

Capítulo 3

Sistemas unidimensionales

3.1. Generalidades I

Para una partícula que se mueve en una dimensión bajo una fuerza conservativa en algún intervalo I el Hamiltoniano es

$$H = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{x})$$

donde el potencial está dado por la función V a valores reales. La ecuación de Schrödinger estacionaria, $H\psi = E\psi$, está asociada a la ecuación diferencial (ordinaria y de segundo orden):

$$(3.1) \quad -\frac{\hbar^2}{2m}f''(x) + V(x)f(x) = Ef(x) .$$

Equivalentemente

$$(3.2) \quad f''(x) = (U(x) - \epsilon)f(x)$$

con

$$U(x) = \frac{2m}{\hbar^2}V(x) , \quad \epsilon = \frac{2m}{\hbar^2}E ;$$

ambos con la dimensión de una longitud recíproca al cuadrado¹.

La cuestión de hacer de H un operador autoadjunto presenta sus problemas; hay que distinguir tres casos.

- $I = \mathbb{R}$: Sea \mathcal{D} el subespacio de las funciones f diferenciables, con derivadas f' absolutamente continuas y tales que $x \rightarrow f''(x) - U(x)f(x)$ es de módulo cuadrado integrable. Para $f \in \mathcal{D}$, ponemos

$$(Hf)(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}f''(x) + V(x)f(x) .$$

¹Cuando V o sea U tiene alguna longitud característica distinguida a , conviene pasar a la variable adimensional $\xi = x/a$ y entonces $\tilde{f}(\xi) = f(a\xi)$ satisface

$$\tilde{f}''(\xi) = a^2(U(a\xi) - \epsilon)\tilde{f}(\xi)$$

y tanto $\tilde{U}(\xi) = a^2U(a\xi)$ como $\tilde{\epsilon} = a^2\epsilon$ no tienen dimensión.

■ $I = [a, \infty)$ o $I = (-\infty, a]$ con a finito: FALTA

■ $I = [a, b]$ con $a < b$ ambos finitos: FALTA

!!!!!! Hier fehlt das ganze Theater über die Selbstadjungiertheit von H
Sea

$$V_o = \inf_x V(x) ;$$

si $f \in \mathcal{D}(H)$ y $\|f\| = 1$, entonces, por (??), cuando V_o es finito,

$$\begin{aligned} \langle f, Hf \rangle &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_I |f'(x)|^2 dx + \int_I V(x) |f(x)|^2 dx \\ &= V_o + \frac{\hbar^2}{2m} \int_I |f'(x)|^2 dx + \int_I (V(x) - V_o) |f(x)|^2 dx . \end{aligned}$$

La segunda integral no es negativa y la primera es estrictamente positiva pues, si $|f'(x)| = 0$ entonces $f = \text{const.}$ y la condición de contorno o la integrabilidad implican que $f \equiv 0$ lo que contradice $\|f\| = 1$. Luego,

$$\langle f, Hf \rangle > V_o .$$

En particular, si E es autovalor de H , entonces $E = \langle f, Hf \rangle$ para algún autovector unitario f y por ende $E > V_o$. Se tiene el resultado general

$$\sigma(H) \subset [V_o, \infty) .$$

En efecto, si $E \in \sigma(H)$, entonces existe una sucesión $\{f_n : n = 1, 2, \dots\}$ con $\|f_n\| = 1$ y $\lim_{n \rightarrow \infty} \|Hf_n - Ef_n\| = 0$. Luego, con la desigualdad de Cauchy-Schwarz,

$$|\langle f_n, Hf_n \rangle - E| = |\langle f_n, Hf_n - Ef_n \rangle| \leq \|Hf_n - Ef_n\| ,$$

y entonces , usando la desigualdad anterior para valores esperados²

$$E = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle f_n, Hf_n \rangle \geq V_o ;$$

notese que si bien, como vimos, V_o no puede ser autovalor –la partícula debería estar quieta en el mínimo del potencial lo que es imposible por la relación de incerteza de Heisenberg– nada impide que $V_o \in \sigma(H)$.

