



Instituto Politécnico Nacional

Unidad Profesional Interdisciplinaria en Ingeniería y Tecnologías Avanzadas

Sección de Estudios de Posgrado e Investigación

“Estados de dispersión para un sistema cuántico sometido a interacciones
puntuales”

Que para obtener el grado de

“Maestro en Tecnología Avanzada”

Presenta:

Miguel Ángel Díaz Cigales

Directores de tesis:

Dr. Víctor Barrera Figueroa
Dr. Vladimir Rabinovich Likhman



Barrio la Laguna Ticomán, Ciudad de México, a 21 de enero de 2020.



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 03 de Octubre 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):

Díaz Cigales Miguel Ángel

Apellido paterno

Apellido materno

Nombre (s)

Con registro: B 1 6 0 0 0 5

Aspirante de:

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

De manera general el tema abarcará los siguientes aspectos:
Cálculo de las condiciones de frontera para interacciones tipo delta de Dirac y de su derivada.
Cálculo de los eigen-valores, eigen-funciones y coeficientes de transmisión y reflexión de la ecuación de Schrödinger unidimensional que involucran interacciones puntuales.

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

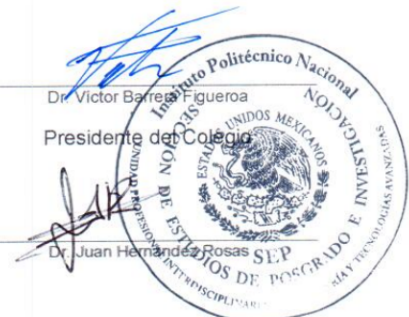
Aspirante

Miguel Ángel Díaz Cigales

Dr. Víctor Barrera Figueroa

Presidente del Colegio

Dr. Juan Hernández Rosas





SIP-14-BIS

**INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL
SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO**

ACTA DE REVISIÓN DE TESIS

En la Ciudad de México siendo las 15:00 horas del día 14 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 de dispersión para un sistema cuántico sometido a interacciones puntuales.

Presentada por el alumno:

DIAZ CIGALES MIGUEL ANGEL
Apellido paterno Apellido materno Nombre(s)
Con registro:

B	1	6	0	0	0	5
---	---	---	---	---	---	---

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. Lev Guzmán Vargas
Presidente

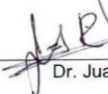


Dra. Sara Guadalupe Cruz y Cruz
Secretario


Dr. Vladimir Rabinovitch Likhthman
1er Vocal


Dr. Víctor Barrera Figueroa
2º Vocal


Dr. Ulises Velasco García
3er Vocal

PRESIDENTE DEL COLEGIO DE PROFESORES


Dr. Juan Hernández Rosas


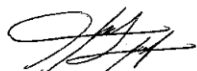


INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL
SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

CARTA CESIÓN DE DERECHOS

En la Ciudad de México el día 21 del mes Enero del año 2020, el (la) que suscribe Díaz Cigales Miguel Angel alumno (a) del Programa de Maestría en Tecnología Avanzada con número de registro B160005, adscrito a Sección de Estudios de Posgrado e Investigación de la Unidad Profesional Interdisciplinaria en Ingeniería y Tecnologías Avanzadas, manifiesta que es autor (a) intelectual del presente trabajo de Tesis bajo la dirección de Dr. Víctor Barrera Figueroa, Dr. Vladimir Rabinovitch Likhtman y cede los derechos del trabajo intitulado Estados de dispersión 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 miguel_angel_d_cigales@hotmail.com Si el permiso se otorga, el usuario deberá dar el agradecimiento correspondiente y citar la fuente del mismo.


Díaz Cigales Miguel Angel

Nombre y firma

Dedicatoria

Esta tesis se la quiero dedicar al Dr. Víctor Barrera Figueroa ya que sin su apoyo no hubiera sido posible este trabajo.

De igual forma se la quiero dedicar a mis padres Miguel Díaz y Norma Cigales por su largo esfuerzo y dedicación en mis estudios.

Esta tesis es dedicada a mi familia Andrea Hernandez y Samara por seguirme apoyando y motivando en mi desarrollo. De igual forma quiero nombrar a mis dos hermanas Cynthia y Sandra por enseñarme a ser día a día mejor persona. Por ultimo pero no menos importante se la quiero dedicar maña Luchis y a mi mamá Yoli por su amor y cuidado que me han dado durante toda mi vida.

Agradecimientos

En esta tesis quiero agradecer al Instituto Politécnico Nacional, así como a la Unidad Profesional Interdisciplinaria en Ingeniería y Tecnologías Avanzadas por haberme aceptado en el programa de Maestría en Tecnología Avanzada.

De igual forma quiero agradecer a la línea de Fenómenos Electromagnéticos e información Cuántica por haber confiado en mí y apoyarme en mi proceso hasta el final.

Quiero agradecer al CONACYT por haberme apoyado durante toda mi estancia en el programa.

En particular quiero agradecerle al Dr. Víctor Barrera Figueroa ya que sin su apoyo este trabajo no hubiera sido posible.

Índice general

Agradecimientos	I
Resumen	V
Abstract	VI
1. Introducción	1
1.1. Estado del Arte	1
1.2. Planteamiento del problema	2
1.3. Objetivos	3
1.3.1. Objetivo general	3
1.3.2. Objetivos particulares	3
1.4. Contenido de esta tesis	4
1.5. Aportaciones de esta tesis	4
2. Condiciones en la frontera para potenciales con soporte puntual	5
2.1. Notaciones	5
2.2. Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo	6
2.3. Condiciones de frontera para un potencial tipo delta de Dirac	7
2.4. Una extensión del operador de Schrödinger con interacciones puntuales	8
2.5. Condiciones en la frontera para potenciales singulares con múltiples singularidades	11
2.6. Operadores de Schrödinger unidimensionales con interacciones puntuales auto-adjuntos	11
3. Ecuación de dispersión para sistemas cuánticos con potenciales singulares	15
3.1. Ecuación de dispersión para potencial tipo delta de Dirac	15
3.2. Ecuación de dispersión para un potencial con dos deltas de Dirac	17
3.3. Un método matricial para obtener la ecuación de dispersión para un punto de discontinuidad	19
3.4. Un método matricial para obtener la ecuación de dispersión para dos puntos de discontinuidad	21
3.5. Un método matricial para obtener la ecuación de dispersión para n puntos de discontinuidad	24
4. Coeficientes de transmisión y reflexión para los estados de dispersión ante potenciales con singularidades	27
4.1. Coeficientes de transmisión y reflexión para un potencial con un punto singular	27
4.2. Coeficientes de transmisión y reflexión para un potencial con dos puntos singulares	29
4.3. Coeficientes de transmisión y reflexión para un potencial con n puntos singulares	32
5. Análisis de los estados de dispersión de un sistema con potencial de corto alcance e interacciones puntuales, usando matrices de monodromía	35
5.1. Potencial de corto alcance con dos interacciones puntuales	35
5.1.1. Solución SPSS del problema de transmisión a través de una barrera de potencial con dos interacciones puntuales	40
5.2. Potencial de corto alcance con múltiples interacciones puntuales	41

5.3. Solución SPPS del problema de transmisión a través de un potencial de corto alcance con múltiples interacciones puntuales	47
5.3.1. Un método de construcción de la solución particular $u_{0,j}$	49
5.4. Implementación computacional	50
6. Conclusiones y trabajo a futuro	53
Referencias	56

Resumen

Consideremos la ecuación de Schrödinger unidimensional con un potencial q que tiene una parte regular expresada por una función acotada con soporte compacto, y una parte singular expresada formalmente en términos de distribuciones con soportes puntuales, tales como distribuciones δ o δ' . A partir de este tipo de potenciales se obtienen extensiones auto-adjuntas del operador de Schrödinger que incluye únicamente la parte regular además de ciertas condiciones en la frontera puntuales correspondientes a las interacciones puntuales, que se pueden representar de forma matricial.

A partir de las extensiones auto-adjuntas y de las condiciones en la frontera puntuales se obtienen operadores no acotados cuyo espectro discreto representa las energías de los estados ligados del sistema cuántico descrito por este operador. El cálculo del espectro discreto del operador unidimensional de Schrödinger con potencial que involucra una parte regular y múltiples interacciones puntuales se realiza a partir de una ecuación de dispersión mediante, la cual se determina por medio de un método matricial recursivo.

Por otra parte, se analizan los estados de dispersión de este sistema cuántico y se obtienen los coeficientes de transmisión y reflexión de las ondas cuánticas que interactúan con potenciales de este tipo. Con el objetivo de determinar estos coeficientes se introducen las matrices de monodromía y se desarrolla un método matricial a partir del cual se obtienen expresiones explícitas para los coeficientes de reflexión y transmisión, las cuales involucran el cálculo de soluciones de la ecuación de Schrödinger.

Para el cálculo de tales soluciones se emplea el método SPPS, el cual conduce a expresiones en forma de series de potencias del parámetro de la energía. Esto da como resultado expresiones explícitas para las matrices de monodromía las cuales admiten una implementación computacional directa lo cual da lugar a métodos numéricos para el cálculo de los problemas de transmisión en barreras de potencial arbitrarias con interacciones puntuales.

Palabras clave: Ecuación de Schrödinger, potencial singular, potencial regular, condiciones en la frontera puntuales, método matricial, matrices de monodromía, método SPPS .

Abstract

Let us consider one-dimensional Schrödinger equation with a potential q having a regular part expressed by a bounded function with compact support, and a singular part formally expressed in terms of distributions with point support, such as δ or δ' distributions. In order to deal with the singular part of the potential, self-adjoint extensions are obtained from the Schrödinger operator which includes only the regular part plus certain point conditions corresponding to the point interactions, which can be represented in a matrix form.

From the self-adjoint extensions and from the point conditions, we obtain unbounded operators whose discrete spectrum represents the energies of the bound states of the quantum system described by this operator. The calculation of the discrete spectrum of the one-dimensional Schrödinger operator with a potential involving the regular part and multiple point interactions is made by means of a dispersion equation, which is determined from a recursive matrix approach.

On the other hand, the dispersion states of this quantum system are analyzed, and the transmission and reflection coefficients of the quantum waves that interact with a potential of this kind are obtained. In order to determine these coefficients, the monodromy matrices are introduced and a matrix method is developed from which explicit expressions for the reflection and transmission coefficients are obtained, which involve the calculation of solutions of the Schrödinger equation.

For the calculation of such solutions the SPPS method is used, which leads to expressions in the form of power series of the energy parameter. This leads to explicit expressions for the monodromy matrices, which admit a direct computational implementation, and which give rise to a numerical method for the analysis of transmission problems that include arbitrary potential barriers with point interactions.

Keywords: Schrödinger equation, singular potential, regular potential, matrix method, monodromy matrices, SPPS method.

Capítulo 1

Introducción

En esta tesis se estudia la ecuación de Schrödinger unidimensional con interacciones puntuales, tales como δ o δ' . Donde las interacciones puntuales estarán representadas por una matriz 2×2 , y se obtendrán los estados ligados y la relación de dispersión mediante un método matricial para una, dos, y múltiples interacciones singulares.

Se abordará el tema de los estados de dispersión ante múltiples interacciones singulares y un potencial regular mediante las matrices de monodromía.

1.1. Estado del Arte

Los operadores diferenciales lineales de segundo grado aparecen frecuentemente en los problemas de matemáticas aplicadas a la física cuántica, electrodinámica y acústica. Los operadores más ampliamente utilizados en estas áreas incluyen a los operadores de Schrödinger, de Helmholtz, o de Laplace, por mencionar algunos. Estos operadores se estudian en dominios acotados a los cuales se les fijan condiciones en la frontera, o en dominios no acotados donde se establecen ciertas condiciones asintóticas en el infinito, con el objeto de modelar ciertos procesos ondulatorios. Sin embargo, también es frecuente establecer condiciones puntuales que las soluciones deben satisfacer para modelar ciertas interacciones puntuales. El estudio de operadores diferenciales con múltiples interacciones puntuales que frecuentemente surgen en problemas en la física fue realizado por Demkov y Ostrovskii [9]. La primera investigación matemáticamente correcta para los operadores con interacciones puntuales fue realizada por Berezin y Feddev [8]. El estudio de operadores con interacciones puntuales en tres dimensiones fue realizado por Albeverio [10]. Posteriormente los operadores diferenciales con interacciones puntuales unidimensional fueron estudiados por Kurasov [1], donde su objetivo fue aclarar las relaciones entre las interacciones singulares y las perturbaciones auto-adjuntas para el operador segunda derivada. Una de estas interacciones permite representar a la distribución delta de Dirac, la cual es ampliamente utilizada en la física y puede modelar en mecánica cuántica las interacciones puntuales de las partículas que forman un cristal, o potenciales localizados en regiones bien definidas del espacio. Otro tipo de interacciones puntuales que también encuentran varias aplicaciones interesantes es la distribución δ' que corresponde a la derivada (en el sentido de las distribuciones) de la distribución de Dirac y que representa interacciones dipolares. Este tipo de interacciones ha sido estudiada por Coutinho [11].

En un trabajo más reciente [12], Gadella *et al.* abordan el operador de Schrödinger con un potencial con interacciones singulares del tipo $-\alpha\delta(x) + \beta\delta'(x)$ y obtienen los estados ligados usando la técnica de la función de Lippman-Schwinger Green. En este trabajo se estudian las condiciones en la frontera para una interacción puntual tipo δ , y posteriormente se establece una extensión del operador de Schrödinger para poder trabajar con interacciones puntuales de tipo δ ó δ' , esto es con el objetivo de obtener los estados ligados de un sistema con una o dos interacciones puntuales. Posteriormente en este trabajo se generalizan las interacciones puntuales en una matriz 2×2 , y se obtienen los estados de dispersión mediante un método matricial para una, dos, y múltiples interacciones singulares. En este trabajo se discute la influencia de una perturbación del tipo $-\alpha\delta(x) + \beta\delta'(x)$ en dos modelos unidimensionales. Uno es descrito por una partícula sujeta a un campo eléctrico constante, con Hamiltoniano $H = p^2 - Fx$ con F constante, y el otro es el oscilador armónico. Posteriormente, los mismos autores en su artículo [16] realizan un análisis similar pero

cuando la perturbación singular se aplica a un pozo de potencial rectangular infinito.

L. M. Nieto *et al.* obtiene resultados sobre potenciales con interacciones singulares para el análisis de los estados ligados los cuales sirven como un modelo matemático de metamateriales y para modelos de sólidos reales en física del estado sólido [14]. Para dicho estudio se necesitaría modelar dichos potenciales singulares junto con un potencial de corto alcance.

M. Gadella *et al.* en el trabajo [13] estudiaron la ecuación de Schrödinger unidimensional con un potencial de tipo δ' donde obtuvieron los estados ligados y las correspondientes energías, de igual forma obtienen expresiones para los coeficientes de reflexión y transmisión de este sistema cuántico. Por otra parte, Fatih Erman y M. Gadella en su artículo [17] dan una revisión del espectro de estados ligados con potenciales que incluyen N deltas de Dirac unidimensionales convirtiendo la ecuación de Schrödinger $H\psi = E\psi$ independiente del tiempo que describe los estados ligados en un problema de eigen-valores para una matriz Hermitiana de $N \times N$. Una vez formulado el problema como uno de valores propios de dimensión finita, mostraron que existen como máximo N estados ligados para N interacciones, donde usaron el teorema de Feynman-Hellmann. El propósito de este artículo fue mostrar que a diferencia de las degeneraciones que aparecen en los estados ligados, se daba una prueba elemental de que el estado fundamental no es degenerado y que la función de onda del estado fundamental siempre se puede elegir como real y estrictamente positiva.

1.2. Planteamiento del problema

La ecuación de Schrödinger es una ecuación fundamental en la física-matemática que representa el comportamiento de una partícula cuántica no-relativista. Además del ámbito cuántico esta ecuación aparece frecuentemente en los problemas de propagación de ondas acústicas, eléctricas y electromagnéticas que se presentan frecuentemente en las áreas de la ingeniería eléctrica tales como la electrónica y el electromagnetismo, y en áreas de la física como la acústica. Por ejemplo, si se considera la ecuación de Helmholtz en \mathbb{R}^3 , que describe la propagación de ondas en el estado estacionario en el espacio, y si se aplica el método de Fourier de separación de variables o la transformada de Fourier con respecto a algunas coordenadas espaciales se puede llegar a una ecuación unidimensional de Schrödinger. Por lo tanto, las técnicas de solución que se desarrollen para los problemas en el ámbito cuántico pueden ser utilizados en diferentes problemas, por ejemplo, en los problemas de propagación de ondas en guías de ondas electromagnéticas, eléctricas y acústicas; en la propagación de ondas cuánticas en estructuras cristalinas tales como los semiconductores; y otros problemas de interés. Cabe resaltar que la búsqueda de soluciones de la ecuación de Schrödinger no es un problema trivial ya que incluso para funciones potenciales suficientemente suaves no existen soluciones generales, y sólo ante pocos potenciales existen soluciones cerradas exactas.

En este trabajo se considera la ecuación de Schrödinger unidimensional estacionaria libre de unidades para una partícula masiva que interactúa con un potencial singular con soporte en varios puntos discretos, así como con un potencial regular acotado. Los estados ligados de estos sistemas cuánticos se caracterizan por las energías permitidas del sistema, las cuales se calculan a partir de los ceros de una ecuación de dispersión que se obtiene de forma explícita por medio de relaciones matriciales para el caso donde se consideran N interacciones puntuales. Por otra parte los estados de dispersión de los sistemas cuánticos que comprenden tanto potenciales regulares como potenciales singulares puntuales se analizan en la presente tesis por medio del uso de las matrices de monodromía, las cuales permiten obtener expresiones explícitas para los coeficientes de transmisión y reflexión del mismo sistema cuántico.

El método abordado se basa en representar las condiciones en la frontera en los puntos de discontinuidad en forma matricial. A su vez esta representación matricial permite generalizar las condiciones en la frontera puntuales. El enfoque matricial permite considerar las interacciones puntuales como extensiones auto-adjuntas de ciertos operadores no acotados con la variable independiente definida en todos los puntos menos en aquellos donde las interacciones se encuentran localizadas. Esto permite analizar sistemas cuánticos cuando se consideran potenciales singulares como la delta de Dirac o su derivada por medio de ciertas interacciones puntuales a las que se someten las soluciones de la ecuación de Schrödinger. La importancia de los potenciales puntuales, tal como la delta de Dirac o su derivada, radica en que representa una condición altamente idealizada donde el potencial se encuentra localizada en una región puntual del espacio. El potencial delta de Dirac conduce a expresiones cerradas de las soluciones de la ecuación de Schrödinger cuando el potencial regular es nulo. Sin embargo para potenciales regulares arbitrarios representados por funciones acotadas continuas a trozos es necesario emplear otras técnicas como el método SPPS [7].

Por lo que finalmente se estudia un potencial de corto alcance con dos interacciones puntuales, donde se determina la relación de dispersión en términos de series de potencias usando el método SPSS y se logra generalizar el método para un potencial con múltiples interacciones puntuales y un potencial regular mediante las matrices de monodromía. Nosotros obtenemos dichos coeficientes mediante el método matricial, el cual está generalizada para un potencial δ o δ' o una combinación lineal de ambos.

1.3. Objetivos

1.3.1. Objetivo general

El objetivo de esta tesis consiste en estudiar los estados de sistemas cuánticos descritos por la ecuación de Schrödinger unidimensional con potenciales que involucran una parte regular así como múltiples interacciones puntuales. Se analizan los estados ligados y la relación de dispersión que define las energías de tales estados mediante un método matricial. Además, se analizan los estados de dispersión y se caracterizan los coeficientes de transmisión y reflexión por medio del uso de las matrices de monodromía. Se considera la implementación computacional a partir del uso del método SPSS para el cálculo de las soluciones de la ecuación de Schrödinger con potenciales regulares acotados.

1.3.2. Objetivos particulares

En forma específica, los objetivos de la tesis son los siguientes:

- Obtener las condiciones en la frontera puntuales que establecen las interacciones puntuales tipo δ o δ' en el marco de la ecuación de Schrödinger unidimensional.
- Representar las condiciones en la frontera puntuales en forma matricial.
- Obtener las condiciones que hacen que el operador no acotado de Schrödinger sea auto-adjunto en el espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R})$.
- Analizar los estados ligados para la ecuación unidimensional de Schrödinger con potenciales que incluyen una parte regular y múltiples interacciones puntuales.
- Obtener la ecuación de dispersión que define las energías de los estados ligados por medio de métodos matriciales.
- Analizar los estados de dispersión para la ecuación unidimensional de Schrödinger con potenciales que incluyen una parte regular y múltiples interacciones puntuales.
- Introducir las matrices de monodromía para representar las soluciones de la ecuación de Schrödinger ante múltiples interacciones puntuales.
- Obtener los coeficientes de transmisión y reflexión de la ecuación de Schrödinger ante múltiples interacciones puntuales en términos de las matrices de monodromía.
- Usar el método SPSS para la obtención de soluciones de la ecuación de Schrödinger con potenciales regulares acotados.
- Representar los coeficientes de transmisión y reflexión mediante series de potencias del parámetro de la energía por medio del método SPSS, ante múltiples interacciones puntuales y un potencial regular.
- Diseñar la implementación numérica del método matricial y SPSS desarrollado en esta tesis para el cálculo de los coeficientes de transmisión y reflexión.

1.4. Contenido de esta tesis

En el Capítulo 2 primero se consideran algunas notaciones que se utilizarán durante el trabajo, posteriormente se obtienen las condiciones en la frontera al considerar potenciales singulares, tales como δ o δ' en el ámbito de la ecuación de Schrödinger unidimensional. Finalmente, en este capítulo se justifican las condiciones que hacen que el operador de Schrödinger sea auto-adjunto en $L^2(\mathbb{R})$. Con base en las condiciones en la frontera deducidas del capítulo anterior, en el Capítulo 3 se consideran potenciales singulares atractivos en el ámbito de la ecuación de Schrödinger unidimensional y se obtiene la ecuación de dispersión para los estados ligados que definen sus correspondientes energías. La forma en que se obtiene la ecuación de dispersión consiste del uso de un método matricial que puede aplicarse recursivamente cuando se consideran múltiples interacciones puntuales. Por otra parte, en el Capítulo 4 se consideran potenciales singulares repulsivos ambos singulares y regulares, y se analiza el problema de transmisión a través de una barrera de potencial que incluye interacciones puntuales, con lo cual se obtienen los coeficientes de transmisión y reflexión correspondientes usando métodos matriciales. Finalmente, en el Capítulo 5 se estudia el problema de transmisión ante una barrera de potencial regular de corto alcance con interacciones puntuales, pero en este caso el análisis se realiza mediante el uso de las matrices de monodromía. A lo largo de esta tesis, la obtención de soluciones de la ecuación de Schrödinger para potenciales regulares se realiza utilizando el método SPSS, lo cual conduce a un método numérico efectivo para los problemas de transmisión aquí considerados.

1.5. Aportaciones de esta tesis

Dentro de las aportaciones que se obtuvieron en esta tesis se puede mencionar la representación matricial de las soluciones, el uso de matrices de monodromía para representar a las soluciones en los problemas de transmisión la representación recursiva de las matrices para el cálculo de los coeficientes de reflexión y transmisión, y la representación en series de potencias del parámetro de la energía de las matrices de monodromía. Los resultados obtenidos en esta tesis se presentaron en foros especializados en los cuales se mostraron avances de este trabajo. Los foros mencionados fueron los siguientes:

1. 50 Congreso Nacional de la Sociedad Matemática Mexicana, realizado del 22 al 27 de octubre de 2017, en las instalaciones de la Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, con la ponencia presentada: “*Cálculo de los coeficientes de reflexión y transmisión ante interacciones puntuales*”.
2. XVI Congreso Nacional de Ingeniería Electromecánica y de Sistemas, realizado del 13 al 17 de noviembre de 2017, en las instalaciones del Instituto Politécnico Nacional, Ciudad de México, con la ponencia presentada: “*Análisis matricial de los estados de un sistema cuántico con potencial singular*”.

