. 3, pp. 397-407, 2010.
- [2] Barrera-Figueroa, V and Rabinovich V. S., Effective numerical method of spectral analysis of quantum graphs. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, Vol. 50, No. 21, 2017.
- [3] Berkolaiko, G., Kuchment, P., Introduction to Quantum Graphs. Mathematical surveys and monographs. Vol. 186, 2012.
- [4] De Vincenzo S. y Sánchez C., One-dimensional point interactions and bound states. *Revista Mexicana de Física.* 62, pp. 117-124, 2016.
- [5] Demkov, Yu. N. y Ostrovskii V. N., Zero Range Potentials and Their Application in Atomic Physics. *Plenum Press: New York*, 1988.
- [6] Banica, V. y Liviu I. I., Dispersion for the Schrödinger equation on the line with multiple Dirac delta potentials and on delta tres, *Journal of Mathematical Physics.* No. 52, 2011.
- [7] R. de L. Kronig y W. G. Penney, Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices, *Proc. R. Soc. A* 130, 499, 1931.
- [8] Vladimirov V. S., Equations of Mathematical Physics. *Marcel Dekker, INC.*, 1971.
- [9] Zimmermann H., Integrated Silicon Optoelectronics, *Springer*, 2000.
- [10] Berezin F. A. y Shubin M. A., The Schrödinger equation, *Kluwer academic publishers.* 1994.
- [11] Griffiths D. J., Boundary conditions at the derivative of a delta function, 1993.

Referencias

- [1] Acosta V, Cowan CL, Graham BJ. *Curso de Física Moderna*. 1975, Oxford University Press: México.
- [2] Ahmed Z, Kumar S, Sharma M, Sharma V. *Revisiting double Dirac delta potential*. Eur. J. Phys., 2016 **37**.
- [3] Albeverio S, Gesztesy F, Hoegh-Krohn R, Holden H. *Solvable models in quantum mechanics*. 1988, American Mathematical Society: USA.
- [4] Albeverio S, Kurasov P. *Singular Perturbations of Differential Operators*. 1999, Cambridge University Press: UK.
- [5] Aleksandrov AD, Kolmogorov AN, Laurentiev MA. *La matemática: 2. Su contenido, métodos y significado*. 1974, Alianza Universidad: México.
- [6] Barrera-Figueroa V. *Spectral Parameter Power Series for Elliptic Problems with Sources (Doctoral dissertation)*. CINVESTAV Departamento de Matemáticas, México 2013.
- [7] Barrera-Figueroa V, Rabinovich VS. *Effective numerical method of spectral analysis of quantum graphs*. J. Phys. A: Math. Theor., 2017 **50**.
- [8] Behrndt J, Exner P, Lotoreichik V. *Essential spectrum of Schrödinger operators with δ -interactions on the union of compact Lipschitz hypersurfaces*. Proc. Appl. Math. Mech., 2013 **13**: 523–524.
- [9] Behrndt J, Langer M, Lotoreichik V. *Schrödinger Operators with δ and δ' -Potentials Supported on Hypersurfaces*. Ann. Henri Poincaré, 2013 **14** 385–423.
- [10] Behrndt J, Exner P, Lotoreichik V. *Schrödinger Operators with δ - and δ' -interactions on Lipschitz surfaces and chromatic numbers of associated partitions*. Reviews in Mathematical Physics, 2014 **26** (8).
- [11] Berezin FA, Faddeev LD. *A remark on Schrödinger's equation with a singular potential*. Soviet Math. Dokl., 1961 **2**.
- [12] Berezin FA, Faddeev LD. *Note on the Schrödinger equation with the singular potential*. Math. USSR Dokl., 1961: 1011–1014.
- [13] Berezin FA, Shubin MA: *The Schrödinger equation. Series: Mathematics and its applications (Kluwer Academic Publishers)*. Soviet series, 1991 **68**.
- [14] Bordag M, Pirozhenko IG. *Casimir effect for Dirac lattices*. PhysRev D, 2017 **95**.
- [15] Brasche JF, Nizhnik L. *One-dimensional Schrödinger operators with δ -interactions on a set of Lebesgue measure zero*. Oper. Matrices, 2013 **7**: 887–904.
- [16] Brasche JF, Nizhnik LP.: *One-dimensional Schrödinger operators with general point interactions*. Methods of Functional Analysis and Topology, 2013 **19**: 4–15.
- [17] Cohen-Tannoudji C, Diu B, Laloë F. *Quantum Mechanics*. 1977, John Wiley: USA.
- [18] Coutinho FAB, Nogami Y, Pérez JF. *Generalized point interactions in one-dimensional quantum mechanics*. J. Phys. A. Math. Gen., 1997 **30**: 3937–3945.