Recordamos que el Wronskiano de dos funciones f y g es

$$W(f, g)(x) = f(x)g'(x) - f'(x)g(x) ,$$

y que la función $x \mapsto W(f, g)(x)$ se anula idénticamente si f y g son linealmente dependientes³.

²Notese, que si $x_n > 0$, solo se puede deducir que $\lim_n x_n \geq 0$.

³Pero no es cierto que si W se anula entonces f y g son linealmente dependientes, salvo cuando ambas funciones son soluciones de la misma ecuación diferencial homogénea de segundo orden.

Recordamos la densidad de corriente de probabilidad local asociada con una función f ,

$$j_f(x) = \frac{-i\hbar}{2m}(\overline{f(x)}f'(x) - \overline{f'(x)}f(x))$$

y observamos la identidad

$$j_f = \frac{-i\hbar}{2m}W(\bar{f}, f).$$

Obsérvese que j_f se anula si f toma valores reales o puramente imaginarios.

Si f y g son soluciones de (3.1) al mismo valor de E , entonces

$$(W(f, g))' = ((fg' - f'g)') = fg'' - f''g = f((U - \epsilon)g) - (U - \epsilon)fg = 0,$$

o sea que

la función $W(f, g)$ es constante para dos soluciones de (3.1) al mismo E .

En particular si $Hf = Ef$ y $Hg = Eg$, tenemos $W(f, g) = \text{const.}$; pero, tomando el límite $x \rightarrow \infty$ en el caso $I = \mathbb{R}$, o evaluando en un punto del borde en los otros casos, obtenemos $W(f, g) = 0$ y por ende f y g son linealmente dependientes. En definitiva, el autoespacio $\mathcal{E}_H(E)$ asociado tiene dimensión 1, i.e. el autovalor E es simple o no degenerado.

Las soluciones de (3.1) para E real pueden siempre elegirse a valores reales. Esto se desprende de que tanto $V(x)$ como E y por ende tanto $U(x)$ como ϵ son reales y si f es solución entonces \bar{f} también lo es y, por ende, $f + \bar{f}$ es solución.

Después de este interludio sobre el Wronskiano, volvemos al problema del espectro de H . La teoría de las ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden nos dice que bajo alguna suposición sobre V , por ejemplo que V sea continua a trozos, (3.2) admite *dos soluciones linealmente independientes cualquiera sea el número real ϵ* . ¿Como decidimos cuales son los valores de ϵ correspondientes a valores espectrales de H ? Dado E , o sea ϵ , hay dos alternativas:

1. Hay una solución f de (3.2) que pertenece al dominio de definición de H y es por ende un autovector al autovalor E , $Hf = Ef$. En tal caso, cualquier otra solución g linealmente independiente de (3.2) no pertenece al dominio de definición de H . Los autovalores de H , si existen, son simples.
2. Toda solución de (3.2) no pertenece al dominio de definición de H ; entonces E no es autovalor de H y se tienen la siguientes alternativas en los distintos casos para I :

FALTA todo esto !!

Hemos obtenido entonces cierta información sobre donde está el espectro y también un procedimiento para reducir el problema de encontrarlo al problema de discutir las soluciones de la ecuación diferencial (3.2).

3.1.1. La aproximación WKB

Sea

$$k(x) = \begin{cases} +\sqrt{U(x) - \epsilon} & , \quad \text{si } U(x) \geq \epsilon \\ +i\sqrt{\epsilon - U(x)} & , \quad \text{si } U(x) < \epsilon \end{cases} .$$

Si

$$f(x) = \exp(\sigma(x))$$

la ecuación diferencial (3.2) para f es equivalente a la ecuación diferencial no lineal

$$(3.3) \quad (\sigma')^2 = k^2 - \sigma''$$

para σ . La idea es que si la segunda derivada σ'' es pequeña podemos aproximar (3.3) por

$$k^2 = (\sigma')^2$$

cuya soluciones son

$$\sigma_{\pm}^{(0)}(x) = \alpha \pm \int_{x_0}^x k(y) dy .$$

¡Y podemos iterar!