Las constancias de participación se anexan al final de esta tesis.

Capítulo 2

Condiciones en la frontera para potenciales con soporte puntual

En este capítulo vamos a considerar potenciales singulares en el ámbito de la ecuación de Schrödinger unidimensional y vamos a obtener las condiciones en la frontera que introducen tales potenciales en los puntos de singularidad. Para obtener tales condiciones en la Subsección 2.1 introducimos algunas notaciones que vamos a ocupar a lo largo del trabajo. En la Subsección 2.3 describimos las condiciones en la frontera para un potencial singular tipo delta de Dirac a partir de la integración de la ecuación de Schrödinger en una vecindad que rodea dicha singularidad, posteriormente en la Subsección 2.4 se obtienen las condiciones en la frontera asociadas a un potencial singular que incluye además la distribución delta prima de Dirac, utilizando la teoría de las distribuciones y se presenta una extensión del operador de Schrödinger para trabajar con funciones discontinuas, lo que nos lleva a la Subsección 2.5 donde se obtienen las condiciones en la frontera para un potencial singular con más de una interacción puntual localizadas en diferentes puntos. Finalmente en la Subsección 2.6 se justifican las condiciones que hacen que el operador de Schrödinger sea auto-adjunto.

2.1. Notaciones

Denotemos por

$$D^\alpha := \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x_1^{\alpha_1} \cdots \partial x_n^{\alpha_n}}$$

el operador diferencial de orden $|\alpha| := \alpha_1 + \cdots + \alpha_n$, donde $\alpha := (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ es un multi-índice. El conjunto de funciones f junto con sus derivadas $D^\alpha f(x)$, $|\alpha| \leq p$ ($0 \leq p < \infty$) en una región $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ forman una clase de funciones denotada por $C^p(\Omega)$. Por $C^\infty(\Omega)$ denotamos a la clase de funciones continuamente diferenciables en $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$, mientras que $C_0^\infty(\Omega)$ denota al conjunto de funciones continuamente diferenciables con soporte compacto en $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$.

En la búsqueda de soluciones de la ecuación de Schrödinger se tiene que establecer el espacio funcional apropiado. Denotamos por $L^2(\Omega)$ al espacio de Hilbert que consiste de funciones medibles f tales que la integral

$$\int_{\Omega} |f(x)|^2 dx < \infty$$

existe en el sentido de Lebesgue. Este espacio puede ser usado para describir la densidad de probabilidad de las partículas cuánticas localizadas en una región de $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$, en cuyo caso la integral anterior tiene que ser igual a la unidad para que tenga el significado de probabilidad; o la densidad de energía de los campos electromagnéticos en $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$.

Denotemos por $L^\infty(\Omega)$ el espacio de todas las funciones esencialmente acotadas en Ω , es decir, el espacio $L^\infty(\Omega)$ consiste de todas las funciones f medibles en Ω , tales que existe un número positivo $0 < M < \infty$, para el cual casi en todas partes se cumple

$$|f(x)| \leq M, \quad \text{a.e. } x \in \Omega.$$

Definimos una norma para f en el espacio $L^\infty(\Omega)$ como el ínfimo de todos los posibles valores de M que satisfacen la desigualdad anterior. Esta norma se representa por $\|f\|_{L^\infty(\Omega)}$ o por $\|f\|_\infty$ la cual se llama algunas veces el supremo esencial de f .

Por otra parte, considere el espacio de Sobolev $H^m(\Omega) := \{f \in L^2(\Omega) : D^\alpha f \in L^2(\Omega), |\alpha| \leq m\}$, donde $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ es una región de \mathbb{R}^n . Resulta que $H^2(\Omega)$ también es un espacio de Hilbert el cual garantiza la suavidad de las funciones así como de sus derivadas parciales hasta de segundo orden, por lo cual este espacio resulta más apropiado para abordar los problemas que incluyen interacciones puntuales que serán abordados en esta tesis.

En este trabajo usaremos las notaciones

$$\begin{aligned} u(x_0^+) &:= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} u(x_0 + \epsilon) = u(x_0 + 0), \\ u(x_0^-) &:= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} u(x_0 - \epsilon) = u(x_0 - 0), \end{aligned}$$

para representar los límites laterales de una función u alrededor del punto x_0 .

Denotemos por $\mathcal{D} = \mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$ el conjunto de funciones de prueba, es decir, el conjunto de funciones continuamente diferenciables en \mathbb{R}^n con soporte compacto. Definiremos la convergencia en \mathcal{D} como sigue: la secuencia de funciones $\varphi_1, \varphi_2, \dots \in \mathcal{D}$ convergen a una función $\varphi \in \mathcal{D}$ (lo cual se denota como $\varphi_k \rightarrow \varphi$ en \mathcal{D} conforme $k \rightarrow \infty$) si: (a) existe $R > 0$ tal que $\text{supp} \varphi_k \subset U_R$, donde U_R es una vecindad de radio R con centro en el origen; (b) para cada multi-índice $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ se cumple que

$$D^\alpha \varphi_k(x) \implies D^\alpha \varphi(x), \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad k \rightarrow \infty.$$

A cada funcional lineal continuo en el espacio de las funciones de prueba \mathcal{D} se le conoce como función generalizada (también conocida como *distribución*) en el sentido de Sobolev-Schwartz. Denominaremos por $\mathcal{D}' = \mathcal{D}'(\mathbb{R}^n)$ al conjunto de todas las funciones generalizadas en \mathbb{R}^n . Denotaremos como $f(\varphi)$ al efecto de la función generalizada f sobre una función de prueba $\varphi \in \mathcal{D}$. Definiremos la convergencia en \mathcal{D}' como sigue: sea $f_1, f_2, \dots \in \mathcal{D}'$ una secuencia de funciones generalizadas, decimos que esta secuencia converge a la función generalizada $f \in \mathcal{D}'$, si $f_k(\varphi) \rightarrow f(\varphi)$ conforme $k \rightarrow \infty$, para cualquier función de prueba $\varphi \in \mathcal{D}$. Lo anterior se denota como $f_k \rightarrow f$ en \mathcal{D}' conforme $k \rightarrow \infty$; esta convergencia es llamada convergencia débil.

2.2. Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

Sea una partícula cuántica con masa m que se mueve en un campo de fuerza externo con potencial $V(x)$. Denotaremos por $\Psi(x, t)$ a la función de onda de esta partícula, tal que $|\Psi(x, t)|^2 dx$ es la probabilidad de que la partícula esté en un vecindad dx del punto x , en un instante de tiempo t . Entonces la función Ψ satisface la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V \Psi \quad (2.2.1)$$

donde $\hbar = 1,055 \times 10^{-34}$ J-s es la constante de Planck reducida, y Δ representa el operador Laplaciano.

Otra forma de representar la ley dinámica que gobierna $|\Psi(x, t)|^2$ es por medio de la ecuación de continuidad. Esta ecuación proporciona información adicional sobre la dinámica del sistema cuántico, por lo que es útil considerarla como una alternativa a la ecuación de Schrödinger. La ecuación de continuidad se lee como

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_q + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0, \quad \rho_q(x, t) := |\Psi(x, t)|^2, \quad (2.2.2)$$

donde

$$\mathbf{j}(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$$

se conoce como la corriente de densidad de probabilidad. En la expresión anterior Ψ^* representa el complejo conjugado de Ψ , y ∇ corresponde al operador Nabla. La interpretación física de (2.2.2) es la conservación de

la probabilidad, lo que significa que si hay un cambio en la densidad de probabilidad ρ_q en el tiempo, en una región delimitada del espacio, debe existir una densidad de probabilidad \mathbf{j} que fluye hacia adentro o hacia afuera de la superficie de la región dependiendo del signo de la divergencia $\nabla \cdot \mathbf{j}$.

Consideremos las soluciones armónicas en el tiempo de la ecuación de Schrödinger, es decir soluciones de energía E fija representadas por

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

Sustituyendo esta solución en la ecuación (2.2.1), se tiene lo siguiente

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

al hacer operaciones se obtiene la siguiente igualdad

$$E\psi(x) e^{-iEt/\hbar} = -\frac{\hbar^2}{2m} e^{-iEt/\hbar} \Delta \psi(x) + V(x) \psi(x) e^{-iEt/\hbar},$$

y al cancelar el término exponencial a ambos de la igualdad se obtiene la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x) + V(x) \psi(x) = E\psi(x).$$

En el caso unidimensional, se puede considerar la ecuación de Schrödinger libre de unidades

$$-\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E\psi(x),$$

donde se ha tomado $\hbar^2 = 1 = 2m$. La ecuación está sujeta a las condiciones en la frontera establecidas por el potencial V . La presente Tesis analiza las soluciones de esta ecuación cuando la energía E toma valores positivos, para diferentes potenciales de interés que involucra interacciones puntuales.

2.3. Condiciones de frontera para un potencial tipo delta de Dirac

Consideremos la ecuación de Schrödinger unidimensional estacionaria libre de unidades ($\hbar^2 = 1 = 2m$)

$$-\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + q_s(x) u(x) = Eu(x), \quad x \in \mathbb{R}, \quad (2.3.1)$$

donde q_s representa un potencial singular con soporte puntual, es decir, un soporte con medida de Lebesgue cero, y E corresponde a la energía del sistema. Supongamos que el potencial singular tiene soporte en el punto $x = h_0$, y que está definido por la distribución de Dirac

$$q_s(x) = \alpha \delta(x - h_0), \quad \alpha > 0, \quad (2.3.2)$$

donde α representa la intensidad del potencial. Este potencial establece ciertas condiciones en la frontera en el punto $x = h_0$ sobre las soluciones de la ecuación (2.3.1), que pueden obtenerse al integrar la ecuación de Schrödinger en una vecindad $(h_0 - \varepsilon, h_0 + \varepsilon)$ del punto h_0 , como sigue

$$-\int_{h_0-\varepsilon}^{h_0+\varepsilon} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} dx + \alpha \int_{h_0-\varepsilon}^{h_0+\varepsilon} \delta(x - h_0) u(x) dx = E \int_{h_0-\varepsilon}^{h_0+\varepsilon} u(x) dx.$$

Al realizar la integración se llega a

$$-\left. \frac{du(x)}{dx} \right|_{h_0-\varepsilon}^{h_0+\varepsilon} + \alpha u(h_0) = E \int_{h_0-\varepsilon}^{h_0+\varepsilon} u(x) dx. \quad (2.3.3)$$

En el límite conforme $\varepsilon \rightarrow 0$ la integral del lado derecho se anula a condición de que u sea una función continua en $x = h_0$. En efecto, si u es continua en el intervalo abierto $(h_0 - \varepsilon, h_0 + \varepsilon)$ entonces

$$E \int_{h_0 - \varepsilon}^{h_0 + \varepsilon} u(x) dx = 2E\varepsilon \sup_{x \in (h_0 - \varepsilon, h_0 + \varepsilon)} u(x) \rightarrow 0, \quad \varepsilon \rightarrow 0.$$

Por lo tanto, la ecuación (2.3.3) se reduce a

$$-u'(h_0^+) + u'(h_0^-) + \alpha u(h_0) = 0, \quad (2.3.4)$$

que representa un salto en la derivada de magnitud $\alpha u(h_0)$. La condición de continuidad en h_0 se expresa matemáticamente como

$$u(h_0^-) - u(h_0^+) = 0. \quad (2.3.5)$$

Las condiciones puntuales obtenidas se pueden expresar en forma matricial como sigue

$$\begin{bmatrix} u(h_0^+) \\ u'(h_0^+) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \alpha & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u(h_0^-) \\ u'(h_0^-) \end{bmatrix}. \quad (2.3.6)$$

2.4. Una extensión del operador de Schrödinger con interacciones puntuales

En la Subsección 2.3 se obtuvieron las condiciones en la frontera para un potencial singular tipo delta de Dirac a partir de la integración de la ecuación de Schrödinger en una vecindad que rodeaba a la singularidad. Sin embargo, este procedimiento no permite obtener las condiciones en la frontera asociadas con un potencial como $q_s(x) = \beta\delta'(x)$. De hecho, para tales potenciales, se puede demostrar a partir de otros argumentos que las soluciones de la ecuación de Schrödinger son discontinuas, pero sus derivadas son continuas. Por lo tanto, necesitamos trabajar en el sentido de las distribuciones con funciones que pueden ser discontinuas y calcular sus derivadas hasta de segundo orden. Para esto necesitamos establecer una extensión del operador de Schrödinger que permita trabajar con funciones discontinuas. Consideremos el operador formal unidimensional de Schrödinger

$$\mathcal{S}_0 u(x) := \left(-\frac{d^2}{dx^2} + q_0(x) + q_s(x) \right) u(x), \quad x \in \mathbb{R},$$

donde $q_0 \in L^\infty(\mathbb{R})$ es un potencial regular y q_s es un potencial singular representado por una distribución de primer orden $\mathcal{D}'(\mathbb{R})$ con soporte en el punto 0, es decir

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

Definimos la acción del potencial q_s sobre las funciones u como

$$q_s u = \alpha u(0)\delta(x) - \beta u'(0)\delta'(x)$$

Un dominio $\text{Dom}(\mathcal{S}_0)$ del operador \mathcal{S}_0 como un operador no-acotado en $L^2(\mathbb{R})$ debe ser tal que si $u \in L^2(\mathbb{R})$ entonces $\mathcal{S}_0 u \in L^2(\mathbb{R})$. Esta condición se cumple si $u \in C_0^\infty(\mathbb{R} \setminus \{0\}) = \{u \in C_0^\infty(\mathbb{R}) : \text{supp } u \in \mathbb{R} \setminus \{0\}\}$, pero no se cumple para toda u . Por lo que tenemos que considerar una extensión del operador \mathcal{S}_0 en algún conjunto de funciones discontinuas en 0. Sea

$$D_0(\mathbb{R}) := C_0^\infty(\overline{\mathbb{R}_+}) \oplus C_0^\infty(\overline{\mathbb{R}_-})$$

el espacio de funciones discontinuas en 0 cuyas restricciones en $\overline{\mathbb{R}_+}$ y en $\overline{\mathbb{R}_-}$ son continuamente diferenciables, donde $\mathbb{R}_\pm := \{x \in \mathbb{R} : x \gtrless 0\}$.

Para determinar la acción del operador \mathcal{S}_0 sobre funciones que pertenecen a $D_0(\mathbb{R})$ necesitamos calcular las derivas ahí indicadas en el sentido de las distribuciones, y considerar una continuación de las distribuciones δ y δ' sobre funciones en $D_0(\mathbb{R})$ como sigue

$$\begin{aligned}\tilde{\delta}(u) &:= \frac{1}{2}(u(0^+) + u(0^-)), \\ \tilde{\delta}'(u) &:= -\frac{1}{2}(u'(0^+) + u'(0^-)).\end{aligned}$$

Se puede ver que si $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ entonces $\tilde{\delta}(\varphi) = \delta(\varphi)$ y además $\tilde{\delta}'(\varphi) = \delta'(\varphi)$. Sea $u \in D_0(\mathbb{R})$, entonces

$$-\frac{d^2}{dx^2}u(x) = -\{u''\} - [u']_0 \delta - [u]_0 \delta'$$

donde $\{u''\}$ denota la derivada clásica de segundo orden donde existe y

$$\begin{aligned}[u]_0 &:= u(0^+) - u(0^-), \\ [u']_0 &:= u'(0^+) - u'(0^-),\end{aligned}$$

representan los saltos de u y u' en 0, respectivamente. Para el potencial singular q_s actuando sobre funciones $u \in D_0(\mathbb{R})$ llegamos a las siguientes expresiones

$$q_s u = \alpha \delta(u) + \beta \delta'(u) = \frac{\alpha}{2}[u(0^+) + u(0^-)] \delta - \frac{\beta}{2}[u'(0^+) + u'(0^-)] \delta'.$$

Por lo tanto al agrupar términos se obtiene lo siguiente

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_0 u(x) &= -\{u''\} + q_0(x)u(x) \\ &\quad + \left(-[u'(0^+) - u'(0^-)] + \frac{\alpha}{2}[u(0^+) + u(0^-)]\right) \delta \\ &\quad + \left(-[u(0^+) - u(0^-)] - \frac{\beta}{2}[u'(0^+) + u'(0^-)]\right) \delta'.\end{aligned}$$

Para que $\mathcal{S}_0 u(x) \in L^2(\mathbb{R})$ se necesita que ambas ecuaciones

$$\begin{aligned}-[u'(0^+) - u'(0^-)] + \frac{\alpha}{2}[u(0^+) + u(0^-)] &= 0, \\ -[u(0^+) - u(0^-)] - \frac{\beta}{2}[u'(0^+) + u'(0^-)] &= 0\end{aligned}$$

se satisfagan simultáneamente. Estas ecuaciones establecen una relación entre $u(0^+)$ y $u(0^-)$ y sus respectivas derivadas que puede expresarse en forma matricial como

$$\begin{bmatrix} u(0^+) \\ u'(0^+) \end{bmatrix} = A_0 \begin{bmatrix} u(0^-) \\ u'(0^-) \end{bmatrix}, \quad (2.4.1)$$

donde A_0 es una matriz de 2×2 definida como

$$A_0 = \frac{1}{1 + \frac{\alpha\beta}{4}} \begin{bmatrix} \left(1 - \frac{\alpha\beta}{4}\right) & -\beta \\ \alpha & \left(1 - \frac{\alpha\beta}{4}\right) \end{bmatrix}.$$

De esta forma el operador no acotado asociado con \mathcal{S}_0 se define a partir del operador

$$\mathcal{H}_0 u(x) := \left(-\frac{d^2}{dx^2} + q_0(x)\right)u(x), \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{0\},$$

y de las condiciones en la frontera (2.4.1), las cuales definen el comportamiento de las soluciones en el punto singular 0.

Si el potencial singular q_s consiste sólo de la delta de Dirac (es decir, $\beta = 0$) entonces las condiciones en la frontera en el punto 0 toman la forma

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

las cuales coinciden con (2.3.6). Por otra parte, si el potencial singular q_s consiste sólo de la derivada de la delta de Dirac (es decir, $\alpha = 0$) entonces las condiciones en la frontera en el punto 0 toman la forma

$$\begin{bmatrix} u(0^+) \\ u'(0^+) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -\beta \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u(0^-) \\ u'(0^-) \end{bmatrix}.$$

Estas condiciones establecen la discontinuidad de la función en el punto 0, pero la continuidad de su derivada.

También se puede introducir un potencial singular \tilde{q}_s definido por funciones discontinuas $u \in D_0(\mathbb{R})$ como

$$\tilde{q}_s = \alpha \tilde{\delta}u + \beta \tilde{\delta}'u, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R}.$$

donde $\tilde{\delta}u$ y $\tilde{\delta}'u$ son distribuciones en \mathcal{D}' definidas sobre funciones de prueba $\varphi \in \mathcal{D}$ como

$$\begin{aligned} (\tilde{\delta}u)(\varphi) &= \tilde{\delta}(u\varphi) := \frac{1}{2} (u(0^+) + u(0^-)) \varphi(0), \\ (\tilde{\delta}'u)(\varphi) &= \tilde{\delta}'(u\varphi) = -\tilde{\delta}((u\varphi)') := -\frac{1}{2} (u(0^+) + u(0^-)) \varphi'(0) - \frac{1}{2} (u'(0^+) + u'(0^-)) \varphi(0). \end{aligned}$$

de modo que la acción de este potencial en el operador se expresa como

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_0 u(x) &= -\{u''\} + q_0 \\ &\quad + \left(-[u'(0^+) - u'(0^-)] + \frac{\alpha}{2} [u(0^+) + u(0^-)] \right) \delta \\ &\quad + \left(-[u(0^+) - u(0^-)] - \frac{\beta}{2} [u'(0^+) + u'(0^-)] \right) \delta'. \end{aligned}$$

Entonces se puede verificar que $\mathcal{S}_0 u(x) \in L^2(\mathbb{R})$ para una función $u \in D_0(\mathbb{R})$ si y sólo si se cumple las condiciones en la frontera (2.4.1) con una matriz A_0 definida de la forma

$$A_0 = \begin{bmatrix} \frac{2+\beta}{2-\beta} & 0 \\ \frac{4\alpha}{4-\beta^2} & \frac{2-\beta}{2+\beta} \end{bmatrix}, \quad \beta^2 \neq 4.$$

Las propiedades del potencial regular q_0 así como de la matriz A_0 determinan si el operador no acotado \mathcal{H}_0 asociado con \mathcal{S}_0 es auto-adjunto, como lo expresa el siguiente resultado.

Teorema 1 ([1]). *Sea $q \in L^\infty(\mathbb{R})$ una función real-valuada, la matriz $A_0 = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix}$ real y $\det A_0 = 1$. Entonces el operador \mathcal{H}_0 con dominio*

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

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

Tener un operador auto-adjunto da como resultado que su espectro sea real. Por otra parte, las soluciones u de la ecuación de Schrödinger \mathcal{S}_0 que pertenecen al dominio $\text{Dom}(\mathcal{H}_0)$ satisfacen las siguientes condiciones asintóticas en el infinito

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} u(x) = 0. \tag{2.4.2}$$

2.5. Condiciones en la frontera para potenciales singulares con múltiples singularidades

Con base en la descripción anterior, las condiciones en la frontera para un potencial singular con soporte puntual lejos del origen, digamos en $x = h_0$, se pueden escribir en forma análoga como

$$\begin{bmatrix} u(h_0^+) \\ u'(h_0^+) \end{bmatrix} = A_0 \begin{bmatrix} u(h_0^-) \\ u'(h_0^-) \end{bmatrix}, \quad (2.5.1)$$

donde A_0 es una matriz no singular definida como

$$A_0 = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix}.$$

Las entradas de la matriz A_0 dependen de los coeficientes α y β de la combinación lineal de distribuciones tipo delta de Dirac y de la derivada de la delta de Dirac que definen al potencial singular q_s .

Así mismo, es posible considerar un potencial singular con más de una interacción puntual localizadas en los puntos $x = h_1, \dots, h_N$, cada una definida por condiciones en la frontera expresadas en forma matricial como

$$\begin{bmatrix} u(h_j^+) \\ u'(h_j^+) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_{11}^{(j)} & \alpha_{12}^{(j)} \\ \alpha_{21}^{(j)} & \alpha_{22}^{(j)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u(h_j^-) \\ u'(h_j^-) \end{bmatrix} = A_j \begin{bmatrix} u(h_j^-) \\ u'(h_j^-) \end{bmatrix}, \quad j = 1, \dots, N,$$

donde A_j es una matriz no singular asociada con la j -ésima interacción. El resultado del Teorema 1 permanece válido para tales potenciales, donde el operador no acotado asociado con la ecuación de Schrödinger se denota como $\mathcal{H}_{\{A_1, \dots, A_N\}}$, con dominio definido como

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

Las soluciones de la ecuación de Schrödinger (2.3.1) que pertenecen a $\text{Dom}(\mathcal{H}_{\{A_1, \dots, A_N\}})$ también satisfacen las condiciones asintóticas en el infinito

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} u(x) = 0. \quad (2.5.2)$$

2.6. Operadores de Schrödinger unidimensionales con interacciones puntuales auto-adjuntos

En esta Subsección se presenta una prueba del Teorema 1 que se enuncia en la Subsección 2.4, el cual describe las condiciones para que el operador de Schrödinger sea auto-adjunto cuando se consideran interacciones puntuales. Nosotros lo probamos a partir del cálculo del operador adjunto y de las condiciones en la frontera adjuntas en el espacio del Hilbert L^2 . Se demuestra bajo qué condiciones ambas condiciones en la frontera de ambos operadores describen la misma variedad lineal, y se obtiene que esas condiciones coinciden con $\det A_0 = 1$ tal como lo exige el teorema.