-
- [19] Demkov YN, Ostrovskii VN. *Zero-range potentials and their Applications in Atomic Physics*. 1988, Plenum Press: USA.
- [20] Dudley DG, *Mathematical Foundations for Electromagnetic Theory*. 1994, IEEE PRESS Series on Electromagnetic Waves: USA.
- [21] Fassari S, Gadella M, Glasser ML, Nieto LM. *On the spectrum of the Schrödinger Hamiltonian of the one-dimensional conic oscillator perturbed by a point interaction*. Eprint arXiv:1706.04916, 2017.
- [22] Fermi E. *Sopra lo spostamento per pressione delle righe elevate delle serie spettrali*. Nuovo Cimento, 1934 **11**: 157–166.
- [23] Flesia C, Johnston R, Kunz H. *Strong Localization of Classical Waves: A Numerical Study*. EPL (Europhysics Letters), 1987 **3** (4).
- [24] Flügge S. *Practical Quantum Mechanics*. Springer-Verlag, 1974 **58**.
- [25] Gadella M, Negro J, Nieto LM. *Bound states and scattering coefficients of the $-a\delta(x) + b\delta'(x)$ potential*. Physics Letters A, 2009 **373**: 1310–1313.
- [26] Gadella M, Glasser ML, Nieto LM. *The infinite square well with a singular perturbation*. Int. J. Theor Phys, 2011 **50**: 2191–2200.
- [27] Gadella M, Glasser ML, Nieto LM. *One dimensional models with a singular potential of the type $-a\delta(x) + b\delta'(x)$* . Int. J. Theor Phys, 2011 **50**: 2144–2152.
- [28] Glasser ML, Jaskólski W, García-Moliner F, Velasco VR. *Quasibound states in an electric field*. Phys. Rev. B, 1990 **42** 7630–7632.
- [29] Griffiths DJ. *Boundary conditions at the derivative of a delta function*. J. Phys. A: Math. Gen., 1993 **26** (9): 2265.
- [30] Griffiths DJ. *Introduction to Quantum Mechanics*. 1995, Prentice Hall: USA.
- [31] Grossmann A, Høegh-Krohn R, Mebkhout M. *A class of explicitly soluble, local, many-center Hamiltonians for one-particle quantum mechanics in two and three dimensions*. J. Math. Phys., 1980 **21**.
- [32] Kim CS, Satanin AM. *Tunneling through a quantum channel with impurities: An exactly solvable model*. Physica E., 1999.
- [33] Kowal D, Sivan U, Entin-Wohlman O, Imry Y. *Transmission through multiply-connected wire systems*. Phys. Rev. B, 1990 **42**: 9009.
- [34] Kostenko A, Malamud MM. *1-D Schrödinger operators with local point interactions on a discrete set*. J. Differential Equations, 2010 **249** (2): 253–304.
- [35] Kravchenko VV, Porter RM. *Spectral parameter power series for Sturm-Liouville problems*. Wiley InterScience, 2010. **33**: 459–468.
- [36] Kuchment P. *Graph models for waves in thin structures*. Waves Random Media, 2002 **12** (4): R1–R24.
- [37] Kurasov P. *Distribution theory for discontinuous test functions and differential operators with generalized coefficients*. Journal of Mathematical Analysis and Applications, 1996 **201** (1): 297–323.
- [38] Lapidus IR. *Resonance scattering from a double Dirac delta potential*. Am. J. Phys., 1982 **50**: 663.
- [39] Malamud MM, Schmüdgen K. *Spectral theory of Schrödinger operators with infinitely many point interactions and radial positive definite functions*. J. Funct. Analysis, 2012 **263** (10): 3144–3194.
- [40] Man'ko SS. *On δ' -like potential scattering on star graphs*. J. Phys. A: Math. Theor., 2010 **43**.
- [41] Marchenko VA. *Sturm-Liouville Operators and Applications*. 1986, Springer Base AG.

- [42] Munárriz J, Domínguez-Adame F, Lima RPA. *Spectroscopy of the Dirac oscillator perturbed by a surface delta potential*. Physics Letters A, 2012 **376** (46): 3475–3478.
- [43] Ogurisu O. *On the number of negative eigenvalues of a multi-dimensional Schrödinger operator with point interactions*. Methods Funct. Anal. Topology, 2010 **16** (4): 383–392.
- [44] Pauling L. *The Diamagnetic Anisotropy of Aromatic Molecules*. The Journal of Chemical Physics, 1936 **4** (10): 673–677.
- [45] Platt JR. *Classification of Spectra of Cata-Condensed Hydrocarbons*. The Journal of Chemical Physics, 1949 **17** (5): 484–495.
- [46] Rabinovich VS. *Essential Spectrum of Schrödinger Operators with δ -Interactions on Unbounded Hypersurfaces*. Mathematical Notes, 2017 **102** (5): 698–709.
- [47] Reed M, Simon B. *Methods of Modern Mathematical Physics, I: Functional Analysis*. 1980, Academic Press, INC.
- [48] Richardson MJ, Balazs NL. *On the network model of molecules and solids*. Annals of Physics, 1972 **73** (2): 308–325.
- [49] Šeba P. *Some remarks on the δ' -interaction in one dimension*. Reports on mathematical physics, 1986 **24**.
- [50] Shubin CC, Stolz G. *Spectral theory of one-dimensional Schrödinger operators with point interactions*. J. Math. Anal. Appl., 1994: 491–516.
- [51] Simon B. *Sturm Oscillation and Comparison Theorems*. Amrein W.O., Hinz A.M., Pearson D.P., Sturm-Liouville Theory. Birkhäuser Basel, 2005.
- [52] Stakgold I. *Boundary Value Problems of Mathematical Physics*. 1967, Society for Industrial and Applied Mathematics: USA.
- [53] Vladimirov VS. *Equation of Mathematical Physics*. 1984, Mir: USA.