$$(\sigma^{(1)})' = \pm \sqrt{k^2 - (\sigma_{\pm}^{(0)})''} , \quad n = 1, 2, \dots ;$$

cuyas soluciones son

$$\sigma_{\pm}^{(1)}(x) = \alpha \pm \int_{x_0}^x \sqrt{k^2(y) - (\sigma_{\pm}^{(0)})''(y)} dy = \alpha \pm \int_{x_0}^x \sqrt{k(y)^2 \mp k'(y)} dy .$$

La segunda derivada de esto es

$$(\sigma_{\pm}^{(1)})'' = \pm \frac{2kk' \mp k''}{2\sqrt{k^2 \mp k'}} = \pm \frac{4k^3U' \mp 2k^2U'' \pm (U')^2}{4k^{5/2}\sqrt{4k^3 \mp 2U'}} ;$$

y si

$$(3.4) \quad \left| \frac{2kk' \mp k''}{2\sqrt{k^2 \mp k'}} - k' \right| \ll |k^2 - k'|$$

entonces,

$$(3.5) \quad f_{\epsilon}(x) \approx A \exp \left(- \int_{x_0}^x \sqrt{k^2(y) + k'(y)} dy \right) + B \exp \left(\int_{x_0}^x \sqrt{k^2(y) - k'(y)} dy \right)$$

será una aproximación para la solución de (3.2). Esta aproximación se conoce con el nombre de WKB (Wentzel, Kramers, Brillouin). La iteración puede continuarse y el análisis de la bondad de la aproximación conduce a resultados interesantes.

3.1.2. Estructura cualitativa del espectro en el caso $I = \mathbb{R}$ cuando el potencial tiene asíntotas

Volvemos ahora al caso $I = \mathbb{R}$. Suponga ahora que los límites

$$\lim_{x \rightarrow \infty} V(x) = V_{\pm}$$

existen como números finitos o infinitos y sean $U_{\pm} = 2m\hbar^{-2}V_{\pm}$. En este caso, se obtiene una descripción cualitativa del espectro en términos de los tres números V_o , $\min\{V_-, V_+\}$ y $\max\{V_-, V_+\}$:

- A. Los autovalores si existen están en el intervalo $(V_o, \min\{V_-, V_+\})$;
- B. El intervalo $[\min\{V_-, V_+\}, \infty)$ está en el espectro y no contiene autovalores con la posible excepción de $\min\{V_-, V_+\}$ que puede ser autovalor;
- C. Para $E \in [\min\{V_-, V_+\}, \max\{V_-, V_+\})$, (3.1) admite una sola solución polinomialmente acotada; para $E \in [\max\{V_-, V_+\}, \infty)$ hay dos soluciones polinomialmente acotadas de (3.1).

Para obtener estos resultados se necesita de alguna suposición sobre el potencial V . La hipótesis sobre V discutida en el contexto del problema de hacer de H un operador autoadjunto, mas la condición de que $|V(x)|$ no crezca mas rápido que una potencia de $|x|$ para $|x| \rightarrow \infty$ alcanzan. La discusión que sigue no constituye una prueba rigurosa del resultado pero si un fuerte argumento a favor.

Supongase que V_+ luego U_+ son finitos. Entonces, si f_{ϵ} es solución, se tiene

$$f_{\epsilon}''(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} (U_+ - \epsilon)f_{\epsilon}(x),$$

luego, suponiendo que el comportamiento asintótico de f_{ϵ} es el de la solución de la ec. asintótica $h'' = (U_+ - \epsilon)h$, tendremos

$$f_{\epsilon}(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \begin{cases} A \exp(\sqrt{U_+ - \epsilon}x) + B \exp(-\sqrt{U_+ - \epsilon}x) & , \text{ si la raíz no se anula} \\ Ax + B & , \text{ si } \epsilon = U_+ \end{cases},$$

con ciertas constantes A y B que dependen de f_{ϵ} . Debemos distinguir los casos $U_+ \geq \epsilon$ y $U_+ < \epsilon$. Con $k_+ = \sqrt{|U_+ - \epsilon|}$, tenemos

$$f_{\epsilon}(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \begin{cases} A_+ e^{ik_+x} + B_+ e^{-ik_+x} & , \text{ si } \epsilon > U_+ \\ A_+ x + B_+ & , \text{ si } \epsilon = U_+ \\ A_+ e^{-k_+x} + B_+ e^{k_+x} & , \text{ si } \epsilon < U_+ \end{cases}.$$

Luego, f_{ϵ} es polinomialmente acotada para $x \rightarrow \infty$ salvo en el caso $\epsilon < U_+$ cuando la correspondiente constante B_+ no es nula.