Sin perder generalidad asumamos que el potencial regular se anula idénticamente en \mathbb{R} , es decir, $q_r \equiv 0$. Consideremos el operador no acotado

$$\mathcal{H}u(x) := -\frac{d^2u(x)}{dx^2}, \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{0\},$$

el cual actúa sobre funciones que pertenecen al espacio de Sobolev $H^2(\mathbb{R} \setminus \{0\})$ las cuales satisfacen las condiciones (2.5.1), que se pueden describir como un sistema de ecuaciones

$$u(0^+) = \alpha_{11}u(0^-) + \alpha_{12}u'(0^-), \quad (2.6.1a)$$

$$u'(0^+) = \alpha_{21}u(0^-) + \alpha_{22}u'(0^-). \quad (2.6.1b)$$

Estas condiciones están asociadas con el potencial singular $q_s(x)$ en el punto $h_0 = 0$. Nos interesa determinar el operador adjunto de \mathcal{H} . Para esto realicemos el producto interno

$$(\mathcal{H}u, v) = \left(-\frac{d^2u(x)}{dx^2}, v(x) \right) = - \int_{-\infty}^{0^-} \frac{d^2u(x)}{dx^2} \overline{v(x)} dx - \int_{0^+}^{\infty} \frac{d^2u(x)}{dx^2} \overline{v(x)} dx.$$

Realizando la integración por partes, tenemos

$$(\mathcal{H}u, v) = J(u, v) + \int_{-\infty}^{\infty} u(x) \left(-\frac{d^2v(x)}{dx^2} \right) dx = J(u, v) + \int_{-\infty}^{\infty} u(x) \overline{\mathcal{H}^*v(x)} dx = (u, \mathcal{H}^*v),$$

donde los términos de frontera se agrupan como sigue

$$J(u, v) := -\overline{v(x)} \frac{du(x)}{dx} \Big|_{-\infty}^{0^-} - \overline{v(x)} \frac{du(x)}{dx} \Big|_{0^+}^{\infty} + \frac{d\overline{v(x)}}{dx} u(x) \Big|_{-\infty}^{0^-} + \frac{d\overline{v(x)}}{dx} u(x) \Big|_{0^+}^{\infty}.$$

Por lo tanto, el operador adjunto se identifica como

$$\mathcal{H}^*v(x) = -\frac{d^2v(x)}{dx^2} \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{0\}.$$

Para que el operador sea auto-adjunto se necesita que $(\mathcal{H}u, v) = (u, \mathcal{H}^*v)$, por lo que necesitamos que el término de frontera se anule. Este término se expresa de la siguiente manera

$$\begin{aligned} J(u, v) &:= -\overline{v(0^-)} u'(0^-) + \lim_{x \rightarrow -\infty} \overline{v(x)} u'(x) \\ &\quad - \lim_{x \rightarrow \infty} \overline{v(x)} u'(x) + \overline{v(0^+)} u'(0^+) \\ &\quad + \overline{v'(0^-)} u(0^-) - \lim_{x \rightarrow -\infty} \overline{v'(x)} u(x) \\ &\quad + \lim_{x \rightarrow \infty} \overline{v'(x)} u(x) - \overline{v'(0^+)} u(0^+). \end{aligned}$$

Considerando las condiciones asintóticas (2.5.2), resulta que

$$\begin{aligned} J(u, v) &:= -\overline{v(0^-)} u'(0^-) + \lim_{x \rightarrow -\infty} \overline{v(x)} u'(x) \\ &\quad - \lim_{x \rightarrow \infty} \overline{v(x)} u'(x) + \overline{v(0^+)} u'(0^+) \\ &\quad + \overline{v'(0^-)} u(0^-) - \overline{v'(0^+)} u(0^+). \end{aligned}$$

Para que los límites indicados se anulen se necesita que v satisfaga las condiciones asintóticas en el infinito

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} v(x) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} v(x) = 0.$$

Esto reduce el término de frontera como sigue

$$\begin{aligned} J(u, v) &:= -\overline{v(0^-)} u'(0^-) + \overline{v(0^+)} u'(0^+) \\ &\quad + \overline{v'(0^-)} u(0^-) - \overline{v'(0^+)} u(0^+). \end{aligned}$$

Ahora al considerar las condiciones en la frontera (2.6.1a) y (2.6.1b) se tiene

$$\begin{aligned} J(u, v) &= -\overline{v(0^-)} u'(0^-) + \overline{v(0^+)} (\alpha_{21} u(0^-) + \alpha_{22} u'(0^-)) \\ &\quad + \overline{v'(0^-)} u(0^-) - \overline{v'(0^+)} (\alpha_{11} u(0^-) + \alpha_{12} u'(0^-)) \\ &= u'(0^-) \left(-\overline{v(0^-)} + \alpha_{22} \overline{v(0^+)} - \alpha_{12} \overline{v'(0^+)} \right) \\ &\quad + u(0^-) \left(\alpha_{21} \overline{v(0^+)} + \overline{v'(0^-)} - \alpha_{11} \overline{v'(0^+)} \right). \end{aligned}$$

De esto se deduce que

$$-\overline{v(0^-)} + \alpha_{22}\overline{v(0^+)} - \alpha_{12}\overline{v'(0^+)} = 0, \quad \text{y} \quad \alpha_{21}\overline{v(0^+)} + \overline{v'(0^-)} - \alpha_{11}\overline{v'(0^+)} = 0,$$

lo cual conduce a las siguientes condiciones

$$\begin{bmatrix} v(h_0^+) \\ v'(h_0^+) \end{bmatrix} = \frac{A_0}{\det A_0} \begin{bmatrix} v(h_0^-) \\ v'(h_0^-) \end{bmatrix},$$

donde $A_0 = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix}$.

Estas condiciones coincidirán con las condiciones en la frontera que satisface u a condición de que $\det A_0 = 1$. Esto implica que el operador \mathcal{H} es auto-adjunto, más aun su espectro es real.

Capítulo 3

Ecuación de dispersión para sistemas cuánticos con potenciales singulares

En este capítulo vamos a considerar potenciales singulares en el ámbito de la ecuación de Schrödinger unidimensional y vamos a obtener la ecuación de dispersión para tales potenciales en los puntos de singularidad. Primero en la Subsección 3.1 consideramos un potencial tipo delta de Dirac y obtenemos la relación de dispersión, y en la Subsección 3.2 realizamos en mismo procedimiento pero para un potencial con dos deltas de Dirac localizadas en diferentes puntos. En las dos subsecciones anteriores se obtuvieron las relaciones de dispersión para potenciales singulares tipo deltas de Dirac, sin embargo este procedimiento no permite obtener la relación de dispersión para potenciales como $q_s(x) = \beta\delta'(x)$, por lo que en la Subsección 3.3 se elabora un método matricial para obtener la ecuación de dispersión para un punto de discontinuidad, lo cual me permite generalizar las condiciones en la frontera. En la Subsección 3.4 se elabora el método matricial para obtener la ecuación de dispersión pero para dos puntos de discontinuidad, finalmente en la Subsección 3.5 se generaliza el método matricial para n puntos de discontinuidad.

3.1. Ecuación de dispersión para potencial tipo delta de Dirac

Consideremos la ecuación de Schrödinger (2.3.1) con el potencial singular tipo delta de Dirac

$$V_s = -\alpha\delta(x - h_0), \quad \alpha > 0,$$

el cual establece las condiciones en la frontera (2.3.4) y (2.3.5) en el punto $x = h_0$. Nos interesa obtener la ecuación de dispersión del problema espectral, donde el parámetro de la energía de la ecuación de Schrödinger representa ahora el parámetro espectral.

Buscamos soluciones del problema que involucra eigenvalores

$$\mathcal{H}u(x) = Eu(x), \quad u(x) \in \text{Dom}(\mathcal{H})$$

donde $E = -k^2$, $k > 0$, es el parámetro espectral. Una solución general de la ecuación diferencial

$$-\frac{d^2u(x)}{dx^2} = -k^2u(x), \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{h_0\}$$

es

$$u(x) = \begin{cases} C_1 e^{k(x-h_0)} + D_1 e^{-k(x-h_0)}, & x \in (-\infty, h_0), \\ C_2 e^{k(x-h_0)} + D_2 e^{-k(x-h_0)}, & x \in (h_0, \infty), \end{cases}$$

donde C_1, D_1, C_2 y D_2 son coeficientes arbitrarios. Evaluemos las condiciones en la frontera (2.3.4)-(2.3.5).

Para la condición (2.3.4) en el punto cuando $x = h_0$ se tiene la siguiente relación

$$C_2 + D_2 = C_1 + D_1.$$

Con respecto a la condición (2.3.5) en el punto cuando $x = h_0$ se llega a la relación

$$C_2 - D_2 = C_1 \left(1 - \frac{\alpha}{k}\right) - D_1 \left(1 + \frac{\alpha}{k}\right).$$

Ahora tenemos un sistema lineal de dos ecuaciones. Resolviendo el sistema para C_2 y D_2 tenemos que

$$\begin{aligned} C_2 &= C_1 - \frac{\alpha(C_1 + D_1)}{2k}, \\ D_2 &= D_1 + \frac{\alpha(C_1 + D_1)}{2k}. \end{aligned}$$

La pertenencia de las soluciones en el espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R} \setminus \{h_0\})$ implica que se satisfagan las condiciones asintóticas (2.5.2). Para que la condición asintótica (2.5.2) se cumpla necesitamos que $D_1 = 0$ y $C_2 = 0$, lo cual conduce al sistema de ecuaciones siguiente

$$\begin{aligned} 0 &= C_1 - \frac{\alpha C_1}{2k}, \\ D_2 &= \frac{\alpha C_1}{2k}. \end{aligned} \tag{3.1.1}$$

De la ecuación (3.1.1) resulta una relación de dispersión que da el único valor permitido para el parámetro k

$$k = \frac{\alpha}{2},$$

el cual queda en términos de la intensidad α del potencial singular de la delta de Dirac.

Ejemplo 2. Consideremos el caso cuando $h_0 = 0$ y $\alpha = 1$, entonces la relación de dispersión para este problema es

$$k_0 = \frac{1}{2},$$

la cual define un único eigen-valor $E_0 = -k_0^2 = -1/4$, y la eigen-función correspondiente es

$$u_0(x) = \begin{cases} e^{x/2}, & x \in (-\infty, 0), \\ e^{-x/2}, & x \in (0, \infty). \end{cases}$$

La gráfica de la eigen-función se muestra en la Figura 3.1.1, correspondiente a un potencial con una delta de Dirac localizada en $x = 0$, por lo que si se le da un sentido de probabilidad en el ámbito de la mecánica cuántica, nos indicaría la probabilidad de encontrar a la partícula ante dicho potencial, se puede observar que donde existe mayor probabilidad de encontrar a la partícula es donde se encuentra la delta de Dirac.

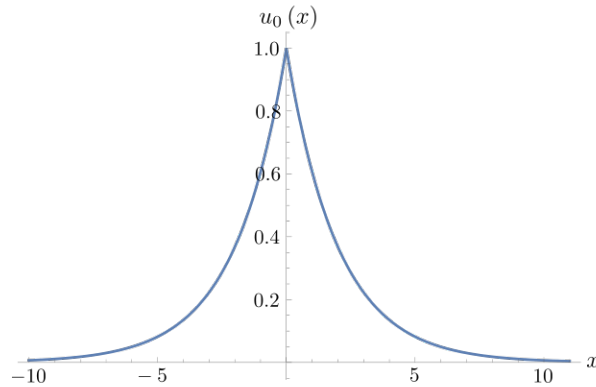


Figura 3.1.1. Gráfica de la eigen-función del Ejemplo 2 correspondiente a un potencial delta de Dirac con intensidad $\alpha = 1$.

3.2. Ecuación de dispersión para un potencial con dos deltas de Dirac

Consideremos el potencial singular con dos deltas de Dirac

$$V_s(x) = -\alpha_0\delta(x - h_0) - \alpha_1\delta(x - h_1), \quad \alpha_0, \alpha_1 > 0,$$

el cual introduce condiciones en la frontera en cada punto donde se ubican las deltas de Dirac. En el punto $x = h_0$ tenemos

$$u_-(h_0) = u_+(h_0); \quad (3.2.1a)$$

$$u'_+(h_0) - u'_-(h_0) = -\alpha_0 u(h_0); \quad (3.2.1b)$$

mientras que en el punto $x = h_1$ tenemos

$$u_-(h_1) = u_+(h_1); \quad (3.2.2a)$$

$$u'_+(h_1) - u'_-(h_1) = -\alpha_1 u(h_1); \quad (3.2.2b)$$

Seguimos buscando soluciones del problema que involucra eigenvalores en el espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R})$

$$\mathcal{H}u = Eu(x), \quad u \in \text{Dom}(\mathcal{H}),$$

donde $E = -k^2$, $k > 0$, es el parámetro espectral. La solución general de la ecuación diferencial

$$-\frac{d^2u(x)}{dx^2} = -k^2u(x), \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{h_0, h_1\}$$

es

$$u(x) = \begin{cases} C_1 e^{k(x-h_0)} + D_1 e^{-k(x-h_0)}, & x \in (-\infty, h_0), \\ C_2 e^{kx} + D_2 e^{-kx}, & x \in (h_0, h_1), \\ C_3 e^{k(x-h_1)} + D_3 e^{-k(x-h_1)}, & x \in (h_1, \infty), \end{cases}$$

donde $C_1, C_2, C_3, D_1, D_2, D_3$ son constantes arbitrarias. Evaluemos las condiciones en la frontera (3.2.1) y (3.2.2). Con respecto a la condición (3.2.1a) tenemos

$$C_1 + D_1 = C_2 e^{kh_0} + D_2 e^{-kh_0},$$

por otra parte la condición (3.2.1b) da lugar a

$$C_1 - D_1 = -\frac{\alpha_0 (C_2 e^{kh_0} + D_2 e^{-kh_0})}{k}.$$

Ahora consideremos la condición (3.2.2a) que produce

$$C_2 e^{kh_1} + D_2 e^{-kh_1} = C_3 + D_3,$$

mientras que la condición (3.2.2b) produce

$$C_2 e^{kh_1} - D_2 e^{-kh_1} = -\frac{\alpha_1}{k} (C_3 + D_3).$$

Las ecuaciones anteriores forman un sistema de cuatro ecuaciones lineales con seis incógnitas. Ahora resolvemos el sistema para calcular los coeficientes C_2, C_3, D_2, D_3 , en términos de C_1 y D_1 , lo cual da las siguientes relaciones

$$\begin{aligned}
 C_2 &= \left(C_1 - \frac{\alpha_0 (C_1 + D_1)}{2k} \right) e^{-kh_0} \\
 D_2 &= \left(D_1 + \frac{\alpha_0 (C_1 + D_1)}{2k} \right) e^{kh_0} \\
 D_3 &= C_2 \left(\frac{\alpha_1 e^{kh_1}}{2k} \right) + D_2 \left(1 + \frac{\alpha_1}{2k} \right) e^{-kh_1} \\
 C_3 &= C_2 \left(1 - \frac{\alpha_1}{2k} \right) e^{kh_1} + D_2 \left(-\frac{\alpha_1}{2k} \right) e^{-kh_1}
 \end{aligned}$$

de modo que consideramos las condiciones asintóticas en el infinito (2.5.2) implican que $C_3 = D_1 = 0$. La condición $C_3 = 0$ da lugar a la ecuación

$$1 - \frac{\alpha_1}{2k} - \frac{\alpha_0}{2k} + \frac{\alpha_0 \alpha_1}{4k^2} - \frac{\alpha_0 \alpha_1}{4k^2} e^{2k(h_0 - h_1)} = 0$$

que relaciona los valores permitidos del parámetro k que establecen las condiciones de frontera del problema. Esta representa la ecuación de dispersión para el problema con el potencial propuesto. Al hacer manipulaciones algebraicas se llega a

$$1 - e^{2k(h_0 - h_1)} = -\frac{4k^2}{\alpha_0 \alpha_1} + \frac{2k}{\alpha_1} + \frac{2k}{\alpha_0}. \quad (3.2.3)$$

Esta es una ecuación trascendental que debe resolverse numéricamente. Para calcular los valores de k que satisfacen la ecuación, usamos las gráficas del lado derecho e izquierdo para obtener una estimación de los puntos de intersección entre las dos curvas, que representan ceros aproximados de la ecuación de dispersión, como se ve en la Figura 3.2.1. Esta estimación puede usarse en conjunto con la instrucción `FindRoot` de *Wolfram Mathematica* para obtener una mejor estimación del cero buscado hasta la precisión establecida en la instrucción.

Ejemplo 3. Consideremos el caso cuando $\alpha_0 = 1$, $\alpha_1 = 1$, y $h_1 - h_0 = 5$. En este caso la relación de dispersión es

$$1 - e^{10k} = -4k^2 + 4k.$$

La solución gráfica de este problema se muestra en la Figura 3.2.1 donde se observan dos intersecciones entre las curvas $1 - e^{10k}$ y $-4k^2 + 4k$. En este caso se obtienen dos ceros de la ecuación de dispersión, que son $k_0 = 0,534534$ y $k_1 = 0,446322$. Los eigen-valores correspondientes son $E_0 = -k_0^2 = -0,285726$, $E_1 = -k_1^2 = -0,199203$. Las eigen-funciones correspondientes son

$$u_0(x) = \begin{cases} e^{0,53453(x-5)} & x \in (-\infty, 0), \\ 0,06454e^{0,53453(x-5)} + 0,93545e^{-0,53453(x-5)}, & x \in (0, 5), \\ e^{-0,53453(x-5)}, & x \in (5, \infty), \end{cases}$$

$$u_1(x) = \begin{cases} e^{0,44632(x-5)} & x \in (-\infty, 0), \\ -0,12032e^{0,44632(x-5)} + 1,120267e^{-0,44632(x-5)}, & x \in (0, 5), \\ -e^{-0,44632(x-5)}, & x \in (5, \infty), \end{cases}$$

cuyas gráficas se muestran en las Figuras 3.2.2 y 3.2.3.

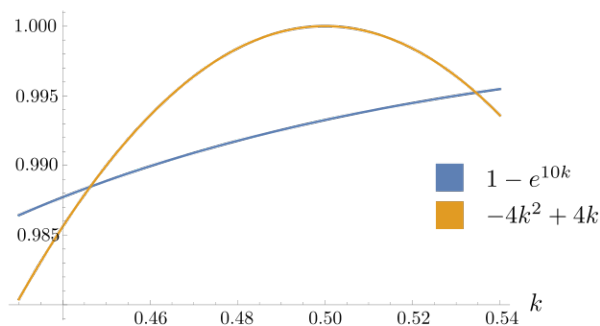


Figura 3.2.1. Solución numérica de la relación de dispersión para el problema del Ejemplo 3.

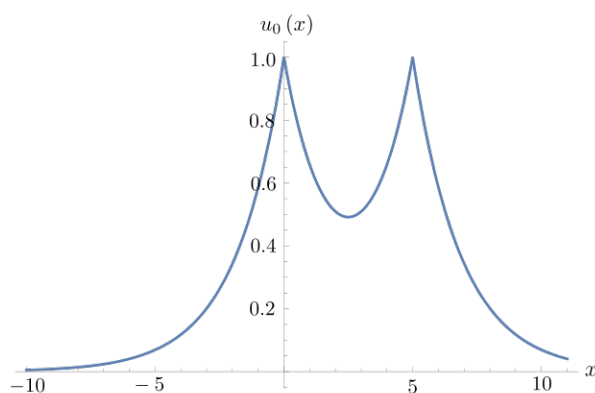


Figura 3.2.2. Gráfica de la eigenfunción del Ejemplo 3 correspondiente a $k_0 = 0,534534$.

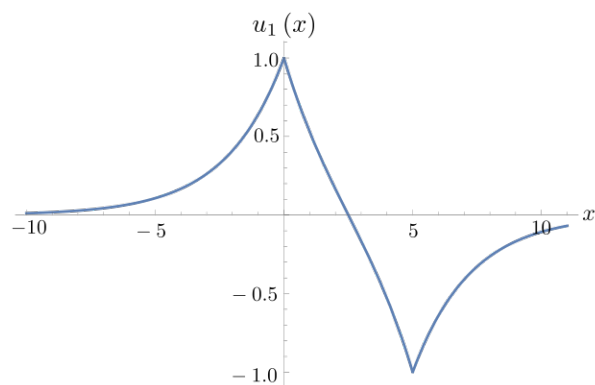


Figura 3.2.3. Gráfica de la eigenfunción correspondiente a $k_1 = 0,446322$.

3.3. Un método matricial para obtener la ecuación de dispersión para un punto de discontinuidad

Consideremos formalmente la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{d^2u(x)}{dx^2} + q_s(x)u(x) = Eu(x), \quad x \in \mathbb{R}, \quad (3.3.1)$$

donde E es el parámetro espectral. El potencial singular q_s involucra una interacción puntual definida por una distribución de primer orden con soporte en el punto $x = h_0$. El operador no acotado correspondiente a la ecuación formal de Schrödinger (3.3.1) es generado por la ecuación diferencial

$$-\frac{d^2u}{dx^2} = Eu, \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{h_0\},$$

y las condiciones en la frontera en el punto $x = h_0$ dadas por

$$\begin{bmatrix} u_2(h_0) \\ u'_2(h_0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1(h_0) \\ u'_1(h_0) \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} u_1(h_0) \\ u'_1(h_0) \end{bmatrix}, \quad (3.3.2)$$

donde u_1 es la restricción de la solución u de la ecuación de Schrödinger en el intervalo $(-\infty, h_0)$, y u_2 es la restricción de la solución u al intervalo (h_0, ∞) , y A es una matriz no-singular de 2×2 que representa a la interacción puntual. La forma de abordar un problema con una interacción puntual consiste en analizar las regiones $(-\infty, h_0)$, (h_0, ∞) de forma individual, y después aplicar las condiciones en la frontera a las soluciones resultantes. Donde el parámetro espectral $E = -k^2$, $k > 0$, se toma como real ya que el operador es auto-adjunto en $L^2(\mathbb{R})$. Al analizar esta ecuación se obtienen las soluciones generales en cada región

$$u(x) = \begin{cases} C_1 e^{kx} + C_2 e^{-kx}, & -\infty < x < h_0, \\ C_3 e^{kx} + C_4 e^{-kx}, & h_0 < x < \infty, \end{cases}$$

donde C_1, C_2, C_3, C_4 son coeficientes arbitrarios. Para evaluar las condiciones en la frontera necesitamos calcular las derivadas

$$u'(x) = \begin{cases} k(C_1 e^{kx} - C_2 e^{-kx}), & -\infty < x < h_0, \\ k(C_3 e^{kx} - C_4 e^{-kx}), & h_0 < x < \infty, \end{cases}$$

Al sustituir las soluciones generales y sus derivadas en las condiciones de frontera (3.3.2) tenemos

$$\begin{bmatrix} e^{kh_0} & e^{-kh_0} \\ ke^{kh_0} & -ke^{-kh_0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_3 \\ C_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{kh_0} & e^{-kh_0} \\ ke^{kh_0} & -ke^{-kh_0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix}$$

a partir de la cual se pueden expresar los coeficientes C_3, C_4 en términos de C_1, C_2 como sigue

$$\begin{bmatrix} C_3 \\ C_4 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} e^{-kh_0} & \frac{e^{-kh_0}}{k} \\ e^{kh_0} & -\frac{e^{kh_0}}{k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{kh_0} & e^{-kh_0} \\ ke^{kh_0} & -ke^{-kh_0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix}.$$

En la ecuación matricial anterior el producto matricial se simplifica de la siguiente manera. Al aplicar la ley distributiva de la multiplicación se calcula el producto de las matrices internas

$$\begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{kh_0} & e^{-kh_0} \\ ke^{kh_0} & -ke^{-kh_0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_{11}e^{kh_0} + \alpha_{12}ke^{kh_0} & \alpha_{11}e^{-kh_0} + \alpha_{12}ke^{-kh_0} \\ \alpha_{21}e^{kh_0} + \alpha_{22}ke^{kh_0} & \alpha_{21}e^{-kh_0} + \alpha_{22}ke^{-kh_0} \end{bmatrix}.$$

De esta manera tenemos

$$\begin{bmatrix} C_3 \\ C_4 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} e^{-kh_0} & \frac{e^{-kh_0}}{k} \\ e^{kh_0} & -\frac{e^{kh_0}}{k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 (\alpha_{11}e^{kh_0} + \alpha_{12}ke^{kh_0}) + C_2 (\alpha_{11}e^{-kh_0} + \alpha_{12}ke^{-kh_0}) \\ C_1 (\alpha_{21}e^{kh_0} + \alpha_{22}ke^{kh_0}) + C_2 (\alpha_{21}e^{-kh_0} + \alpha_{22}ke^{-kh_0}) \end{bmatrix}$$

En este problema se tienen que satisfacer las condiciones asintóticas (2.5.2) en el infinito. Estas condiciones implican que C_2 y C_3 se anulen. Al tomar $C_2 = 0$ la ecuación anterior se reduce

$$\begin{bmatrix} C_3 \\ C_4 \end{bmatrix} = \frac{C_1}{2} \begin{bmatrix} e^{-kh_0} & \frac{e^{-kh_0}}{k} \\ e^{kh_0} & -\frac{e^{kh_0}}{k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{11}e^{kh_0} + \alpha_{12}ke^{kh_0} \\ \alpha_{21}e^{kh_0} + \alpha_{22}ke^{kh_0} \end{bmatrix}.$$

Por otra parte al tomar $C_3 = 0$ se llega a la ecuación de dispersión

$$(\alpha_{11} + \alpha_{12}k) + \frac{(\alpha_{21} + \alpha_{22}k)}{k} = 0,$$

y se obtiene el coeficiente C_4

$$C_4 = \frac{1}{2k}$$

donde C_1 toma el papel de un parámetro libre

Ejemplo 4. Consideremos un problema que involucre una interacción puntual caracterizada por la matriz A definida por

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

la cual corresponde a una delta de Dirac de intensidad $\alpha < 0$. Sea $\alpha = -1$ de modo que la ecuación de dispersión toma la siguiente forma.

$$1 + \frac{-1 + k}{k} = 0,$$

cuyo único cero es $k_0 = 1/2$. Éste define un único eigen-valor $E_0 = -k_0^2 = -1/4$, y la eigen-función correspondiente es

$$u_0(x) = \begin{cases} e^{x/2}, & x \in (-\infty, 0), \\ e^{-x/2}, & x \in (0, \infty). \end{cases}$$

La gráfica de la eigen-función se muestra en la Figura 3.3.1.

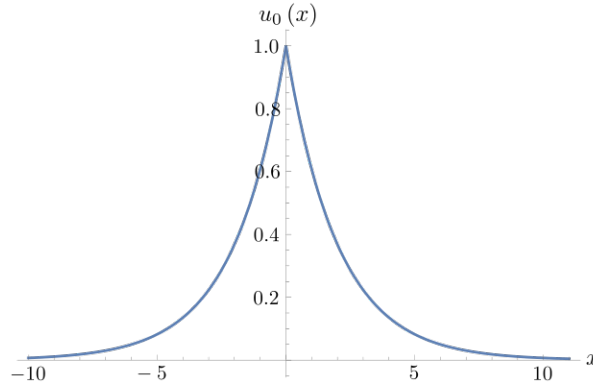


Figura 3.3.1. Gráfica de la eigen-función del Ejemplo 4 correspondiente a un potencial delta de Dirac con intensidad $\alpha = -1$.

3.4. Un método matricial para obtener la ecuación de dispersión para dos puntos de discontinuidad

Consideremos la ecuación de Schrödinger (2.3.1) y un potencial formado por dos discontinuidades cada una con soporte puntual en $x = h_0$ y $x = h_1$. Buscamos encontrar a partir de un enfoque matricial los eigenvalores y las eigenfunciones que se establecen por este potencial.

Las condiciones en la frontera en $x = h_0$ y $x = h_1$ se especifican por las matrices

$$\begin{bmatrix} u_2(h_0) \\ u_2'(h_0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1(h_0) \\ u_1'(h_0) \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} u_1(h_0) \\ u_1'(h_0) \end{bmatrix}, \quad \alpha_{i,j} \in \mathbb{R},$$

$$\begin{bmatrix} u_3(h_1) \\ u_3'(h_1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_2(h_1) \\ u_2'(h_1) \end{bmatrix} = B \begin{bmatrix} u_2(h_1) \\ u_2'(h_1) \end{bmatrix} \quad \beta_{i,j} \in \mathbb{R},$$

donde u_1, u_2 y u_3 son las soluciones de la ecuación de Schrödinger en las regiones de $(-\infty, h_0)$, (h_0, h_1) y (h_1, ∞) , respectivamente. Las soluciones generales de la ecuación de Schrödinger que se establecen en las tres regiones mencionadas son

$$\begin{aligned} u_1(x) &= C_1 e^{kx} + C_2 e^{-kx}, \quad -\infty < x < h_0, \\ u_2(x) &= C_3 e^{kx} + C_4 e^{-kx}, \quad h_0 < x < h_1, \\ u_3(x) &= C_5 e^{kx} + C_6 e^{-kx}, \quad h_1 < x < \infty, \end{aligned}$$

donde C_1, \dots, C_6 son coeficientes arbitrarios. Para evaluar estos coeficientes es necesario realizar las operaciones indicadas en las condiciones de frontera. Realizando las derivadas de las soluciones se tiene que

$$\begin{aligned} u'_1(x) &= k(C_1 e^{kx} - C_2 e^{-kx}), \\ u'_2(x) &= k(C_3 e^{kx} - C_4 e^{-kx}), \\ u'_3(x) &= k(C_5 e^{kx} - C_6 e^{-kx}). \end{aligned}$$

Al sustituir en las condiciones en la frontera para el punto h_0 se obtiene la siguiente ecuación matricial

$$\begin{bmatrix} C_3 e^{kh_0} + C_4 e^{-kh_0} \\ k(C_3 e^{kh_0} - C_4 e^{-kh_0}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 e^{kh_0} + C_2 e^{-kh_0} \\ k(C_1 e^{kh_0} - C_2 e^{-kh_0}) \end{bmatrix}.$$

De igual manera, al sustituir en las condiciones en la frontera para el punto h_1 se obtiene

$$\begin{bmatrix} C_5 e^{kh_1} + C_6 e^{-kh_1} \\ k(C_5 e^{kh_1} - C_6 e^{-kh_1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_3 e^{kh_1} + C_4 e^{-kh_1} \\ k(C_3 e^{kh_1} - C_4 e^{-kh_1}) \end{bmatrix}.$$

Ambas ecuaciones matriciales se pueden expresar como

$$\begin{bmatrix} e^{kh_0} & e^{-kh_0} \\ ke^{kh_0} & -ke^{-kh_0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_3 \\ C_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{kh_0} & e^{-kh_0} \\ ke^{kh_0} & -ke^{-kh_0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} e^{kh_1} & e^{-kh_1} \\ ke^{kh_1} & -ke^{-kh_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_5 \\ C_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{kh_1} & e^{-kh_1} \\ ke^{kh_1} & -ke^{-kh_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_3 \\ C_4 \end{bmatrix}.$$

Observe que estas ecuaciones matriciales se encuentran acopladas entre sí. Al aplicar las condiciones asintóticas en el infinito (2.5.2), resulta que $C_2 = 0$, $C_5 = 0$. Esto conduce a las siguientes ecuaciones matriciales

$$\begin{bmatrix} C_3 \\ C_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{kh_0} & e^{-kh_0} \\ ke^{kh_0} & -ke^{-kh_0} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{kh_0} & e^{-kh_0} \\ ke^{kh_0} & -ke^{-kh_0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 0 \\ C_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{kh_1} & e^{-kh_1} \\ ke^{kh_1} & -ke^{-kh_1} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{kh_1} & e^{-kh_1} \\ ke^{kh_1} & -ke^{-kh_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_3 \\ C_4 \end{bmatrix}$$

que al acoplarlas entre sí, realizar las operaciones matriciales indicadas, e igualar entradas matriciales correspondientes dan lugar a la ecuación de dispersión del problema ante dos puntos de discontinuidad

$$\frac{e^{2k(h_1-h_2)} a(k) b(k) + c(k) d(k)}{4k^2} = 0, \quad k \neq 0,$$

donde los coeficientes se definen como

$$\begin{aligned} a(k) &:= \alpha_{21} - k(\alpha_{11} - \alpha_{22} + \alpha_{12}k), \\ b(k) &:= -\beta_{21} + k(-\beta_{11} + \beta_{22} + \beta_{12}k), \\ c(k) &:= \alpha_{21} + k(\alpha_{11} + \alpha_{22} + \alpha_{12}k), \\ d(k) &:= \beta_{21} + k(+\beta_{11} + \beta_{22} + \beta_{12}k). \end{aligned}$$

Ejemplo 5. Consideremos el potencial singular

$$V_s(x) = \alpha\delta(x - h_0) + \beta\delta(x - h_1)$$

compuesto por dos deltas de Dirac atractivas de intensidades $\alpha < 0$ y $\beta < 0$, que establecen condiciones en la frontera en los puntos h_0 y h_1 que se especifican por las siguientes matrices de coeficientes

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \alpha & 1 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \beta & 1 \end{bmatrix}.$$

Supongamos que $h_1 = 0$, $h_2 = 5$ y que $\alpha = -1$, $\beta = -1$. En este caso se llega a la relación de dispersión

$$\frac{1 - e^{-10k} - 4k + 4k^2}{4k^2} = 0.$$

Esta es una ecuación trascendente la cual puede resolverse a partir de un método numérico. Para este ejemplo las soluciones son $k_0 = 0,534534$ y $k_1 = 0,446322$ de modo que los respectivos eigenvalores para este sistema son $E_0 = -k_0^2 = -0,285726$ y $E_1 = -k_1^2 = -0,199203$. La gráfica para la primera eigenfunción u_0 correspondiente al estado base del sistema cuántico se muestra en la Figura 3.4.1, mientras que la gráfica para la segunda eigenfunción u_1 se muestra en la Figura 3.4.2. Esta eigenfunción corresponde al primer estado excitado del sistema cuántico. Las eigen-funciones correspondientes son

$$u_0(x) = \begin{cases} e^{0,53453(x-5)}, & x \in (-\infty, 0), \\ 0,06454e^{0,53453(x-5)} + 0,93545e^{-0,53453(x-5)}, & x \in (0, 5), \\ e^{-0,53453(x-5)}, & x \in (5, \infty), \end{cases}$$

$$u_1(x) = \begin{cases} e^{0,44632(x-5)}, & x \in (-\infty, 0), \\ -0,12032e^{0,44632(x-5)} + 1,120267e^{-0,44632(x-5)}, & x \in (0, 5), \\ -e^{-0,44632(x-5)}, & x \in (5, \infty), \end{cases}$$

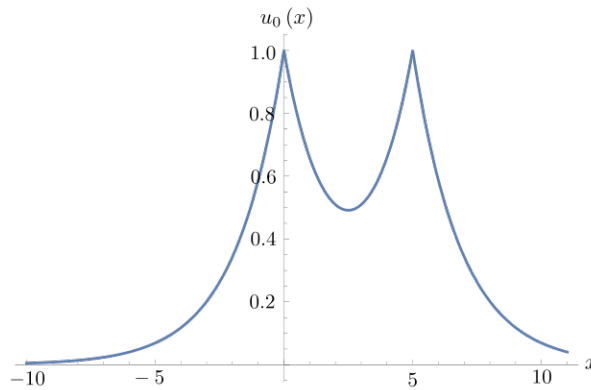


Figura 3.4.1. Gráfica de la primera eigenfunción del Ejemplo 5, correspondiente a $k_0 = 0,534534$.

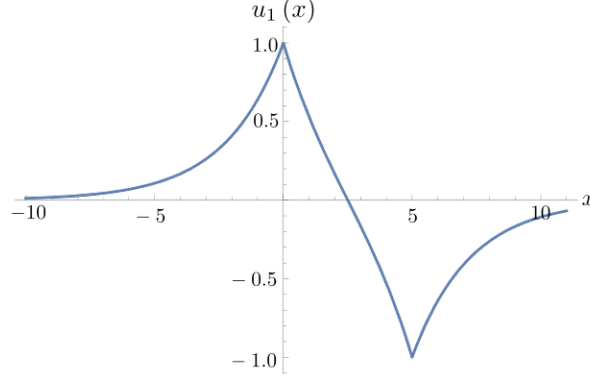


Figura 3.4.2. Gráfica de la segunda eigenfunción del Ejemplo 5, correspondiente a $k_1 = 0,446322$.

3.5. Un método matricial para obtener la ecuación de dispersión para n puntos de discontinuidad

Ahora consideramos la ecuación (2.3.1) con un potencial formado por n discontinuidades con soporte puntual localizadas en los puntos h_1, h_2, \dots, h_n . Entonces las condiciones en la frontera que se establecen en los puntos de discontinuidad se expresan como

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} u_{n+1}(h_n) \\ u'_{n+1}(h_n) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} \\ \gamma_{21} & \gamma_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_n(h_n) \\ u'_n(h_n) \end{bmatrix} = N \begin{bmatrix} u_n(h_n) \\ u'_n(h_n) \end{bmatrix}, \quad \gamma_{ij} \in \mathbb{R}, \\ &\vdots \\ \begin{bmatrix} u_3(h_2) \\ u'_3(h_2) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_2(h_2) \\ u'_2(h_2) \end{bmatrix} = B \begin{bmatrix} u_2(h_2) \\ u'_2(h_2) \end{bmatrix} \quad \beta_{ij} \in \mathbb{R}, \\ \begin{bmatrix} u_2(h_1) \\ u'_2(h_1) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1(h_1) \\ u'_1(h_1) \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} u_1(h_1) \\ u'_1(h_1) \end{bmatrix} \quad \alpha_{ij} \in \mathbb{R}. \end{aligned}$$

Las soluciones de la ecuación de Schrödinger, además de cumplir con las condiciones puntuales también tienen que cumplir con las condiciones asintóticas en el infinito (2.5.2). Las soluciones generales en cada región de la ecuación de Schrödinger con $E = -k^2$ toman la forma

$$\begin{aligned} u_1(x) &= C_1 e^{kx} + D_1 e^{-kx}, \quad -\infty < x < h_1 \\ u_2(x) &= C_2 e^{kx} + D_2 e^{-kx}, \quad h_1 < x < h_2 \\ &\vdots \\ u_n(x) &= C_n e^{kx} + D_n e^{-kx}, \quad h_{n-1} < x < h_n \\ u_{n+1}(x) &= C_{n+1} e^{kx} + D_{n+1} e^{-kx}, \quad h_n < x < \infty \end{aligned}$$

donde C_i, D_i , $i = 1, 2, \dots, n+1$ son coeficientes arbitrarios. Al evaluar las condiciones en la frontera para los puntos h_1, h_2, \dots, h_n resultan las ecuaciones matriciales

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} C_{n+1} \\ D_{n+1} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} e^{kh_n} & e^{-kh_n} \\ ke^{kh_n} & -ke^{-kh_n} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} \\ \gamma_{21} & \gamma_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{kh_n} & e^{-kh_n} \\ ke^{kh_n} & -ke^{-kh_n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_n \\ D_n \end{bmatrix} \\ &\vdots \\ \begin{bmatrix} C_3 \\ D_3 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} e^{kh_2} & e^{-kh_2} \\ ke^{kh_2} & -ke^{-kh_2} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{kh_2} & e^{-kh_2} \\ ke^{kh_2} & -ke^{-kh_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_2 \\ D_2 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} C_2 \\ D_2 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} e^{kh_1} & e^{-kh_1} \\ ke^{kh_1} & -ke^{-kh_1} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{kh_1} & e^{-kh_1} \\ ke^{kh_1} & -ke^{-kh_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ D_1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

las cuales están acopladas entre sí. Es posible obtener una ecuación matricial que exprese a C_{n+1} y D_{n+1} en términos de C_1 y D_1 , lo cual puede hacerse de forma recursiva. Esto implicaría desarrollar los productos matriciales indicados de forma consecutiva (y posiblemente de forma recursiva) hasta obtener una ecuación matricial resultante. Este proceso podría hacerse de forma simbólica o numéricamente con algún software como Wolfram Mathematica. Por otra parte, si el número de discontinuidades es contable infinito, es posible realizar estimaciones asintóticas de las entradas de las matrices a partir de las técnicas usuales del análisis asintótico. Evidentemente, tal producto matricial no es desarrollado en este trabajo pero las ideas para calcularlo se plantea en estas líneas. A la ecuación matricial resultante se le aplican las condiciones asintóticas en el infinito lo cual implica que $D_1 = 0$ y $C_{n+1} = 0$ con lo cual es posible obtener la relación de dispersión del problema que define los valores de energía permitidos en el sistema cuántico.

Capítulo 4

Coeficientes de transmisión y reflexión para los estados de dispersión ante potenciales con singularidades

En este capítulo vamos a considerar potenciales singulares en el ámbito de la ecuación de Schrödinger unidimensional y vamos a obtener los coeficientes de transmisión y reflexión para tales potenciales en los puntos de singularidad. Primero en la Subsección 4.1 consideramos un potencial con una singularidad y obtenemos los coeficientes de transmisión y reflexión mediante el método matricial, y en la Subsección 4.2 mediante el mismo método matricial obtenemos los coeficientes de transmisión y reflexión pero para un potencial con dos singularidades localizadas en diferentes puntos, finalmente en la Subsección 4.3 se obtienen los coeficientes de transmisión y reflexión para n puntos de discontinuidad.

4.1. Coeficientes de transmisión y reflexión para un potencial con un punto singular

Consideremos la ecuación de Schrödinger (2.3.1) estacionaria con un potencial con soporte puntual en el punto $x = h_1$. De este potencial resultan las siguientes ecuaciones diferenciales

$$\begin{aligned} -\frac{d^2 u_1(x)}{dx^2} &= E u_1(x), \quad x < h_1, \\ -\frac{d^2 u_2(x)}{dx^2} &= E u_2(x), \quad x > h_1, \end{aligned}$$

donde $E \in \mathbb{R}$ es un parámetro que representa la energía de la partícula cuántica, y u_1, u_2 son las restricciones de la solución u en los intervalos $(-\infty, 0)$ y $(0, \infty)$, respectivamente. Se consideran ahora los estados de dispersión y se busca obtener los coeficientes de transmisión y reflexión de una onda cuántica interactuando con un potencial de este tipo. Los estados de dispersión corresponden a $E > 0$, por lo que las ecuaciones anteriores tienen soluciones generales de la forma

$$\begin{aligned} u_1 &= C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}, \quad x < h_1, \\ u_2 &= C_3 e^{ikx} + C_4 e^{-ikx}, \quad x > h_1, \end{aligned}$$

donde C_1, \dots, C_4 son coeficientes arbitrarios y $k^2 = E$. Físicamente las soluciones exponenciales e^{ikx} representan ondas que se propagan de izquierda a derecha, mientras que las soluciones exponenciales e^{-ikx} representan ondas que se propagan en sentido contrario. En efecto, si se considera la dependencia en el tiempo con la frecuencia ω las soluciones anteriores toman la forma

$$e^{\pm ikx} e^{-i\omega t} = e^{\pm i(kx \mp \omega t)},$$

donde la fase $\phi = kx \mp \omega t$ representa planos en el sistema de coordenadas (x, y, z) que se mueven en direcciones opuestas conforme aumenta el tiempo, con la velocidad de fase uniforme $c = \omega/k$.

Como se vio anteriormente un potencial singular V con soporte puntual en $x = 0$ establece las siguientes condiciones de frontera

$$\begin{bmatrix} u_2(h_1) \\ u_2'(h_1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1(h_1) \\ u_1'(h_1) \end{bmatrix},$$

donde los coeficientes $\alpha_{ij} \in \mathbb{R}$ se definen a partir del potencial V especificado. Ahora usaremos la representación matricial general de las condiciones en la frontera para el cálculo de los coeficientes de reflexión y transmisión de los estados de dispersión para obtener expresiones generales que sean validas para potenciales de interés.

Sustituyendo las soluciones generales se llega a la ecuación matricial

$$\begin{bmatrix} C_3 e^{ikx} + C_4 e^{-ikx} \\ ik(C_3 e^{ikx} - C_4 e^{-ikx}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx} \\ ik(C_1 e^{ikx} - C_2 e^{-ikx}) \end{bmatrix}.$$

Supongamos que existe una fuente de ondas cuánticas (por ejemplo, generadas por partículas cuánticas masivas) localizada en $x \rightarrow -\infty$, de modo que C_1 representa la amplitud de la onda incidente proveniente de la izquierda y $C_2 = R$ representa la amplitud de la onda refleja por el potencial V . Por otra parte $C_3 = T$ representa la amplitud de la onda transmitida. Bajo el supuesto de que existe una única fuente de partículas, el coeficiente C_4 debe anularse (esto es debido a que tal coeficiente representaría la amplitud de una onda incidente proveniente de una fuente localizada en $x \rightarrow \infty$). Supongamos que $C_1 = 1$ de modo que las amplitudes R y T debe satisfacer la condición $|R|^2 + |T|^2 = 1$. Al suponer que $h_1 = 0$ y realizando operaciones matriciales se llega a la siguiente relación matricial

$$\begin{bmatrix} T \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\alpha_{11}}{2} - \frac{\alpha_{21}}{2k} + i\left(\frac{\alpha_{12}}{2} - \frac{i\alpha_{22}}{2k}\right)k + \left(\frac{\alpha_{11}}{2} - \frac{i\alpha_{21}}{2k} - i\left(\frac{\alpha_{12}}{2} - \frac{i\alpha_{22}}{2k}\right)k\right)R \\ \frac{\alpha_{11}}{2} + \frac{\alpha_{21}}{2k} + i\left(\frac{\alpha_{12}}{2} + \frac{i\alpha_{22}}{2k}\right)k + \left(\frac{\alpha_{11}}{2} + \frac{i\alpha_{21}}{2k} - i\left(\frac{\alpha_{12}}{2} + \frac{i\alpha_{22}}{2k}\right)k\right)R \end{bmatrix}.$$

Que permite obtener expresiones para R y T en función de $k = E$

$$T = -\frac{2i(\alpha_{12}\alpha_{21} - \alpha_{11}\alpha_{22})k}{-\alpha_{21} + i(\alpha_{11} + \alpha_{22})k + \alpha_{12}k^2},$$

$$R = \frac{-i\alpha_{21} + k(-\alpha_{11} + \alpha_{22} - i\alpha_{12}k)}{i\alpha_{21} + k(\alpha_{11} + \alpha_{22} - i\alpha_{12}k)}.$$

Observación 6. Observe que los valores de k que están involucrados en las amplitudes de las ondas transmitida y reflejada carecen de unidades ya que la descripción hecha del proceso ondulatorio se derivó de una ecuación de Schrödinger libre de unidades. No obstante es posible dotar a los resultados de las unidades. Consideremos la ecuación de Schrödinger con unidades para una particular libre

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) = Eu(x)$$

esta ecuación se puede escribir como

$$-\frac{d^2}{dx^2} u(x) = \tilde{k}^2 u(x)$$

donde se ha definido $\tilde{k}^2 := 2mE/\hbar^2$, es decir $\tilde{k} = \sqrt{2mE}/\hbar$. Las soluciones linealmente independientes de esta ecuación son $e^{\pm i\tilde{k}x}$, que representan ondas que se propagan en direcciones opuestas. Considere ahora la ecuación de Schrödinger libre de unidades para el mismo caso

$$-\frac{d^2}{dx^2} u(x) = k^2 u(x)$$

cuyas soluciones son $e^{\pm ikx}$, donde $k^2 = E$ es el parámetro de energía. Se puede ver que en ambos casos las soluciones son esencialmente iguales tomando en cuenta que si se requieren las unidades se tiene que usar \tilde{k} en lugar de $k = \sqrt{E}$. Por lo tanto la aparición de k en los resultados anteriores deberá sustituirse por \tilde{k} , la cual ya involucra unidades, en el caso de que éstas sean necesarias.