Analogamente, si V_- (o sea U_-) es finito tenemos

$$f_\epsilon(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} \begin{cases} A_-^{ik_-x} + B_- e^{-ik_-x} & , \text{ si } \epsilon > U_- \\ A_- x + B_- & , \text{ si } \epsilon = U_- \\ A_- e^{k_-x} + B_- e^{-k_-x} & , \text{ si } \epsilon < U_- \end{cases} ;$$

y f_ϵ es polinomialmente acotada para $x \rightarrow -\infty$ salvo en el caso $\epsilon < U_-$ cuando la correspondiente constante B_- no se anula.

Luego, en el caso donde tanto V_+ como V_- son finitos, tenemos:

- Si $E \geq \max\{V_+, V_-\}$, o sea $\epsilon \geq \max\{U_+, U_-\}$, cualquier solución de (3.1) es polinomialmente acotada pero no de módulo cuadrado integrable y hay dos soluciones linealmente independientes.
- Si $\min\{V_+, V_-\} \leq E < \max\{V_+, V_-\}$, o sea $\min\{U_+, U_-\} \leq \epsilon < \max\{U_+, U_-\}$, una solución f_ϵ de (3.1) es polinomialmente acotada solamente si: $B_+ = 0$ para el caso $V_+ > V_-$ y $B_- = 0$ para el caso $V_- > V_+$. Veamos que hay siempre una y solo una solución de este tipo concretamente para el caso $V_+ > V_-$ (el otro es análogo). Tenemos dos soluciones f_ϵ y g_ϵ linealmente independientes y por ende $W(f_\epsilon, g_\epsilon) \neq 0$. Ahora,

$$f_\epsilon(x) \asymp \begin{cases} A_+ e^{-k_+x} + B_+ e^{k_+x} & , \text{ para } x \rightarrow \infty \\ A_- x + B_- & , \text{ para } x \rightarrow -\infty \text{ cuando } k_- = 0 \\ A_- e^{ik_-x} + B_- e^{-ik_-x} & , \text{ para } x \rightarrow -\infty \text{ cuando } k_- > 0 \end{cases} ;$$

$$g_\epsilon(x) \asymp \begin{cases} \alpha_+ e^{-k_+x} + \beta_+ e^{k_+x} & , \text{ para } x \rightarrow \infty \\ \alpha_- x + \beta_- & , \text{ para } x \rightarrow -\infty \text{ cuando } k_- = 0 \\ \alpha_- e^{ik_-x} + \beta_- e^{-ik_-x} & , \text{ para } x \rightarrow -\infty \end{cases} .$$

Podemos calcular el Wronskiano de estas soluciones, recordando que es constante,

$$0 \neq W(f_\epsilon, g_\epsilon) = \lim_{x \rightarrow \infty} W(f_\epsilon, g_\epsilon)(x) = 2k_+(A_+\beta_+ - B_+\alpha_+) .$$

La solución $h_\epsilon = \beta_+ f_\epsilon - B_+ g_\epsilon$ no es nula pues B_+ y β_+ no pueden ser simultáneamente nulos y satisface entonces

$$h_\epsilon(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \underbrace{(\beta_+ A_+ - B_+ \alpha_+)}_{=C \neq 0} e^{-k_+x}$$

y es polinomialmente acotada. Observando que

$$W(h_\epsilon, f_\epsilon) = \lim_{x \rightarrow \infty} W(h_\epsilon, f_\epsilon)(x) = 2k_+ B_+ C$$

para cualquier solución f_ϵ , deducimos que si f_ϵ es polinomialmente acotada, o sea $B_+ = 0$ entonces h_ϵ y f_ϵ son linealmente dependientes ya que su Wronskiano se anula.