Ejemplo 7. Consideremos un caso particular que consiste de un potencial tipo delta especificado por

$$V(x) = \alpha\delta(x), \quad \alpha > 0.$$

La matriz que representa las condiciones en la frontera para este potencial es

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

Al sustituir los valores $\alpha_{11} = 1$, $\alpha_{12} = 0$, $\alpha_{21} = \alpha$, $\alpha_{22} = 1$ en las expresiones de los coeficientes de reflexión y transmisión se llega a las siguientes formulas

$$T = \frac{2ik}{-\alpha + 2ik}, \quad R = \frac{\alpha}{-\alpha + 2ik}.$$

Las gráficas de los módulos al cuadrado de estos coeficientes se muestran en la figura 4.1.1. Ahí se observa que conforme la partícula es más energética atraviesa el potencial con mayor probabilidad. No obstante existe un valor de energía $k_0^2 = E_0$ en el cual es igualmente probable que se transmita la partícula o que se refleje. Este valor se obtiene de igualar los coeficientes de transmisión y reflexión, es decir $|T(k_0)|^2 = |R(k_0)|^2$, con lo cual resulta $k_0 = \alpha/2$.

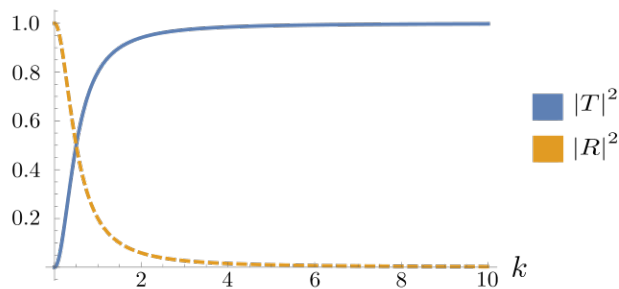


Figura 4.1.1. Gráficas de $|T(k)|^2$ y $|R(k)|^2$ para el potencial delta de Dirac del Ejemplo 7 localizado en $x = 0$.

4.2. Coeficientes de transmisión y reflexión para un potencial con dos puntos singulares

Consideremos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (2.3.1) con un potencial singular con dos discontinuidades en los puntos $x = h_1$ y $x = h_2$. De este potencial resultan las siguientes ecuaciones de Schrödinger para partículas libres fuera de las regiones de interacción puntuales

$$\begin{aligned} -\frac{d^2u_1(x)}{dx^2} &= Eu_1(x), & x < h_1, \\ -\frac{d^2u_2(x)}{dx^2} &= Eu_2(x), & h_1 < x < h_2, \\ -\frac{d^2u_3(x)}{dx^2} &= Eu_3(x), & x > h_2, \end{aligned}$$

donde u_1 , u_2 y u_3 son las restricciones de la solución u en los intervalos $(-\infty, h_1)$, (h_1, h_2) y (h_2, ∞) respectivamente. Se busca obtener los coeficientes de transmisión y reflexión de una onda cuántica interactuando con este potencial. Consideremos $E > 0$, por lo que las ecuaciones anteriores tienen soluciones generales de la forma

$$\begin{aligned} u_1 &= C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}, & x < h_1, \\ u_2 &= C_3 e^{ikx} + C_4 e^{-ikx}, & h_1 < x < h_2, \\ u_3 &= C_5 e^{ikx} + C_6 e^{-ikx}, & x > h_2, \end{aligned}$$

donde C_1, \dots, C_6 , son coeficientes arbitrarios. El potencial singular V establece las siguientes condiciones en el punto $x = h_1$ y $x = h_2$

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} u_2(h_1^+) \\ u_2'(h_1^+) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1(h_1^-) \\ u_1'(h_1^-) \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} u_1(h_1^-) \\ u_1'(h_1^-) \end{bmatrix}, & \alpha_{ij} \in \mathbb{R}, \\ \begin{bmatrix} u_3(h_2^+) \\ u_3'(h_2^+) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_2(h_2^-) \\ u_2'(h_2^-) \end{bmatrix} = B \begin{bmatrix} u_2(h_2^-) \\ u_2'(h_2^-) \end{bmatrix}, & \beta_{ij} \in \mathbb{R}. \end{aligned}$$

Al sustituir las soluciones generales anteriores en las condiciones en la frontera se tiene que

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} C_3 e^{ikh_1} + C_4 e^{-ikh_1} \\ ik(C_3 e^{ikh_1} - C_4 e^{-ikh_1}) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 e^{ikh_1} + C_2 e^{-ikh_1} \\ ik(C_1 e^{ikh_1} - C_2 e^{-ikh_1}) \end{bmatrix}, \\ \begin{bmatrix} C_5 e^{ikh_2} + C_6 e^{-ikh_2} \\ ik(C_5 e^{ikh_2} - C_6 e^{-ikh_2}) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_3 e^{ikh_2} + C_4 e^{-ikh_2} \\ ik(C_3 e^{ikh_2} - C_4 e^{-ikh_2}) \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Tomando las mismas consideraciones físicas que en el caso del potencial anterior con una discontinuidad, es decir, $C_1 = 1$ y $C_6 = 0$ lo cual físicamente indica que existe una única fuente de partículas a la izquierda de la discontinuidad en $x = h_1$, se tiene

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} T \\ 0 \end{bmatrix} &= \frac{1}{2k} \begin{bmatrix} -i\beta_{21} + k(\beta_{22} + i\beta_{12}k + \beta_{11}) & -e^{-2ikh_2}(i\beta_{21} + k(\beta_{22} + i\beta_{12}k - \beta_{11})) \\ e^{2ikh_2}(i\beta_{21} - k(\beta_{22} - i\beta_{12}k - \beta_{11})) & i\beta_{21} + k(\beta_{22} - i\beta_{12}k + \beta_{11}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_3 \\ C_4 \end{bmatrix}, \\ \begin{bmatrix} C_3 \\ C_4 \end{bmatrix} &= \frac{1}{2k} \begin{bmatrix} -i\alpha_{21} + k(\alpha_{22} + i\alpha_{12}k + \alpha_{11}) & -e^{-2ikh_1}(i\alpha_{21} + k(\alpha_{22} + i\alpha_{12}k - \alpha_{11})) \\ e^{2ikh_1}(i\alpha_{21} - k(\alpha_{22} - i\alpha_{12}k - \alpha_{11})) & i\alpha_{21} + k(\alpha_{22} - i\alpha_{12}k + \alpha_{11}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ R \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Al acoplar estas ecuaciones matriciales, tenemos expresiones generales para los coeficientes de transmisión y reflexión para un potencial singular con dos discontinuidades.

$$\begin{aligned} T(k) &= -\frac{4(\alpha_{12}\alpha_{21} - \alpha_{11}\alpha_{22})(\beta_{12}\beta_{21} - \beta_{11}\beta_{22})e^{2ikh_1}k^2}{k(\alpha_{22}\Gamma + k^2\alpha_{12}\Phi) + i(\alpha_{21}\Gamma + k\alpha_{11}\Phi)}, \\ R(k) &= \frac{k(\alpha_{22}\Gamma + k^2\alpha_{12}\Phi) - i(\alpha_{21}\Gamma + k\alpha_{11}\Phi)e^{2ikh_1}}{k(\alpha_{22}\Gamma + k^2\alpha_{12}\Phi) + i(\alpha_{21}\Gamma + k\alpha_{11}\Phi)}, \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned} \Gamma(k) &= -i\beta_{21}\mu - k(\beta_{11}\mu + \eta(\beta_{22} - i\beta_{12}k)), \\ \Phi(k) &= -i\beta_{21}\eta + ik(\beta_{11}\eta + \mu(\beta_{22} - i\beta_{12}k)), \end{aligned}$$

y las funciones η, μ , están definidas a partir de

$$\mu(k) = e^{2ikh_1} - e^{2ikh_2}, \quad \eta(k) = e^{2ikh_1} + e^{2ikh_2}.$$

Ejemplo 8. Consideremos un potencial con dos deltas de Dirac de intensidades unitarias

$$V(x) = \delta(x - h_1) + \delta(x - h_2).$$

Un potencial de este tipo establece las condiciones en la frontera de la forma (2.3.6). Con estos parámetros en la Figura 4.2.1 se muestra los módulos al cuadrado de las amplitudes de las ondas transmita y reflejada de este ejemplo. Se pueden observar una serie de picos en el coeficiente de transmisión que corresponden a las energías de transparencia de este potencial. Es decir, si un paquete de ondas tiene componentes de energía con estos valores particulares, entonces el potencial será transparente ante estas componentes y no habrá onda reflejada.

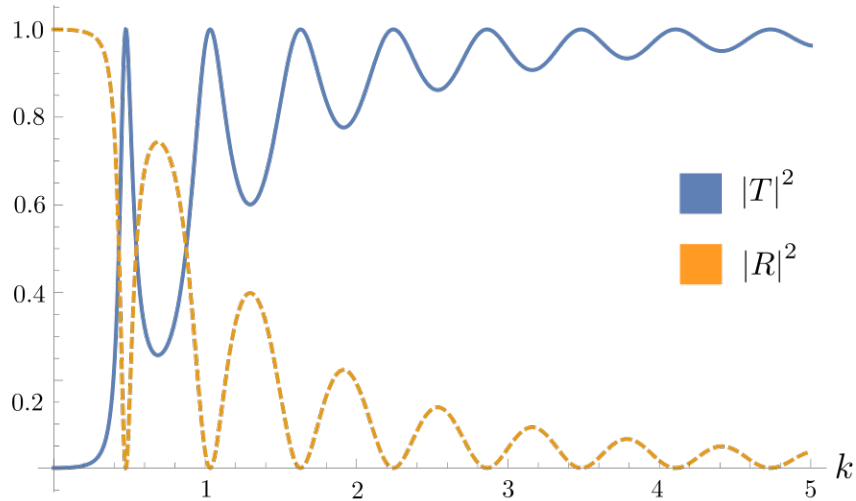


Figura 4.2.1. Gráficas de $|T(k)|^2$ y $|R(k)|^2$ para el potencial del Ejemplo 8 con $h_1 = 0$ y $h_2 = 5$.

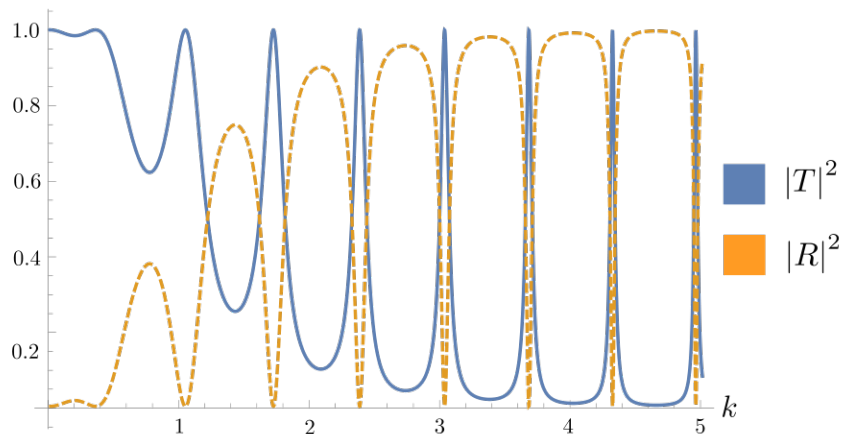


Figura 4.2.2. Gráficas de $|T(k)|^2$ y $|R(k)|^2$ para el potencial del Ejemplo 9 $h_1 = 0$ y $h_2 = 5$.

Ejemplo 9. Consideremos un potencial con dos singularidades en los puntos h_1 y h_2 como se muestra a continuación

$$V(x) = \delta'(x - h_1) + \delta'(x - h_2).$$

Un potencial de este tipo establece las condiciones en la frontera de la forma (2.3.6). Con estos parámetros en la Figura 4.2.2 se muestra los módulos al cuadrado de las amplitudes de las ondas transmitida y reflejada de este ejemplo. Se pueden observar una serie de picos en el coeficiente de transmisión que corresponden a las energías de transparencia de este potencial. Es decir, si un paquete de ondas tiene componentes de energía con estos valores particulares, entonces el potencial será transparente ante estas componentes y no habrá onda reflejada.

Ejemplo 10. Consideremos un potencial con dos singularidades en los puntos h_1 y h_2 como se muestra a continuación

$$V(x) = \delta(x - h_1) + \delta'(x - h_2).$$

Un potencial de este tipo establece las condiciones en la frontera de la forma (2.3.6). Con estos parámetros en la Figura 4.2.3 se muestra los módulos al cuadrado de las amplitudes de las ondas transmitida y reflejada

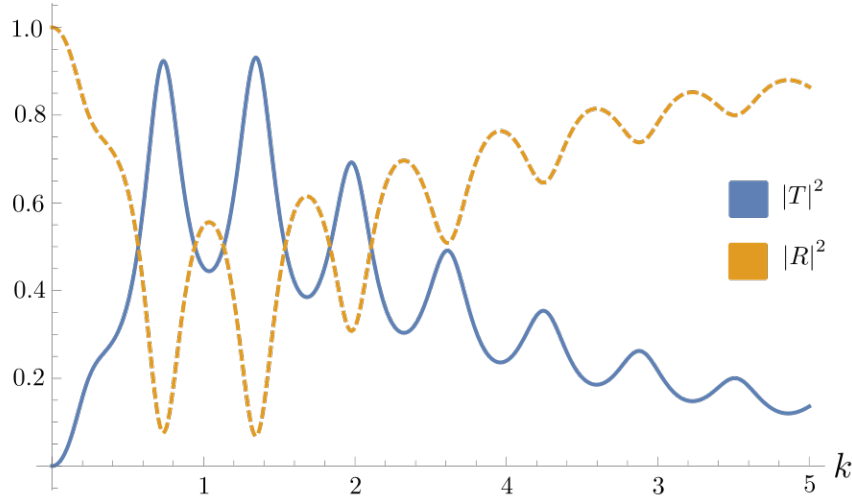


Figura 4.2.3. Gráfica de $|T(k)|^2$ y $|R(k)|^2$ para el potencial del Ejemplo 10 con $h_1 = 0$ y $h_2 = 5$.

de este ejemplo. Se pueden observar que ante este potencial existen dos picos en el coeficiente de transmisión, en los cuales toma su mayor amplitud y conforme aumenta el parámetro de la energía la onda comienza a ser reflejada por el potencial.

4.3. Coeficientes de transmisión y reflexión para un potencial con n puntos singulares

Consideremos la ecuación (2.3.1) con un potencial con n singularidades puntuales y consideremos las condiciones generales de frontera en su forma matricial. Esto da lugar al siguiente sistema de ecuaciones matriciales.

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} C_2 e^{ikh_1} + D_2 e^{-ikh_1} \\ ik(C_2 e^{ikh_1} - D_2 e^{-ikh_1}) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 e^{ikh_1} + D_1 e^{-ikh_1} \\ ik(C_1 e^{ikh_1} - D_1 e^{-ikh_1}) \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} C_3 e^{ikh_2} + D_3 e^{-ikh_2} \\ ik(C_3 e^{ikh_2} - D_3 e^{-ikh_2}) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_2 e^{ikh_2} + D_2 e^{-ikh_2} \\ ik(C_2 e^{ikh_2} - D_2 e^{-ikh_2}) \end{bmatrix} \\ &\vdots \\ \begin{bmatrix} C_{(n+1)} e^{ikh_n} + D_{(n+1)} e^{-ikh_n} \\ ik(C_{(n+1)} e^{ikh_n} - D_{(n+1)} e^{-ikh_n}) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} \\ \gamma_{21} & \gamma_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_n e^{ikh_n} + D_n e^{-ikh_n} \\ ik(C_n e^{ikh_n} - D_n e^{-ikh_n}) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

donde C_i y D_i ($i = 1, 2, \dots, n+1$) son coeficientes arbitrarios. Al considerar que existe una única fuente de partículas en $x \rightarrow -\infty$ se obtienen las relaciones matriciales que al acoplarlas permiten obtener los coeficientes de reflexión y transmisión tal como se hizo en los casos anteriores.

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} T \\ 0 \end{bmatrix} &= \frac{1}{2k} \begin{bmatrix} -i\gamma_{21} + k(\gamma_{22} + i\gamma_{12}k + \gamma_{11}) & -e^{-2ikh_n}(i\gamma_{21} + k(\gamma_{22} + i\gamma_{12}k - \gamma_{11})) \\ e^{2ikh_n}(i\gamma_{21} - k(\gamma_{22} - i\gamma_{12}k - \gamma_{11})) & i\gamma_{21} + k(\gamma_{22} - i\gamma_{12}k + \gamma_{11}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D_n \\ C_n \end{bmatrix} \\ &\vdots \\ \begin{bmatrix} C_3 \\ D_3 \end{bmatrix} &= \frac{1}{2k} \begin{bmatrix} -i\beta_{21} + k(\beta_{22} + i\beta_{12}k + \beta_{11}) & -e^{-2ikh_2}(i\beta_{21} + k(\beta_{22} + i\beta_{12}k - \beta_{11})) \\ e^{2ikh_2}(i\beta_{21} - k(\beta_{22} - i\beta_{12}k - \beta_{11})) & i\beta_{21} + k(\beta_{22} - i\beta_{12}k + \beta_{11}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_2 \\ D_2 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} C_2 \\ D_2 \end{bmatrix} &= \frac{1}{2k} \begin{bmatrix} -i\alpha_{21} + k(\alpha_{22} + i\alpha_{12}k + \alpha_{11}) & -e^{-2ikh_1}(i\alpha_{21} + k(\alpha_{22} + i\alpha_{12}k - \alpha_{11})) \\ e^{2ikh_1}(i\alpha_{21} - k(\alpha_{22} - i\alpha_{12}k - \alpha_{11})) & i\alpha_{21} + k(\alpha_{22} - i\alpha_{12}k + \alpha_{11}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ R \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Por lo tanto, al realizar las operaciones matriciales indicadas que resultan de acoplar las ecuaciones anteriores, se llega a una ecuación matricial que permite calcular los coeficientes de transmisión y reflexión de forma explícita. Para este fin, conviene usar un procedimiento computacional recursivo que realice las operaciones matriciales indicadas. En este caso el coeficiente de transmisión también tendrá una serie de picos que representan las energías de transparencia del potencial. Las expresiones generales dependen de los potenciales especificados en cada caso.

Capítulo 5

Análisis de los estados de dispersión de un sistema con potencial de corto alcance e interacciones puntuales, usando matrices de monodromía

En el Capítulo 4 se analizó el problema de transmisión de una partícula cuántica interactuando con un potencial singular descrito por interacciones puntuales. Este problema consistió en analizar una partícula libre que interactuaba con los puntos singulares y la solución se obtuvo por medio del uso de las condiciones de frontera matriciales, lo cual dio como resultado una representación matricial recursiva que involucra los coeficientes de transmisión y de reflexión.

En este capítulo consideramos un problema ligeramente más general donde el potencial consiste de una parte regular con soporte compacto, así como de una singular la cual es descrita por múltiples interacciones puntuales. De esta manera, la partícula solo es libre fuera del soporte del potencial regular, y el problema consiste en describir la transmisión ante este potencial más general. Con este objetivo se hace uso de las matrices de monodromía para obtener una representación matricial de los coeficientes de transmisión y de reflexión y se emplea el método SPPS para el cálculo de las soluciones de la ecuación de Schrödinger cuando esta involucra únicamente el potencial regular.

En la Subsección 5.1 se analiza un potencial que consiste de dos interacciones puntuales y un potencial regular entre éstas y se obtienen los coeficientes de transmisión y reflexión mediante un método matricial y el método SPPS. Posteriormente, en la Subsección 5.2 se generaliza el problema y se consideran múltiples interacciones puntuales mediante otro enfoque matricial basado en el cálculo de matrices de monodromía. En la Subsección 5.3 se aplica el método SPPS para el cálculo de soluciones del problema de transmisión a través de un potencial regular de corto alcance y se calculan explícitamente las entradas de las matrices de monodromía y en la Subsección 5.4 se analiza la implementación computacional del método desarrollado.

5.1. Potencial de corto alcance con dos interacciones puntuales

Consideremos el operador formal de Schrödinger, unidimensional, estacionario, libre de unidades ($\hbar^2 = 1 = 2m$)

$$Su(x) = -\frac{d^2u(x)}{dx^2} + q(x)u(x), \quad -\infty < x < \infty \quad (5.1.1)$$

con el siguiente potencial

$$q(x) = q_s(x) + q_0(x).$$

compuesto por una parte regular denotada por q_0 , el cual es un potencial acotado con soporte compacto $\text{supp } q_0 = (x_1, x_2)$ y una parte singular q_s que incluye dos interacciones puntuales en los extremos del

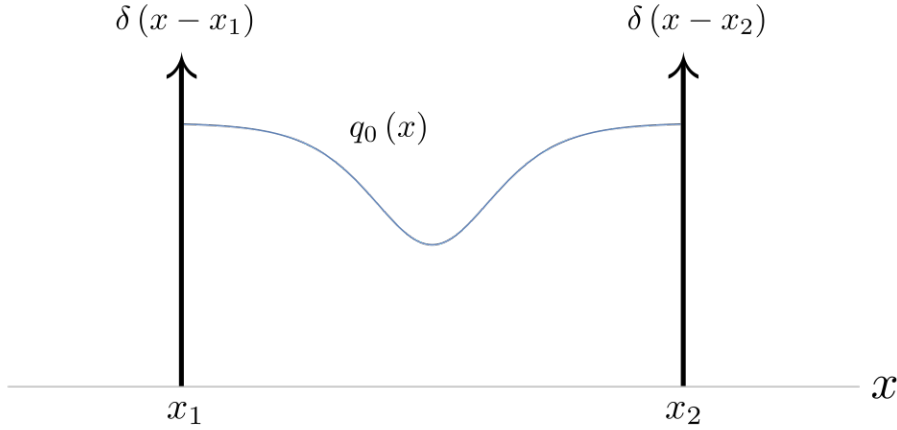


Figura 5.1.1. Representación gráfica de dos interacciones tipo delta de Dirac en los extremos del potencial regular q_0 . De forma similar, otras interacciones estarían localizadas en los puntos x_1 y x_2 .

potencial regular, como se muestra en la Figura 5.1.1. El potencial q_0 se asume como real-valuado.