- Si $E < \min\{V_+, V_-\}$, o sea $\epsilon < \min\{U_+, U_-\}$, una solución f_ϵ de (3.1) es polinomialmente acotada si $B_+ = B_- = 0$ y en tal caso es de módulo cuadrado integrable. Pero B_+ y B_- no son independientes y la condición $B_+ = B_-$ define los autovalores.

¿ Que sucede cuando alguno, o ambos, de los números V_\pm no es finito? La ecuación diferencial asintótica $h'' = (U_\pm - \epsilon)h$ es inservible.

Para discutir estos casos, consideramos la aproximación WKB. Pongamos

$$k(x) = \sqrt{U(x) - \epsilon} .$$

Sea $V_+ = \infty$; suponemos que $U' = \mathcal{O}(|U|^\alpha)$ y $U'' = \mathcal{O}(|U|^\beta)$ para $x \rightarrow \infty$ con $\alpha < 3/2$ y $\beta < 1$ ⁴. Entonces, el análisis de (3.4), indica que la aproximación WKB (3.5) es buena para $x \rightarrow \infty$

$$f_\epsilon(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} A_+ \exp\left(-\int_{x_0}^x \sqrt{k^2(y) + k'(y)} dy\right) + B_+ \exp\left(\int_{x_0}^x \sqrt{k^2(y) - k'(y)} dy\right) ,$$

y esto será polinomialmente acotado si y solo si $B_+ = 0$. El caso $V_- = \infty$ es análogo, y esto nos indica que si uno de los dos números V_\pm es $+\infty$ pero el otro no, entonces habrá solo una solución polinomialmente acotada de (3.1). Cuando $V_\pm = \infty$, la condición que ambas constantes B_+ y B_- sean nulas conduce a la condición para los autovalores.

Si $V_+ = -\infty$ con las mismas condiciones sobre el crecimiento de U' y U'' que en el caso $V_+ = \infty$, el análisis de (3.4) indica que la aproximación WKB (3.5) es buena para $x \rightarrow \infty$

$$f_\epsilon(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} A_+ \exp\left(i \int_{x_0}^x \sqrt{-k^2(y) - k'(y)} dy\right) + B_+ \exp\left(-i \int_{x_0}^x \sqrt{-k^2(y) + k'(y)} dy\right) ,$$

y esto es polinomialmente acotado cualesquiera que sean A_+ y B_+ .

Esto completa la fundamentación de los resultados A. B. y C.

3.2. Un ejemplo: potencial muy singular

Consideramos el caso de una partícula confinada a un intervalo $[-L, L]$ con un potencial terriblemente singular

$$V(x) = \alpha\delta(x) , \quad -L \leq x \leq L .$$

Formalmente la ecuación de Schrödinger estacionaria es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \alpha\delta(x)\psi(x) = E\psi(x) ,$$

pero no esta para nada claro como ha de interpretarse esto. Fuera del punto singular $x = 0$ tenemos

$$(3.6) \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E\psi(x) , \quad 0 \neq x \in [-L, L] ,$$

⁴Note que $U(x) \asymp x^p$ con $p > 0$ cumple las condiciones.

con lo que ψ deberá ser una función dos veces diferenciable en todo el intervalo salvo en $x = 0$. Intentemos darle un significado al operador

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \alpha\delta(x) .$$

Consideremos funciones f a valores complejos definidas sobre $[-L, L]$ que sean dos veces diferenciables en el intervalo $[-L, L]$ salvo en el punto $x = 0$ pero que sean continuas en ese punto. Es claro que estas funciones forman un subespacio denso de las funciones de módulo cuadrado integrable sobre $[-L, L]$. Como $\delta(x)f(x) = \delta(x)f(0)$ no es una función, no podemos definir el operador H directamente. Si tomamos el producto escalar de Hf con una función g continua, obtenemos una expresión bien definida a usar la propiedad definitoria de “ δ ”

$$\begin{aligned} \langle g, Hf \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-L}^L \overline{g(x)} f''(x) dx + \alpha \int_{-L}^L \overline{g(x)} f(x) \delta(x) dx \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-L}^L \overline{g(x)} f''(x) dx + \alpha \overline{g(0)} f(0) . \end{aligned}$$