Asociado al operador S se tiene un operador no-acotado

$$\mathcal{H}u(x) = -\frac{d^2u(x)}{dx^2} + q_0(x)u(x), \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{x_1, x_2\},$$

además de las siguientes condiciones en los puntos $x = x_1$ y $x = x_2$ dadas por las ecuaciones matriciales

$$\begin{bmatrix} u_{\text{II}}(x_1^+) \\ u'_{\text{II}}(x_1^+) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{\text{I}}(x_1^-) \\ u'_{\text{I}}(x_1^-) \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} u_{\text{I}}(x_1^-) \\ u'_{\text{I}}(x_1^-) \end{bmatrix}, \quad \alpha_{ij} \in \mathbb{R}, \quad (5.1.2)$$

$$\begin{bmatrix} u_{\text{III}}(x_2^+) \\ u'_{\text{III}}(x_2^+) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{\text{II}}(x_2^-) \\ u'_{\text{II}}(x_2^-) \end{bmatrix} = B \begin{bmatrix} u_{\text{II}}(x_2^-) \\ u'_{\text{II}}(x_2^-) \end{bmatrix}, \quad \beta_{ij} \in \mathbb{R}, \quad (5.1.3)$$

las cuales son establecidas por las interacciones puntuales en $x = x_1$ y $x = x_2$. Las matrices A y B son matrices reales que satisfacen las propiedades $\det A = 1$ y $\det B = 1$. En las expresiones anteriores denotamos por u_{I} , u_{II} y u_{III} a las restricciones de la solución u de la ecuación diferencial en los intervalos $(-\infty, x_1)$, (x_1, x_2) y (x_2, ∞) , respectivamente.

Consideremos la ecuación que involucra eigen-valores

$$\mathcal{H}u(x) = Eu(x), \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{x_1, x_2\}, \quad (5.1.4)$$

donde $E \in \mathbb{R}$ es un parámetro que representa la energía de la partícula cuántica descrita por el Hamiltoniano \mathcal{H} , y u que representa la función de onda satisface las condiciones puntuales (5.1.2) y (5.1.3). De esta ecuación resultan las siguientes ecuaciones diferenciales

$$\begin{aligned} -\frac{d^2u_{\text{I}}(x)}{dx^2} &= Eu_{\text{I}}(x), & x < x_1, \\ -\frac{d^2u_{\text{II}}(x)}{dx^2} + q_0(x)u_{\text{II}}(x) &= Eu_{\text{II}}(x), & x_1 < x < x_2, \\ -\frac{d^2u_{\text{III}}(x)}{dx^2} &= Eu_{\text{III}}(x), & x > x_2. \end{aligned}$$

A continuación, se analizan los estados de dispersión de este sistema cuántico y se calculan los coeficientes de transmisión y reflexión de una onda cuántica interactuando con un potencial de este tipo.

Los estados de dispersión surgen cuando el parámetro de energía toma valores positivos. Sean u_1 y u_2 soluciones linealmente independientes de la ecuación (5.1.4) en el intervalo (x_1, x_2) . Si $E > 0$ entonces las soluciones generales $u_I(x)$, $u_{II}(x)$, $u_{III}(x)$ de las ecuaciones anteriores toman la forma

$$\begin{aligned} u_I &= a_1 e^{ik(x-x_1)} + b_1 e^{-ik(x-x_1)}, & x < x_1, \\ u_{II} &= a_2 u_1(x) + b_2 u_2(x), & x_1 < x < x_2, \\ u_{III} &= a_3 e^{ik(x-x_2)} + b_3 e^{-ik(x-x_2)}, & x > x_2, \end{aligned}$$

donde $k^2 = E$, $k > 0$, es un parámetro, y a_1, b_1, a_2, b_2, a_3 y b_3 son coeficientes arbitrarios. Las derivadas de estas soluciones están dadas por

$$\begin{aligned} u'_I(x) &= ik a_1 e^{ik(x-x_1)} - ik b_1 e^{-ik(x-x_1)}, & x < x_1, \\ u'_{II}(x) &= a_2 u'_1(x) + b_2 u'_2(x), & x_1 < x < x_2, \\ u'_{III}(x) &= ik a_3 e^{ik(x-x_2)} - ik b_3 e^{-ik(x-x_2)}, & x > x_2. \end{aligned}$$

Sustituyendo las expresiones anteriores en las condiciones puntuales (5.1.2) y (5.1.3) se tiene que

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} a_2 u_1(x_1) + b_2 u_2(x_1) \\ a_2 u'_1(x_1) + b_2 u'_2(x_1) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 + b_1 \\ ik a_1 - ik b_1 \end{bmatrix}, \\ \begin{bmatrix} a_3 + b_3 \\ ik a_3 - ik b_3 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_2 u_1(x_2) + b_2 u_2(x_2) \\ a_2 u'_1(x_2) + b_2 u'_2(x_2) \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Supongamos que u_1 y u_2 satisfacen las condiciones de Cauchy

$$u_1(x_1) = 1, \quad u_2(x_1) = 0, \tag{5.1.5a}$$

$$u'_1(x_1) = i, \quad u'_2(x_1) = -1. \tag{5.1.5b}$$

Observe que la imposición de estas condiciones parece más bien artificial, sin embargo estas condiciones resultan de manera natural cuando se emplea el método SPSS (ver Subsección 5.1.1) para determinar las soluciones u_1 y u_2 . Posteriormente retomaremos esta formulación matricial pero utilizando unas condiciones de Cauchy más naturales. Entonces las ecuaciones matriciales anteriores pueden escribirse como

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ i & -1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix}, \\ \begin{bmatrix} a_3 \\ b_3 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1(x_2) & u_2(x_2) \\ u'_1(x_2) & u'_2(x_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Estas ecuaciones pueden acoplarse entre sí de tal forma que los coeficientes a_3 y b_3 se expresan en términos de coeficiente a_1 y b_1 como sigue

$$\begin{bmatrix} a_3 \\ b_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1(x_2) & u_2(x_2) \\ u'_1(x_2) & u'_2(x_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ i & -1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix}.$$

Observación 11. Esta ecuación matricial representa una solución general de la ecuación de Schrödinger sometida a las condiciones en la frontera que establecen las interacciones puntuales. Esta solución es válida tanto para los estados ligados, como para los estados de dispersión. En el caso de los estados ligados uno debe considerar aquellas soluciones con energía negativa, es decir aquellos valores $k^2 = E < 0$, lo que implica que k se represente en la forma $k = i\kappa$, $\kappa > 0$. Bajo estas condiciones es posible encontrar la solución matricial que describe los estados ligados al sustituir en la ecuación anterior el parámetro k por $i\kappa$. Una vez hecho esto se tienen que invocar las condiciones asintóticas en el infinito con el objetivo de que las soluciones de la ecuación de Schrödinger que describen los estados con energía negativa pertenezcan al espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R} \setminus \{x_1, x_2\})$.

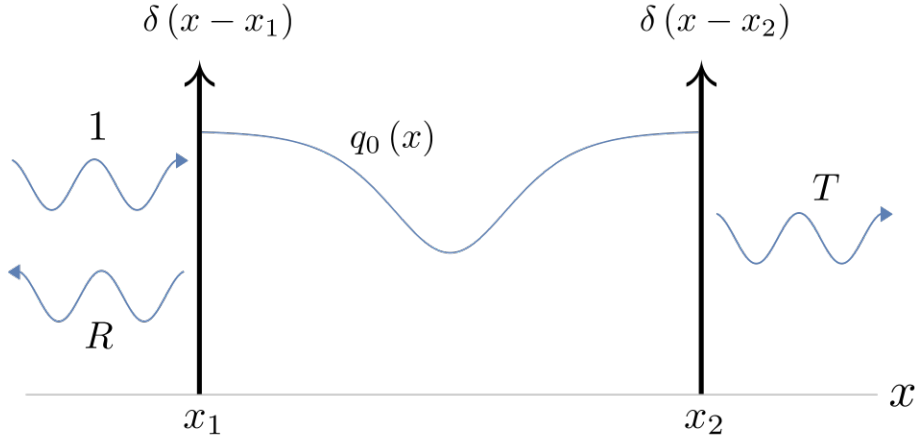


Figura 5.1.2. Representación de la onda incidente, reflejada y transmitida por un potencial con interacciones puntuales y un potencial regular.

Notamos que a_1 representa la amplitud de una onda incidente a la interacción localizada en x_1 proveniente de $-\infty$, mientras que b_1 representa la amplitud de una onda reflejada por esta interacción. De forma similar b_3 representa la amplitud de una onda incidente a la interacción localizada en x_2 proveniente de $+\infty$, mientras que a_3 representa la amplitud de una onda reflejada por esta interacción.

Supongamos que existe una única fuente de partículas localizada en $x \rightarrow -\infty$, de modo que a_1 representa la amplitud de la onda incidente y $b_1 = R$ representa la amplitud de la onda reflejada por la región de interacción, ver Figura 5.1.2. Por otra parte $a_3 = T$ representa la amplitud de la onda transmitida. En este caso, $b_3 = 0$ ya que no hay otra fuente de partículas a la derecha de la región de interacción. Tomando $a_1 = 1$, lo cual representa una amplitud unitaria para la onda incidente, se satisface la identidad $|R|^2 + |T|^2 = 1$.

En este caso la ecuación que describe el proceso ondulatorio es

$$\begin{bmatrix} T \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1(x_2) & u_1(x_2) \\ u'_1(x_2) & u'_2(x_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ i & -1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ R \end{bmatrix}.$$

Simplificando, la ecuación anterior se escribe como

$$\begin{bmatrix} T \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -\frac{i}{k} \\ 1 & \frac{i}{k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1(x_2) & u_1(x_2) \\ u'_1(x_2) & u'_2(x_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ i & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 + R \\ ik(1 - R) \end{bmatrix}. \quad (5.1.6)$$

Al realizar los productos matriciales y realizar la igualdad matricial correspondiente con el vector columna de la izquierda se obtienen expresiones para los coeficientes R y T como funciones del parámetro $k = \sqrt{E}$

$$T(k) = \frac{2k \det J}{(\Gamma + \Phi)(\alpha_{12} + i\alpha_{11}) - \Phi(\alpha_{21} - i\alpha_{22}k)}, \quad (5.1.7a)$$

$$R(k) = \frac{(\Gamma + \Phi)(\alpha_{12} - i\alpha_{11}) + \Phi(\alpha_{21} + i\alpha_{22}k)}{(\Gamma + \Phi)(\alpha_{12} + i\alpha_{11}) - \Phi(\alpha_{21} - i\alpha_{22}k)}, \quad (5.1.7b)$$

donde la matriz J se define como

$$J(k) = \begin{bmatrix} u_1(x_2; k) & u_2(x_2; k) \\ u'_1(x_2; k) & u'_2(x_2; k) \end{bmatrix}, \quad (5.1.8)$$

y las funciones Γ y Φ están definidas a partir

$$\Gamma(k) = u_1(x_2; k)(\beta_{21} - i\beta_{11}k) + u'_1(x_2; k)(\beta_{22} - i\beta_{12}k), \quad (5.1.9a)$$

$$\Phi(k) = u_2(x_2; k)(i\beta_{21} + i\beta_{11}k) + u'_2(x_2; k)(i\beta_{22} + \beta_{12}k), \quad (5.1.9b)$$

donde la dependencia de las soluciones u_1 y u_2 con respecto al parámetro k se ha escrito explícitamente.

Observación 12. Observe que los valores de k que están involucrados en las amplitudes de las ondas transmitida y reflejada carecen de unidades ya que la descripción hecha del proceso ondulatorio se derivó de una ecuación de Schrödinger libre de unidades. No obstante es posible dotar a los resultados de las unidades. Consideremos la ecuación de Schrödinger con unidades para una partícula interactuando con un potencial q_0 constante

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + q_0 u(x) = E u(x),$$

la cual se puede escribir como

$$-\frac{d^2}{dx^2} u(x) = \tilde{k}^2 u(x)$$

donde se ha definido $\tilde{k}^2 := 2m(E - q_0)/\hbar^2$, es decir $\tilde{k} = \sqrt{2m(E - q_0)}/\hbar$, $E \geq q_0$. Las soluciones linealmente independientes de esta ecuación son $e^{\pm i\tilde{k}x}$. Similarmente, consideremos la ecuación de Schrödinger sin unidades

$$-\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + q_0 u(x) = E u(x),$$

la cual se puede escribir como

$$-\frac{d^2}{dx^2} u(x) = k^2 u(x)$$

donde $k^2 = E - q_0$. Las soluciones linealmente independientes de esta ecuación son $e^{\pm ikx}$, donde $k = \sqrt{E - q_0}$, $E \geq q_0$. En ambos casos las soluciones son similares, de modo que si se desean incorporar las unidades, las apariciones de k en el análisis anterior deben multiplicarse por el factor $\sqrt{2m}/\hbar$, el cual ya involucra las unidades.

Ejemplo 13. Consideremos un caso particular donde las matrices A y B toman la siguiente forma

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \alpha_1 & 1 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \alpha_2 & 1 \end{bmatrix}, \quad \alpha_1, \alpha_2 > 0,$$

las cuales representan un potencial singular con interacciones tipo delta de Dirac

$$q_s(x) = \alpha_1 \delta(x - x_1) + \alpha_2 \delta(x - x_2),$$

entonces los coeficientes de transmisión y reflexión son

$$T_\delta(k) = \frac{2k \det J}{(\Gamma_\delta + \Phi_\delta) i - \Phi_\delta (\alpha_1 - ik)},$$

$$R_\delta(k) = \frac{-(\Gamma_\delta + \Phi_\delta) i + \Phi_\delta (\alpha_1 + ik)}{(\Gamma_\delta + \Phi_\delta) i - \Phi_\delta (\alpha_1 - ik)},$$

donde la matriz $J(k)$ dada por la expresión (5.1.8) depende de las soluciones u_1 y u_2 , las cuales a su vez dependen del potencial regular q_0 , y las funciones Γ_δ y Φ_δ para este ejemplo se expresan como

$$\Gamma_\delta(k) = u_1(x_2; k) (\alpha_2 - ik) + u_1'(x_2; k),$$

$$\Phi_\delta(k) = u_2(x_2; k) (i\alpha_2 + ik) + iu_2'(x_2; k).$$

Ejemplo 14. Consideremos otro caso particular donde las matrices A y B están dadas por

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

las cuales representan las condiciones de continuidad de las soluciones y sus derivadas en los puntos x_1 y x_2 , respectivamente. En este caso estamos asumiendo que $q_s(x) \equiv 0$. Entonces los coeficientes de transmisión y reflexión se expresan como

$$T_c(k) = -\frac{2ik \det J}{(\Gamma_c + \Phi_c) + k\Phi_c},$$

$$R_c(k) = \frac{-(\Gamma_c + \Phi_c) + k\Phi_c}{(\Gamma_c + \Phi_c) + k\Phi_c},$$

donde la matriz $J(k)$ está dada por la expresión (5.1.8) y las funciones Γ_c y Φ_c , para este ejemplo se expresan como

$$\begin{aligned}\Gamma_c(k) &= -iku_1(x_2; k) + u_1'(x_2; k), \\ \Phi_c(k) &= ik u_2(x_2; k) + i u_2'(x_2; k).\end{aligned}$$

5.1.1. Solución SPPS del problema de transmisión a través de una barrera de potencial con dos interacciones puntuales

Note que la solución general u_{II} de la ecuación diferencial

$$-\frac{d^2 u_{\text{II}}(x)}{dx^2} + q_0(x) u_{\text{II}}(x) = E u_{\text{II}}(x), \quad x_1 < x < x_2 \quad (5.1.10)$$

se puede calcular en términos de series de potencias del parámetro de energía E . De acuerdo con el método SPPS [7] supongamos que en el intervalo $[x_1, x_2]$, la ecuación diferencial

$$-\frac{d^2 u_0(x)}{dx^2} + q_0(x) u_0(x) = 0, \quad x_1 < x < x_2$$

posee una solución particular u_0 tal que las funciones u_0^2 y $-1/u_0^2$ son continuas en $[x_1, x_2]$, entonces las soluciones linealmente independientes u_1 y u_2 de la ecuación (5.1.10) se expresan como

$$u_1(x) = u_0(x) \sum_{n=0}^{\infty} E^n \tilde{X}^{(2n)}(x), \quad u_2(x) = u_0(x) \sum_{n=0}^{\infty} E^n X^{(2n+1)}(x), \quad (5.1.11)$$

con las funciones $\tilde{X}^{(n)}$ y $X^{(n)}$ definidas por las integrales recursivas

$$\begin{aligned}\tilde{X}^{(0)} &\equiv 1 & X^{(0)} &\equiv 1 \\ \tilde{X}^{(n)}(x) &= \begin{cases} \int_{x_0}^x \tilde{X}^{(n-1)}(s) u_0^2(s) ds, & n \text{ impar}, \\ -\int_{x_0}^x \tilde{X}^{(n-1)}(s) \frac{1}{u_0^2(s)} ds, & n \text{ par}, \end{cases} \\ X^{(n)}(x) &= \begin{cases} -\int_{x_0}^x X^{(n-1)}(s) \frac{1}{u_0^2(s)} ds, & n \text{ impar}, \\ \int_{x_0}^x X^{(n-1)}(s) u_0^2(s) ds, & n \text{ par}, \end{cases}\end{aligned}$$

donde x_0 es un punto arbitrario en $[x_1, x_2]$. Más aún, las series (5.1.11) convergen uniformemente en $[x_1, x_2]$. Esto permite diferenciar las series término a término como sigue

$$\begin{aligned}u_1'(x) &= -\frac{1}{u_0(x)} \sum_{n=1}^{\infty} E^n \tilde{X}^{(2n-1)} + \frac{u_0'(x)}{u_0(x)} u_1(x), \\ u_2'(x) &= -\frac{1}{u_0(x)} \sum_{n=0}^{\infty} E^n \tilde{X}^{(2n)} + \frac{u_0'(x)}{u_0(x)} u_2(x).\end{aligned}$$

Se puede ver que las soluciones u_1 y u_2 así definidas satisfacen las condiciones de Cauchy

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

Para que las soluciones u_1 y u_2 así definidas satisfagan las condiciones (5.1.5) se necesita que u_0 por su parte satisfaga las condiciones $u_0(x_0) = 1$ y $u_0'(x_0) = i$. Finalmente si se elige $x_0 = x_1$ el cálculo de las integrales recursivas se simplifica grandemente.

En el problema de transmisión a través de una barrera de potencial con soporte compacto y dos interacciones puntuales en sus extremos se llegó a las expresiones (5.1.7) que están definidas en términos de las funciones Γ y Φ , y de la matriz J dadas por (5.1.9) y (5.1.8), respectivamente. Estos términos se calculan a partir de los valores que toman las soluciones u_1 y u_2 y sus derivadas en el punto x_2 . A partir de la representación en series de potencial es posible obtener en forma explícita tales números como sigue

$$\begin{aligned} u_1(x_2) &= u_0(x_2) \sum_{n=0}^{\infty} E^n \tilde{X}^{(2n)}(x_2), \\ u_2(x_2) &= u_0(x_2) \sum_{n=0}^{\infty} E^n X^{(2n+1)}(x_2), \\ u_1'(x_2) &= -\frac{1}{u_0(x_2)} \sum_{n=1}^{\infty} E^n \tilde{X}^{(2n-1)}(x_2) + \frac{u_0'(x_2)}{u_0(x_2)} u_1(x_2), \\ u_2'(x_2) &= -\frac{1}{u_0(x_2)} \sum_{n=0}^{\infty} E^n X^{(2n)}(x_2) + \frac{u_0'(x_2)}{u_0(x_2)} u_2(x_2), \end{aligned}$$

donde por conveniencia se tomó $x_0 = x_1$ en el cálculo de las integrales recursivas.

5.2. Potencial de corto alcance con múltiples interacciones puntuales

El problema abordado en la Subsección 5.1 se analizó desde una perspectiva matricial y se obtuvieron expresiones explícitas para los coeficientes de transmisión y reflexión. Sin embargo la expresión matricial (5.1.6) de donde se obtienen los coeficientes no es adecuada para abordar un problema de transmisión con múltiples interacciones. Esto es debido a las varias multiplicaciones matriciales que tendrían que realizarse para obtener el comportamiento de las soluciones considerando únicamente dos interacciones a la vez. Con el fin de obtener expresiones que simplifiquen el cálculo de los coeficientes de transmisión y reflexión se presenta en esta subsección otro enfoque matricial basado en el cálculo de matrices de monodromía.

Consideremos N interacciones puntuales localizadas en los puntos x_1, \dots, x_N , ver Figura (5.2.1).

Cada interacción está especificada por una matriz A_j definida por

$$A_j := \begin{bmatrix} a_{11}^{(j)} & a_{12}^{(j)} \\ a_{21}^{(j)} & a_{22}^{(j)} \end{bmatrix},$$

donde las entradas de las matrices son números reales tales que se satisface la condición

$$\det A_j = 1, \quad j = 1, \dots, N.$$

El operador no-acotado asociado a la ecuación formal de Schrödinger (5.1.1) es

$$\mathcal{H}u(x) := -\frac{d^2u(x)}{dx^2} + q_0(x)u(x), \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{x_1, \dots, x_N\},$$

donde q_0 es un potencial regular continuo a trozos, con soporte compacto en el segmento $[x_1, x_N]$. La solución u satisface las siguientes condiciones puntuales en cada punto donde las interacciones se encuentran localizadas

$$\begin{bmatrix} u(x_j^+) \\ u'(x_j^+) \end{bmatrix} = A_j \begin{bmatrix} u(x_j^-) \\ u'(x_j^-) \end{bmatrix}, \quad j = 1, \dots, N. \quad (5.2.1)$$

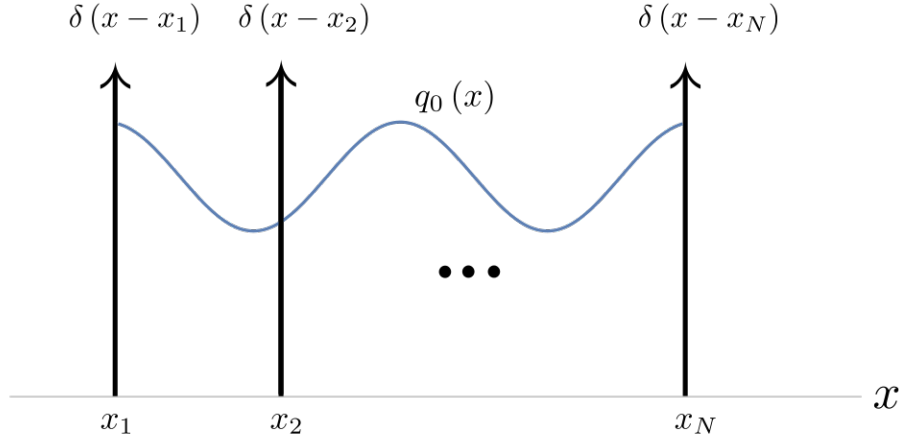


Figura 5.2.1. Problema con N interacciones puntuales representadas en esta figura por deltas de Dirac, y potencial regular q_0 con soporte en el intervalo (x_1, x_N) .

Denotemos por $u_{j,j+1}(x)$ la restricción de la solución de la ecuación

$$\mathcal{H}u(x) = Eu(x), \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{x_1, \dots, x_N\} \quad (5.2.2)$$

en el segmento (x_j, x_{j+1}) ($j = 1, \dots, N-1$), y sean $u_{-\infty,1}(x) \equiv u_1(x)$, $u_{N,\infty}(x) \equiv u_N(x)$ las restricciones de las soluciones en los intervalos de $(-\infty, x_1]$ y $[x_N, \infty)$, respectivamente. En la notación usada el primer número del subíndice de la solución $u_{j,j+1}$ representa el punto inicial mientras que el segundo número representa el punto final del intervalo donde se considera la solución; en el caso cuando un punto sea $\pm\infty$ tal número se omite en el subíndice.

Sean $\varphi_{1,j}$ y $\varphi_{2,j}$ dos soluciones linealmente independientes de la ecuación

$$-\frac{d^2 u_{j,j+1}(x)}{dx^2} + q_0(x) u_{j,j+1}(x) = E u_{j,j+1}(x)$$

en el intervalo (x_j, x_{j+1}) que satisfacen las condiciones de Cauchy en el punto x_j ($j = 1, \dots, N-1$).

$$\varphi_{1,j}(x_j) = 1, \quad \varphi_{2,j}(x_j) = 0, \quad (5.2.3a)$$

$$(\varphi_{1,j})'(x_j) = 0, \quad (\varphi_{2,j})'(x_j) = 1. \quad (5.2.3b)$$

Entonces la solución $u_{j,j+1}(x)$ se puede expresar como una combinación lineal de estas dos soluciones, es decir

$$u_{j,j+1}(x) = C_{1,j} \varphi_{1,j}(x) + C_{2,j} \varphi_{2,j}(x), \quad x_j < x < x_{j+1}, \quad (5.2.4)$$

donde $C_{1,j}$ y $C_{2,j}$ son coeficientes a determinar asociados al segmento (x_j, x_{j+1}) . Estos coeficientes se calculan evaluando la solución (5.2.4) y su derivada en el punto x_j de la siguiente manera

$$\begin{aligned} u_{j,j+1}(x_j) &= C_{1,j} \varphi_{1,j}(x_j) + C_{2,j} \varphi_{2,j}(x_j) = C_{1,j}, \\ (u_{j,j+1})'(x_j) &= C_{1,j} (\varphi_{1,j})'(x_j) + C_{2,j} (\varphi_{2,j})'(x_j) = C_{1,j}. \end{aligned}$$

De esta manera la solución $u_{j,j+1}(x)$ se representa por la expresión

$$u_{j,j+1}(x) = u_{j,j+1}(x_j) \varphi_{1,j}(x) + (u_{j,j+1})'(x_j) \varphi_{2,j}(x), \quad x_j < x < x_{j+1}, \quad (5.2.5)$$

la cual es válida para $j = 1, 2, \dots, N - 1$.

Ahora bien, en cada punto x_j se tiene una expresión matricial del tipo (5.2.1) que relaciona las soluciones a la derecha e izquierda de este punto. En términos de las notaciones utilizadas esta expresión matricial toma la siguiente forma

$$\begin{bmatrix} u_{j,j+1}(x_j^+) \\ (u_{j,j+1})'(x_j^+) \end{bmatrix} = A_j \begin{bmatrix} u_{j,j-1}(x_j^-) \\ (u_{j,j-1})'(x_j^-) \end{bmatrix} \quad j = 2, \dots, N - 1. \quad (5.2.6)$$

De acuerdo con (5.2.5), también se tiene una expresión para la solución $u_{j-1,j}(x)$ localizada en el segmento (x_{j-1}, x_j) , es decir

$$u_{j-1,j}(x) = u_{j-1,j}(x_{j-1})\varphi_{1,j-1}(x) + (u_{j-1,j})'(x_{j-1})\varphi_{2,j-1}(x), \quad x_{j-1} < x < x_j.$$

Ahora consideremos únicamente el vector columna del lado derecho de la ecuación matricial (5.2.6) y empleemos la representación de la solución $u_{j-1,j}$ anterior

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} u_{j-1,j}(x_j^-) \\ (u_{j-1,j})'(x_j^-) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} u_{j-1,j}(x_{j-1})\varphi_{1,j-1}(x_j) + (u_{j-1,j})'(x_{j-1})\varphi_{2,j-1}(x_j) \\ u_{j-1,j}(x_{j-1})(\varphi_{1,j-1})'(x_j) + (u_{j-1,j})'(x_{j-1})(\varphi_{2,j-1})'(x_j) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \varphi_{1,j-1}(x_j) & \varphi_{2,j-1}(x_j) \\ (\varphi_{1,j-1})'(x_j) & (\varphi_{2,j-1})'(x_j) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{j-1,j}(x_{j-1}) \\ (u_{j-1,j})'(x_{j-1}) \end{bmatrix} \\ &= M_{j-1,j} \begin{bmatrix} u_{j-1,j}(x_{j-1}) \\ (u_{j-1,j})'(x_{j-1}) \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

donde hemos introducido la matriz de monodromía $M_{j-1,j}$ asociada al intervalo (x_{j-1}, x_j) , la cual se define por

$$M_{j-1,j} := \begin{bmatrix} \varphi_{1,j-1}(x_j) & \varphi_{2,j-1}(x_j) \\ (\varphi_{1,j-1})'(x_j) & (\varphi_{2,j-1})'(x_j) \end{bmatrix}, \quad j = 2, \dots, N.$$

De acuerdo con esto, la ecuación matricial (5.2.6) toma la forma

$$\begin{bmatrix} u_{j,j+1}(x_j) \\ (u_{j,j+1})'(x_j) \end{bmatrix} = A_j M_{j-1,j} \begin{bmatrix} u_{j-1,j}(x_{j-1}) \\ (u_{j-1,j})'(x_{j-1}) \end{bmatrix}, \quad j = 2, \dots, N - 1, \quad (5.2.7)$$

que relaciona a las interacciones localizadas en puntos adyacentes x_j y x_{j-1} .

Es posible obtener otras relaciones al considerar de forma recursiva la relación matricial (5.2.7). Por ejemplo si $j = 2$ la ecuación que resulta es

$$\begin{bmatrix} u_{2,3}(x_2) \\ (u_{2,3})'(x_2) \end{bmatrix} = A_2 M_{1,2} \begin{bmatrix} u_{1,2}(x_1) \\ (u_{1,2})'(x_1) \end{bmatrix}. \quad (5.2.8)$$

Por otra parte si $j = 3$ se obtiene

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} u_{3,4}(x_3) \\ (u_{3,4})'(x_3) \end{bmatrix} &= A_3 M_{2,3} \begin{bmatrix} u_{2,3}(x_2) \\ (u_{2,3})'(x_2) \end{bmatrix}, \\ &= A_3 M_{2,3} A_2 M_{1,2} \begin{bmatrix} u_{1,2}(x_1) \\ (u_{1,2})'(x_1) \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

donde se sustituyó la relación matricial (5.2.8). Finalmente, si $j = N - 1$ se obtiene

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} u_{N-1,N}(x_{N-1}) \\ (u_{N-1,N})'(x_{N-1}) \end{bmatrix} &= A_{N-1} M_{N-2,N-1} \begin{bmatrix} u_{N-2,N-1}(x_{N-2}) \\ (u_{N-2,N-1})'(x_{N-2}) \end{bmatrix} \\ &= A_{N-1} M_{N-2,N-1} \cdots A_3 M_{2,3} A_2 M_{1,2} \begin{bmatrix} u_{1,2}(x_1) \\ (u_{1,2})'(x_1) \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (5.2.9)$$

donde se han sustituido todas las relaciones matriciales anteriores. Esta ecuación relaciona a la interacción localizada en x_1 con la interacción en x_{N-1} . Para incluir a la interacción en x_N , se puede extender el uso de la formula (5.2.7) para $j = N$ abusando de la notación y notando que la hipotética solución $u_{N,N+1}(x)$ coincide con $u_N(x)$ en el punto x_N , de esta manera

$$\begin{bmatrix} u_N(x_N) \\ u'_N(x_N) \end{bmatrix} = A_N M_{N-1,N} \begin{bmatrix} u_{N-1,N}(x_{N-1}) \\ (u_{N-1,N})'(x_{N-1}) \end{bmatrix}. \quad (5.2.10)$$

Al acoplar la ecuación (5.2.9) en (5.2.10) se tiene una relación matricial entre la interacción en x_1 con la interacción en x_N , es decir

$$\begin{bmatrix} u_N(x_N) \\ u'_N(x_N) \end{bmatrix} = A_N M_{N-1,N} A_{N-1} M_{N-2,N-1} \cdots A_3 M_{2,3} A_2 M_{1,2} \begin{bmatrix} u_{1,2}(x_1) \\ (u_{1,2})'(x_1) \end{bmatrix}. \quad (5.2.11)$$

Finalmente, cuando consideramos la interacción en el punto $x = x_1$ definida por la matriz A_1

$$\begin{bmatrix} u_{1,2}(x_1^+) \\ (u_{1,2})'(x_1^+) \end{bmatrix} = A_1 \begin{bmatrix} u_1(x_1^-) \\ (u_1)'(x_1^-) \end{bmatrix}, \quad (5.2.12)$$

en la ecuación (5.2.11) se tiene la siguiente ecuación matricial

$$\begin{bmatrix} u_N(x_N) \\ u'_N(x_N) \end{bmatrix} = A_N M_{N-1,N} \cdots A_2 M_{1,2} A_1 \begin{bmatrix} u_1(x_1) \\ u'_1(x_1) \end{bmatrix},$$

la cual relaciona a las soluciones a la izquierda del punto x_1 , con las soluciones a la derecha de x_N .

El análisis anterior permitió obtener una solución general de la ecuación diferencial (5.2.2) la cual satisface las condiciones puntuales (5.2.1) en cada punto x_j ($j = 1, \dots, N$) donde las interacciones puntuales están localizadas. Ahora analicemos los estados de dispersión de la ecuación

$$-\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + q_0(x) u(x) = E u(x), \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{x_1, \dots, x_N\},$$

donde $E = k^2$, $k > 0$, es el parámetro de la energía. Como se hizo en la subsección anterior, supongamos que existe una única fuente de partículas localizada en $x \rightarrow -\infty$, de modo que las soluciones u_1 y u_N las podemos representar como

$$\begin{aligned} u_1(x) &= e^{ik(x-x_1)} + R e^{-ik(x-x_1)}, & x < x_1 \\ u_N(x) &= T e^{ik(x-x_N)}, & x > x_N \end{aligned}$$

donde R representa la amplitud de la onda reflejada por el potencial en $x = x_1$, mientras que T representa la amplitud de la onda transmitida que proviene del potencial en $x = x_N$. Por otra parte la onda incidente $e^{ik(x-x_1)}$ se asume con amplitud unitaria. Bajo esta condición, se satisface la identidad $|R|^2 + |T|^2 = 1$. Con base en estas soluciones la ecuación (5.2.11) toma la forma

$$\begin{bmatrix} T \\ ikT \end{bmatrix} = A_N M_{N-1,N} \cdots A_2 M_{1,2} A_1 \begin{bmatrix} 1 + R \\ ik(1 - R) \end{bmatrix}, \quad (5.2.13)$$

la cual es una expresión matricial general para R y T , en función de $k = \sqrt{E}$. Después de realizar los productos matriciales indicados y de hacer la igualdad matricial con el vector columna del lado izquierdo es posible obtener expresiones para los coeficientes T y R en función del parámetro k . Sin embargo la implementación de esta fórmula debe realizarse de forma iterativa por un programa computacional que calcule las matrices de monodromía para cada intervalo y que realice los productos matriciales indicados.

A partir de la expresión (5.2.13) es posible encontrar aquellos valores del parámetro $k = k_t$ para los cuales las regiones de interacción son transparentes, lo cual quiere decir que el coeficiente de reflexión es igual a cero, entonces dichos valores se representan por la siguiente expresión

$$\begin{bmatrix} T \\ ik_t T \end{bmatrix} = A_N M_{N-1,N} \cdots A_2 M_{1,2} A_1 \begin{bmatrix} 1 \\ ik_t \end{bmatrix},$$

estos valores de k_t definen las energías de transparencia $E_t = k_t^2$.

Ejemplo 15. Consideremos las condiciones de continuidad en cada punto x_i definidas por las matrices

$$A_i = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad i = 1, \dots, N.$$

En este caso, estamos suponiendo que el potencial singular es $q_s(x) \equiv 0$. De acuerdo con la propiedad asociativa del producto matricial, se tienen los productos parciales

$$A_i M_{i-1,i} = M_{i-1,i}, \quad i = 2, \dots, N$$

de modo que el problema de transmisión se define por la siguiente ecuación matricial

$$\begin{bmatrix} T \\ ikT \end{bmatrix} = M_{N-1,N} \cdots M_{1,2} \begin{bmatrix} 1 + R \\ ik(1 - R) \end{bmatrix},$$

donde T representa el coeficiente de transmisión y R representa el coeficiente de reflexión.

Ejemplo 16. Consideremos interacciones tipo delta de Dirac $\alpha_i \delta(x - x_i)$ en cada punto x_i , donde $\alpha_i > 0$, las cuales se representan mediante las matrices

$$A_i = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \alpha_i & 1 \end{bmatrix}, \quad i = 1, \dots, N.$$

En este caso, de acuerdo con la propiedad asociativa del producto matricial, se tienen los productos parciales

$$\begin{aligned} \Delta_{i-1,i} &:= A_i M_{i-1,i} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \alpha_i & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_{1,i-1}(x_i) & \varphi_{2,i-1}(x_i) \\ (\varphi_{1,i-1})'(x_i) & (\varphi_{2,i-1})'(x_i) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \varphi_{1,i-1}(x_i) & \varphi_{2,i-1}(x_i) \\ \alpha_i \varphi_{1,i-1}(x_i) + (\varphi_{1,i-1})'(x_i) & \alpha_i \varphi_{2,i-1}(x_i) + (\varphi_{2,i-1})'(x_i) \end{bmatrix}, \quad i = 2, \dots, N, \end{aligned}$$

por lo tanto el problema de transmisión en este caso se representa por la ecuación matricial siguiente

$$\begin{bmatrix} T \\ ikT \end{bmatrix} = \Delta_{N-1,N} \cdots \Delta_{1,2} A_1 \begin{bmatrix} 1 + R \\ ik(1 - R) \end{bmatrix},$$

la cual se deriva del caso general (5.2.13).

Ejemplo 17. Consideremos la ecuación de Schrödinger con múltiples interacciones puntuales

$$\mathcal{H}u(x) := -\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + q_0(x)u(x), \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{x_1, \dots, x_N\},$$

donde cada interacción está especificada por una matriz A_j definida por

$$A_j := \begin{bmatrix} a_{11}^{(j)} & a_{12}^{(j)} \\ a_{21}^{(j)} & a_{22}^{(j)} \end{bmatrix},$$

y con un potencial $q_0(x)$ constante a trozos definido como

$$q_0(x) = \begin{cases} q_{1,2}, & x_1 < x < x_2, \\ q_{2,3}, & x_2 < x < x_3, \\ \vdots & \\ q_{N-1,N}, & x_{N-1} < x < x_N, \end{cases}$$

donde $q_{j,j+1} > 0$ representa el nivel constante de la barrera de potencial en el segmento (x_j, x_{j+1}) . Construamos las matrices de monodromía asociadas con este potencial. Para este objetivo necesitamos determinar las soluciones linealmente independientes $\varphi_{1,j}$ y $\varphi_{2,j}$ de la ecuación

$$-\frac{d^2}{dx^2} u_{j,j+1}(x) + q_{j,j+1} u_{j,j+1}(x) = E u_{j,j+1}(x)$$

en el intervalo (x_j, x_{j+1}) , que satisfacen las condiciones de Cauchy (5.2.3). Esta ecuación se puede reescribir como

$$-\frac{d^2}{dx^2}u_{j,j+1}(x) = (E - q_{j,j+1})u_{j,j+1}(x).$$

Definamos $k_j^2 := E - q_{j,j+1}$, entonces las dos soluciones linealmente independientes de esta ecuación tienen la forma $e^{ik_j x}$ y $e^{-ik_j x}$, donde $k_j = \sqrt{E - q_{j,j+1}}$. Las soluciones serán oscilatorias si $k_j > 0$, lo que implica que $E > q_{j,j+1}$. A partir de estas soluciones podemos construir las funciones $\varphi_{1,j}$ y $\varphi_{2,j}$ como combinaciones lineales de la siguiente manera

$$\begin{aligned}\varphi_{1,j}(x) &= C_{1,j}e^{ik_j x} + C_{2,j}e^{-ik_j x}, \\ \varphi_{2,j}(x) &= D_{1,j}e^{ik_j x} + D_{2,j}e^{-ik_j x}.\end{aligned}$$

Con respecto a $\varphi_{1,j}$, los coeficientes $C_{1,j}$ y $C_{2,j}$ se determinan al evaluar la solución y su derivada en el punto x_j como sigue

$$\begin{aligned}\varphi_{1,j}(x_j) &= C_{1,j}e^{ik_j x_j} + C_{2,j}e^{-ik_j x_j} = 1, \\ (\varphi_{1,j})'(x_j) &= ik_j (C_{1,j}e^{ik_j x_j} - C_{2,j}e^{-ik_j x_j}) = 0,\end{aligned}$$

se obtiene así un sistema de ecuaciones con $C_{1,j}$ y $C_{2,j}$ como incógnitas cuya solución es

$$C_{1,j} = \frac{1}{2}e^{-ik_j x_j}, \quad C_{2,j} = \frac{1}{2}e^{ik_j x_j}.$$

De esta manera la solución $\varphi_{1,j}$, toma la forma

$$\varphi_{1,j}(x) = \frac{1}{2} \left(e^{ik_j(x-x_j)} + e^{-ik_j(x-x_j)} \right) = \cos(k_j(x-x_j)).$$

Con respecto a $\varphi_{2,j}$, los coeficientes $D_{1,j}$ y $D_{2,j}$ se determinan al evaluar la solución y su derivada en el punto x_j como sigue

$$\begin{aligned}\varphi_{2,j}(x_j) &= D_{1,j}e^{ik_j x_j} + D_{2,j}e^{-ik_j x_j} = 0, \\ (\varphi_{2,j})'(x_j) &= ik_j (D_{1,j}e^{ik_j x_j} - D_{2,j}e^{-ik_j x_j}) = 1,\end{aligned}$$

se obtiene así un sistema de ecuaciones con $D_{1,j}$ y $D_{2,j}$ como incógnitas cuya solución es

$$D_{1,j} = -\frac{i}{2k_j}e^{-ik_j x_j}, \quad D_{2,j} = \frac{i}{2k_j}e^{ik_j x_j}.$$

De esta manera la solución $\varphi_{2,j}$, toma la forma

$$\varphi_{2,j}(x) = \frac{1}{2ik_j} \left(e^{ik_j(x-x_j)} - e^{-ik_j(x-x_j)} \right) = \frac{1}{k_j} \sin(k_j(x-x_j)).$$

Entonces la forma exacta que toman las matrices de monodromía se muestra a continuación

$$M_{j,j+1} := \begin{bmatrix} \cos(k_j(x_{j+1}-x_j)) & \frac{1}{k_j} \sin(k_j(x_{j+1}-x_j)) \\ -k_j \sin(k_j(x_{j+1}-x_j)) & \cos(k_j(x_{j+1}-x_j)) \end{bmatrix}, \quad j = 1, \dots, N-1.$$

Finalmente, para que las soluciones sean oscilatorias en cada uno de los segmentos se necesita que energía satisfaga la siguiente condición

$$E > \max \{q_{j,j+1}\}_{j=1}^{N-1}.$$

5.3. Solución SPPS del problema de transmisión a través de un potencial de corto alcance con múltiples interacciones puntuales

En la sección 5.2 se abordó el problema de la transmisión de ondas cuánticas a través de potenciales arbitrarios con interacciones puntuales por medio del uso de las matrices de monodromía. En esta subsección abordaremos el cálculo explícito de estas matrices empleando el método SPPS.

Consideremos la ecuación de Schrödinger en el intervalo (x_j, x_{j+1}) ,

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + q_{j,j+1}(x)\right)u_{j,j+1}(x) = Eu_{j,j+1} \quad (5.3.1)$$

donde $q_{j,j+1}(x)$ es la restricción de la función potencial q_0 en dicho intervalo. Aquí nuevamente la notación empleada denota el punto inicial del intervalo por el primer número del subíndice y el punto final por el segundo número. Sea $u_{0,j}$ una solución particular de la ecuación

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + q_{j,j+1}(x)\right)u_{0,j}(x) = 0$$

en el intervalo (x_j, x_{j+1}) tal que las funciones $u_{0,j}^2$ y $-1/u_{0,j}^2$ son continuas en $[x_j, x_{j+1}]$, entonces las dos soluciones linealmente independientes de la ecuación (5.3.1) se pueden expresar como series de potencias del parámetro de la energía como sigue

$$u_{1,j}(x) = u_{0,j}(x) \sum_{n=0}^{\infty} E^n \tilde{X}_j^{(2n)}(x), \quad u_{2,j}(x) = u_{0,j}(x) \sum_{n=0}^{\infty} E^n X_j^{(2n+1)}(x), \quad (5.3.2)$$

con las funciones $\tilde{X}_j^{(n)}$ y $X_j^{(n)}$ definidas por las integrales recursivas

$$\begin{aligned} \tilde{X}_j^{(0)} &\equiv 1 & X_j^{(0)} &\equiv 1 \\ \tilde{X}_j^{(n)}(x) &= \begin{cases} \int_{x_{0,j}}^x \tilde{X}_j^{(n-1)}(s) u_{0,j}^2(s) ds, & n \text{ impar,} \\ -\int_{x_{0,j}}^x \tilde{X}_j^{(n-1)}(s) \frac{1}{u_{0,j}^2(s)} ds, & n \text{ par,} \end{cases} \\ X_j^{(n)}(x) &= \begin{cases} -\int_{x_{0,j}}^x X_j^{(n-1)}(s) \frac{1}{u_{0,j}^2(s)} ds, & n \text{ impar,} \\ \int_{x_{0,j}}^x X_j^{(n-1)}(s) u_{0,j}^2(s) ds, & n \text{ par,} \end{cases} \end{aligned}$$

donde $x_{0,j}$ es un punto arbitrario en $[x_j, x_{j+1}]$. Más aún, las series (5.3.2) convergen uniformemente en $[x_j, x_{j+1}]$. Esto permite diferenciar las series término a término como sigue

$$\begin{aligned} (u_{1,j})'(x) &= -\frac{1}{u_{0,j}(x)} \sum_{n=1}^{\infty} E^n \tilde{X}_j^{(2n-1)} + \frac{(u_{0,j})'(x)}{u_{0,j}(x)} u_{1,j}(x), \\ (u_{2,j})'(x) &= -\frac{1}{u_{0,j}(x)} \sum_{n=0}^{\infty} E^n \tilde{X}_j^{(2n)} + \frac{(u_{0,j})'(x)}{u_{0,j}(x)} u_{2,j}(x). \end{aligned}$$

Se puede ver que las soluciones $u_{1,j}$ y $u_{2,j}$ así definidas satisfacen las condiciones de Cauchy

$$\begin{aligned} u_{1,j}(x_{0,j}) &= u_{0,j}(x_{0,j}), & (u_{1,j})'(x_{0,j}) &= (u_{0,j})'(x_{0,j}), \\ u_{2,j}(x_{0,j}) &= 0, & (u_{2,j})'(x_{0,j}) &= -\frac{1}{u_{0,j}(x_{0,j})}. \end{aligned}$$

En lo que sigue consideramos que $x_{0,j} = x_j$ lo cual simplifica grandemente los cálculos.

Se puede ver que las soluciones $u_{1,j}$ y $u_{2,j}$ no satisfacen las condiciones de Cauchy (5.2.3), sin embargo pueden ser utilizadas para construir a $\varphi_{1,j}$ y a $\varphi_{2,j}$ como sigue

$$\varphi_{1,j}(x) = d_{1,j}u_{1,j}(x) + d_{2,j}u_{2,j}(x), \quad (5.3.3a)$$

$$\varphi_{2,j}(x) = e_{1,j}u_{1,j}(x) + e_{2,j}u_{2,j}(x), \quad (5.3.3b)$$

donde $d_{1,j}$, $d_{2,j}$, $e_{1,j}$, y $e_{2,j}$ son coeficientes a determinar.

Evaluemos a $\varphi_{1,j}(x)$ en x_j , lo que resulta

$$\begin{aligned} \varphi_{1,j}(x_j) &= d_{1,j}u_{1,j}(x_j) + d_{2,j}u_{2,j}(x_j) \\ &= d_{1,j}u_{0,j}(x_j) = 1, \end{aligned}$$

de esta igualdad se obtiene el coeficiente

$$d_{1,j} = \frac{1}{u_{0,j}(x_j)}.$$

Ahora evaluemos la derivada $(\varphi_{1,j})'$ en x_j

$$\begin{aligned} (\varphi_{1,j})'(x_j) &= d_{1,j}(u_{1,j})'(x_j) + d_{2,j}(u_{2,j})'(x_j) \\ &= \frac{1}{u_{0,j}(x_j)}(u_{0,j})'(x_j) - \frac{d_{2,j}}{u_{0,j}(x_j)} = 0, \end{aligned}$$

por lo tanto resulta que

$$d_{2,j} = (u_{0,j})'(x_j).$$

De esta manera la expresión para $\varphi_{1,j}$ en términos de las soluciones $u_{1,j}$ y $u_{2,j}$ es

$$\varphi_{1,j}(x) = \frac{1}{u_{0,j}(x_j)}u_{1,j}(x) + (u_{0,j})'(x_j)u_{2,j}(x),$$

y al considerar la representación en series de potencias (5.3.2) se tiene que

$$\varphi_{1,j}(x) = \frac{1}{u_{0,j}(x_j)}u_{0,j}(x) \sum_{n=0}^{\infty} E^n \tilde{X}_j^{(2n)}(x) + (u_{0,j})'(x_j)u_{0,j}(x) \sum_{n=0}^{\infty} E^n X_j^{(2n+1)}(x), \quad (5.3.4)$$

Ahora, evaluando la solución $\varphi_{2,j}$ en $x = x_j$ se tiene

$$\begin{aligned} \varphi_{2,j}(x_j) &= e_{1,j}u_{1,j}(x_j) + e_{2,j}u_{2,j}(x_j) \\ &= e_{1,j}u_{0,j}(x_j) = 0, \end{aligned}$$

de lo que resulta el coeficiente

$$e_{1,j} = 0.$$

Ahora evaluemos la derivada de $(\varphi_{2,j})'$ en x_j

$$\begin{aligned} (\varphi_{2,j})'(x_j) &= e_{2,j}(u_{2,j})'(x_j) \\ &= -\frac{e_{2,j}}{u_{0,j}(x_j)} = 1, \end{aligned}$$

entonces se obtiene

$$e_{2,j} = -u_{0,j}(x_j)$$

Por lo que la solución (5.3.3b) se expresa como

$$\varphi_{2,j}(x) = -u_{0,j}(x_j)u_{2,j}(x)$$

y al considerar la representación en series de potencias (5.3.2) se tiene que

$$\varphi_{2,j}(x) = -u_{0,j}(x_j) u_{0,j}(x) \sum_{n=0}^{\infty} E^n X_j^{(2n+1)}(x). \quad (5.3.5)$$

Finalmente, es posible derivar expresiones para $(\varphi_{1,j})'(x)$ y $(\varphi_{2,j})'(x)$ en términos de la representación en series de potencias como sigue

$$\begin{aligned} (\varphi_{1,j})'(x) &= \frac{1}{u_{0,j}(x_j)} \left(-\frac{1}{u_{0,j}(x)} \sum_{n=1}^{\infty} E^n \tilde{X}_j^{(2n-1)}(x) + (u_{0,j})'(x) \sum_{n=0}^{\infty} E^n \tilde{X}_j^{(2n)}(x) \right) \\ &\quad + (u_{0,j})'(x_j) \left(-\frac{1}{u_{0,j}(x)} \sum_{n=0}^{\infty} E^n X_j^{(2n)}(x) + (u_{0,j})'(x) \sum_{n=0}^{\infty} E^n X_j^{(2n+1)}(x) \right) \\ (\varphi_{2,j})'(x) &= -u_{0,j}(x_j) \left(-\frac{1}{u_{0,j}(x)} \sum_{n=0}^{\infty} E^n X_j^{(2n)}(x) + (u_{0,j})'(x) \sum_{n=0}^{\infty} E^n X_j^{(2n+1)}(x) \right) \end{aligned}$$

Por lo que la matriz de monodromía queda en términos de estas funciones y sus respectivas derivadas evaluadas en el punto x_{j+1} .

Si la solución $u_{0,j}$ satisface las condiciones

$$u_{0,j}(x_j) = 1, \quad (u_{0,j})'(x_j) = i,$$

entonces, las expresiones para $\varphi_{1,j}$, $\varphi_{2,j}$ y sus derivadas se expresan como series de potencias del parámetro de la energía E como sigue

$$\varphi_{1,j}(x) = u_{0,j}(x) \left(\sum_{n=0}^{\infty} E^n \tilde{X}_j^{(2n)}(x) + i \sum_{n=0}^{\infty} E^n X_j^{(2n+1)}(x) \right), \quad (5.3.6a)$$

$$\varphi_{2,j}(x) = -u_{0,j}(x) \sum_{n=0}^{\infty} E^n X_j^{(2n+1)}(x), \quad (5.3.6b)$$

$$(\varphi_{1,j})'(x) = (u_{0,j})'(x) \left(\sum_{n=0}^{\infty} E^n \tilde{X}_j^{(2n)}(x) + i \sum_{n=0}^{\infty} E^n X_j^{(2n+1)}(x) \right) \quad (5.3.6c)$$

$$- \frac{1}{u_{0,j}(x)} \left(\sum_{n=1}^{\infty} E^n \tilde{X}_j^{(2n-1)}(x) + i \sum_{n=0}^{\infty} E^n X_j^{(2n)}(x) \right), \quad (5.3.6d)$$

$$(\varphi_{2,j})'(x) = \frac{1}{u_{0,j}(x)} \sum_{n=0}^{\infty} E^n X_j^{(2n)}(x) - (u_{0,j})'(x) \sum_{n=0}^{\infty} E^n X_j^{(2n+1)}(x), \quad (5.3.6e)$$

a partir de las cuales se puede obtener la matriz de monodromía $M_{j-1,j}$.

5.3.1. Un método de construcción de la solución particular $u_{0,j}$

El método SPSS también se puede utilizar para calcular la solución particular $u_{0,j}$ de la ecuación

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + q_{j,j+1}(x) \right) u_{0,j} = 0$$

en el intervalo $[x_j, x_{j+1}]$. Sean $v_{1,j}$ y $v_{2,j}$ dos soluciones linealmente independientes, tales que la solución construida en la forma

$$u_{0,j} = v_{1,j} + i v_{2,j}$$

no se anula en el intervalo $[x_j, x_{j+1}]$, ya que $v_{1,j}$ y $v_{2,j}$ alternan sus ceros según el teorema de oscilación de Sturm [15].

Sea $v_{0,j}$ una solución particular de la ecuación

$$-\frac{d^2}{dx^2}v_{0,j} = 0,$$

en el intervalo $[x_j, x_{j+1}]$ que satisface las condiciones de regularidad $q_{j,j+1}v_{0,j}^2, v_{0,j}^{-2} \in C[x_j, x_{j+1}]$, entonces $v_{1,j}$ y $v_{2,j}$ se pueden expresar en series de potencias formales como

$$v_{1,j}(x) := v_{0,j} \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{Y}_j^{(2n)}(x) \quad \text{y} \quad v_{2,j}(x) := v_{0,j} \sum_{n=0}^{\infty} Y_j^{(2n+1)}(x), \quad (5.3.7)$$

donde las funciones $\tilde{Y}_j^{(n)}$ y $Y_j^{(n)}$ están definidas en forma recursiva como

$$\begin{aligned} \tilde{Y}_j^{(0)} &\equiv 1 & Y_j^{(0)} &\equiv 1 \\ \tilde{Y}_j^{(n)}(x) &= \begin{cases} \int_{\tilde{x}_{0,j}}^x \tilde{Y}_j^{(n-1)}(s) v_{0,j}^2(s) q_{j,j+1}(s) ds, & n \text{ impar,} \\ \int_{\tilde{x}_{0,j}}^x \tilde{Y}_j^{(n-1)}(s) \frac{1}{v_{0,j}^2(s)} ds, & n \text{ par,} \end{cases} \\ Y_j^{(n)}(x) &= \begin{cases} \int_{\tilde{x}_{0,j}}^x Y_j^{(n-1)}(s) \frac{1}{v_{0,j}^2(s)} ds, & n \text{ impar,} \\ \int_{\tilde{x}_{0,j}}^x Y_j^{(n-1)}(s) v_{0,j}^2(s) q_{j,j+1}(s) ds, & n \text{ par.} \end{cases} \end{aligned}$$

El punto $\tilde{x}_{0,j}$ es un punto arbitrario en $[x_j, x_{j+1}]$. En particular se puede tomar a $v_{0,j} \equiv 1$ lo cual simplifica mucho el trabajo. Más aún, las series (5.3.7) convergen uniformemente en el intervalo $[x_j, x_{j+1}]$; esto permite diferenciar término a término las series (5.3.7), lo cual conduce a una representación en series de potencias formales para $u_{0,j}$ y su derivada $(u_{0,j})'$ como sigue

$$u_{0,j} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\tilde{Y}_j^{(2n)}(x) + iY_j^{(2n+1)}(x) \right), \quad (5.3.8a)$$

$$(u_{0,j})'(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\tilde{Y}_j^{(2n+1)}(x) + iY_j^{(2n)}(x) \right). \quad (5.3.8b)$$

Si se elige $\tilde{x}_{0,j} = x_j$, se puede ver que la solución $u_{0,j}$ así construida satisface las condiciones de Cauchy

$$u_{0,j}(x_j) = 1, \quad (u_{0,j})'(x_j) = i,$$

tal como se solicitaba anteriormente.

5.4. Implementación computacional

En la Secciones 5.2 y 5.3 se abordó el problema de la transmisión de ondas cuánticas a través de potenciales arbitrarios con interacciones puntuales por medio del uso de las matrices de monodromía y se realizó el cálculo de éstas empleando el método SPPS en el caso cuando las funciones potenciales no conduzcan a soluciones exactas de las ecuaciones de Schrödinger. En esta sección se muestra la implementación computacional de la teoría previamente desarrollada.

En la Sección 5.2 se llegó a la ecuación matricial siguiente

$$\begin{bmatrix} T \\ ikT \end{bmatrix} = A_N M_{N-1,N} \cdots A_2 M_{1,2} A_1 \begin{bmatrix} 1 + R \\ ik(1 - R) \end{bmatrix}, \quad (5.4.1)$$

la cual relaciona los coeficientes de transmisión T y reflexión R , en términos de las matrices A_j asociadas con las interacciones en los puntos x_j y en términos de las matrices de monodromía $M_{j-1,j}$ que están dadas por la siguiente expresión

$$M_{j-1,j} := \begin{bmatrix} \varphi_{1,j-1}(x_j) & \varphi_{2,j-1}(x_j) \\ (\varphi_{1,j-1})'(x_j) & (\varphi_{2,j-1})'(x_j) \end{bmatrix}, \quad j = 2, \dots, N.$$

las cuales se determinan a partir de las funciones $\varphi_{1,j-1}$, $\varphi_{2,j-1}$ y sus respectivas derivadas evaluadas en el punto x_j .

En la Sección 5.3 se llegó a expresiones para las funciones $\varphi_{1,j}$, $\varphi_{2,j}$ y sus respectivas derivadas como series de potencias del parámetro de energía E , las cuales se muestran en forma explícita por las expresiones (5.3.6). La representación SPPS de estas soluciones y sus derivadas consiste de series infinitas que para propósitos prácticos no pueden ser implementadas en su forma actual debido al número infinito de términos que las componen. Por lo tanto, en su implementación computacional estas series se tienen que truncar hasta un m -ésimo término, lo cual significa que a partir de esta representación truncada ahora tendremos una aproximación para los coeficientes de reflexión y de transmisión.

Consideremos que las series $\varphi_{1,j}$, $\varphi_{2,j}$ y sus derivadas se truncan hasta el m -ésimo término, es decir,

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_{1,j}(x) &= u_{0,j}(x) \left(\sum_{n=0}^m E^n \tilde{X}_j^{(2n)}(x) + i \sum_{n=0}^m E^n X_j^{(2n+1)}(x) \right), \\ \tilde{\varphi}_{2,j}(x) &= -u_{0,j}(x) \sum_{n=0}^m E^n X_j^{(2n+1)}(x), \\ (\tilde{\varphi}_{1,j})'(x) &= (u_{0,j})'(x) \left(\sum_{n=0}^m E^n \tilde{X}_j^{(2n)}(x) + i \sum_{n=0}^m E^n X_j^{(2n+1)}(x) \right) \\ &\quad - \frac{1}{u_{0,j}(x)} \left(\sum_{n=1}^m E^n \tilde{X}_j^{(2n-1)}(x) + i \sum_{n=0}^m E^n X_j^{(2n)}(x) \right), \\ (\tilde{\varphi}_{2,j})'(x) &= \frac{1}{u_{0,j}(x)} \sum_{n=0}^m E^n X_j^{(2n)}(x) - (u_{0,j})'(x) \sum_{n=0}^m E^n X_j^{(2n+1)}(x), \end{aligned}$$

donde $j = 1, \dots, N-1$. Las expresiones anteriores representan aproximaciones de las funciones $\varphi_{1,j}$ y $\varphi_{2,j}$, y sus respectivas derivadas. Dada la convergencia uniforme de las series $\varphi_{1,j}$, $\varphi_{2,j}$, los errores $|\varphi_{1,j} - \tilde{\varphi}_{1,j}|$ y $|\varphi_{2,j} - \tilde{\varphi}_{2,j}|$ decrecen uniformemente conforme $m \rightarrow \infty$. A partir de estas aproximaciones se obtiene una aproximación de la matriz de monodromía dada por la expresión

$$\tilde{M}_{j-1,j} := \begin{bmatrix} \tilde{\varphi}_{1,j-1}(x_j) & \tilde{\varphi}_{2,j-1}(x_j) \\ (\tilde{\varphi}_{1,j-1})'(x_j) & (\tilde{\varphi}_{2,j-1})'(x_j) \end{bmatrix}, \quad j = 2, \dots, N.$$

Al considerar las aproximaciones $\tilde{M}_{j-1,j}$ de las matrices de monodromía en la ecuación (5.4.1) se obtienen aproximaciones de las amplitudes de las ondas transmitida y reflejada, denotados respectivamente por \tilde{T} y \tilde{R} , de acuerdo con la siguiente expresión

$$\begin{bmatrix} \tilde{T} \\ ik\tilde{T} \end{bmatrix} = A_N \tilde{M}_{N-1,N} \cdots A_2 \tilde{M}_{1,2} A_1 \begin{bmatrix} 1 + \tilde{R} \\ ik(1 - \tilde{R}) \end{bmatrix}.$$

El cálculo de las soluciones $\tilde{\varphi}_{1,j}$, $\tilde{\varphi}_{2,j}$ se basa totalmente en la existencia de una solución $u_{0,j}$, cuya expresión exacta fue obtenida en la Subsección 5.3.1. Para poder desarrollar la implementación computacional para la solución $u_{0,j}$ y su derivada que están dadas por las expresiones (5.3.8) se tienen que truncar sus respectivas series de potencias hasta un m -ésimo término. Sean $\tilde{u}_{0,j}$ y $(\tilde{u}_{0,j})'$ las aproximaciones de la solución

$u_{0,j}$ y de su derivada, respectivamente, las cuales están dadas por las siguientes expresiones

$$\begin{aligned}\tilde{u}_{0,j} &= \sum_{n=0}^m \left(\tilde{Y}_j^{(2n)}(x) + iY_j^{(2n+1)}(x) \right), \\ (\tilde{u}_{0,j})'(x) &= \sum_{n=0}^m \left(\tilde{Y}_j^{(2n+1)}(x) + iY_j^{(2n)}(x) \right).\end{aligned}$$

Dada la convergencia uniforme de la serie $u_{0,j}$, el error $|u_{0,j} - \tilde{u}_{0,j}|$ decrece uniformemente conforme $m \rightarrow \infty$.

Capítulo 6

Conclusiones y trabajo a futuro

Se analizaron las ecuaciones de Schrödinger que involucran potenciales regulares acotados, y potenciales singulares tipo δ y δ' , como extensiones auto-adjuntas de ciertos operadores que incluyen únicamente la parte regular del potencial, así como ciertas condiciones de frontera que pueden expresarse en forma matricial. Para las interacciones tipo δ y δ' las condiciones en frontera implican el uso de una matriz de 2×2 cuyas entradas se definen a partir de las intensidades de las interacciones y que implican la continuidad o salto de las funciones o sus derivadas en los puntos singulares. La representación matricial de las interacciones puntuales posteriormente se generaliza en matrices arbitrarias cuyas entradas son números reales y que satisfacen la condición de que el determinante de la matriz es uno, a efectos de que el operador correspondiente sea auto-adjunto.

Se abordó un problema que involucra la interacción de un onda cuántica con un potencial regular y un potencial singular representado por interacciones puntuales. Primero se consideró el caso cuando el potencial es atractivo y se obtuvo la ecuación de dispersión que define las energías permitidas de los estados ligados. El método utilizado fue matricial con el objetivo de aprovechar la representación matricial de las condiciones en la frontera. Posteriormente se analizaron los potenciales repulsivos y se caracterizaron los estados de dispersión del sistema a través de los coeficientes de transmisión y reflexión. La solución del problema de transmisión de ondas cuánticas utiliza también un enfoque matricial que permite considerar las condiciones en la frontera puntuales expresadas en forma general. En este caso se hace uso de las matrices de monodromía para expresar la relación que existe entre dos interacciones puntuales. Las matrices de monodromía permiten obtener expresiones recursivas para los coeficientes de reflexión y transmisión.

En el problema de transmisión el potencial regular se asume como una función acotada arbitraria. Para obtener soluciones de la ecuación de Schrödinger ante tales potenciales es posible aplicar métodos numéricos o utilizar aproximaciones que conduzcan a soluciones aproximadas. Sin embargo, en esta tesis se ocupó el método SPPS para obtener soluciones exactas como series de potencias del parámetro de la energía. A partir de esta representación SPPS se obtienen expresiones explícitas para las matrices de monodromía. Los resultados obtenidos pueden aplicarse a potenciales tipo delta de Dirac, derivada de delta de Dirac, combinaciones lineales de éstas, u otros potenciales singulares que pueden tratarse en términos de distribuciones de primer orden. El enfoque matricial permite obtener expresiones cerradas para los coeficientes de transmisión y reflexión, cuyas expresiones permiten el cálculo de las energías de transparencia del sistema cuántico como función de la energía de la partícula.

La representación en series de potencias del parámetro de la energía conduce a un método numérico para el cálculo efectivo de los coeficientes de reflexión y transmisión, el cual consiste en truncar las series de potencias hasta un número finito de términos. Dado que las series de potencias aquí consideradas convergen uniformemente el error asociado con el truncamiento puede ser reducido uniformemente al considerar más términos en las series. De esta manera el cálculo de las matrices de monodromía se reduce a evaluar polinomios, lo cual muestra una alternativa atractiva para el análisis de los problemas de transmisión.

Dado que es posible establecer analogías ópticas–mecánico-cuánticas, los resultados aquí obtenidos pueden ser aplicables a la ecuación de Helmholtz que resulta de analizar los sistemas ópticos sometidos a interacciones puntuales. Además, muchos problemas de transmisión de señales eléctricas en líneas de transmisión se especifican por ecuaciones diferenciales de segundo orden, por lo cual estos resultados podrían aplicarse

al cálculo del coeficiente de reflexión de la línea de transmisión sometida a discontinuidades. Por último, la técnica aquí desarrollada puede ser aplicada para el estudio de los estados de resonancia de los sistemas cuánticos.

Referencias

- [1] Kurasov P. Distribution theory for discontinuous test functions and differential operators with generalized coefficients. *Journal of Math. Anal. and Appl.* 1996; 201: 297-323
- [2] Vladimirov V. S., *Equations of Mathematical Physics*, Cap. 5.
- [3] Mcquarrie Donal A., *The Kronig-Penney Model: A Single Lecture Illustrating the Band Structure of Solids*, *The Chemical Educator* 1,1,10,(1996).
- [4] James, H. M., *Energy Bands and Wave Function in Periodic Potentials*. *Phys. Rev.* 76, 1602(1949).
- [5] Hung-Sik C. and Paul R., *New formalism of the Kronig-Penney model with application to superlattices*. *Phys. Rev.* 36, 3237(1987).
- [6] Griffiths David J., *Introduction to quantum mechanics*, Cap. 5
- [7] Vladislav V. Kravchenko and R. Michael Porter, *Spectral parameter power series for Sturm-Liouville problems*, *Mathematical Methods in the Applied Sciences*. 2010, 33 459-468
- [8] F. A. Berezin and L. D. Faddeev. *Note on the Schrödinger equation with the singular potential*. *Math. USSR Dokl.* 137 Ž 1961 . , 1011|1014.
- [9] Yu. N. Demkov and V. N. Ostrovskii. *Zero-Range Potentials and Their Applications in Atomic Physics*. Leningrad Univ. Press, Leningrad, 1975 w in Russian x ; Plenum Press, New York/London, 1988 w English transl. x .
- [10] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Hoegh-Krohn, and H. Holden. *Solvable Models in Quantum Mechanics*. Springer-Verlag, Berlin, 1988.
- [11] F. A. B. Coutinho, Y. Nogami and J. Fernando Perez *Generalized point interactions in one-dimensional quantum mechanics*. *J. Phys. A: Math. Gen.* 30 (1997) 3937–3945. Printed in the UK
- [12] M. Gadella, M. L. Glasser, L. M. Nieto, *One Dimensional Models with a Singular Potential of the Type $-\alpha\delta(x) + \beta\delta'(x)$* , *Int J Theor Phys* 2011, 50 2144–2152.
- [13] M. Gadella, J. Negro, L. M Nieto, *Bound states and scattering coefficients of the $-\alpha\delta(x) + \beta\delta'(x)$ potential*, *Physics Letters A* 373 (2009) 1310–1313.
- [14] L. M Nieto, M. Gadella, J. Mateos Guilarte, J. M. Muñoz-Castañeda and C. Romaniega, *Towards Modelling QFT in Real Metamaterials: Singular Potentials and Self-Adjoint Extensions*, *Series: Journal of Physics: Conf. Series* 1234567890 839 (2017)
- [15] E. I. Ince, *Ordinary Differential Equations*, Cap. 10, pag. 231
- [16] M. Gadella, J. Negro, L. M, *The Infinite Square Well with a Singular Perturbation*. *Int J Theor Phys* (2011) 50:2191–2200.
- [17] Fatih Erman, Manuel Gadella, Seçil Tunali, Haydar Uncu, *A Singular One-Dimensional Bound State Problem and its Degeneracies*.