Si g es además dos veces diferenciable salvo en $x = 0$, podemos usar la fórmula de integración parcial para obtener

$$\begin{aligned} \langle g, Hf \rangle &= \alpha \overline{g(0)} f(0) - \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-L}^L \overline{g(x)} f''(x) dx \\ &= \alpha \overline{g(0)} f(0) - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\overline{g(x)} f'(x) \right]_{-L}^L + \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-L}^L \overline{g'(x)} f'(x) dx \\ &= \alpha \overline{g(0)} f(0) - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\overline{g(x)} f'(x) - \overline{g'(x)} f(x) \right]_{-L}^L - \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-L}^L \overline{g''(x)} f(x) dx \\ &= \langle Hg, f \rangle - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\overline{g(x)} f'(x) - \overline{g'(x)} f(x) \right]_{-L}^L . \end{aligned}$$

Para que el hamiltoniano H resulte autoadjunto es preciso que el último sumando que involucra los valores en los bordes $\pm L$ se anule.

Si ψ es solución, i.e. $H\psi = E\psi$, entonces, con $\tilde{\psi}(x) = \psi(-x)$, tenemos

$$\langle g, H\tilde{\psi} \rangle = \alpha \overline{g(0)} \psi(0) - \frac{\hbar^2}{2m} \langle g'', \tilde{\psi} \rangle = \alpha \overline{g(0)} \psi(0) - \frac{\hbar^2}{2m} \langle \tilde{g}'', \psi \rangle = \langle \tilde{g}, H\psi \rangle = E \langle \tilde{g}, \psi \rangle = E \langle g, \tilde{\psi} \rangle ,$$

y por ende $H\tilde{\psi} = E\tilde{\psi}$. Entonces $\psi_{\pm} = \psi \pm \tilde{\psi}$ son soluciones. Pero $\tilde{\psi}_{\pm} = \pm\psi_{\pm}$, con lo cual podemos siempre suponer, elegir o buscar –dependiendo de que estamos haciendo– soluciones de paridad definida, i.e., pares o impares.

- a) La función de onda ψ debe ser continua, y diferenciable salvo en el punto donde está la singularidad. Integrando la ec. de Schrödinger

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

en el intervalo $[-\epsilon, \epsilon]$,

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2m} (\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)) &= E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi(x) dx - \alpha \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \delta(x) \psi(x) dx \\ &= -\alpha \psi(0) + E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi(x) dx, \end{aligned}$$

y tomando el límite $\epsilon \rightarrow 0$,

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0).$$

b) Las soluciones asociadas a valores espectrales de H deben: (1) ser continuas en el intervalo $[-L, L]$; (2) anularse en los extremos; y (3) continuamente diferenciables en este intervalo salvo en $x = 0$ donde deben satisfacer

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0).$$

c) En particular, las soluciones impares deben tener derivada continua también en $x = 0$.

Con $k = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$, las soluciones generales de (3.6) son

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cos(kx) + B \sin(kx) & , \quad \text{si } E > 0 \\ A + Bx & , \quad \text{si } E = 0 \\ A \cosh(kx) + B \sinh(kx) & , \quad \text{si } E < 0 \end{cases},$$

tanto para $x \in (0, L]$ como para $x \in [-L, 0)$ donde las constantes para $x \in (0, L]$ y aquellas para $x \in [-L, 0)$ deben elegirse de manera que se satisfagan las condiciones (1)-(3).

Para las soluciones impares, se tiene ya que estas son continuamente diferenciables

$$\psi(x) = \begin{cases} B \sin(kx) & , \quad \text{si } E > 0 \\ Bx & , \quad \text{si } E = 0 \\ B \sinh(kx) & , \quad \text{si } E < 0 \end{cases};$$

Si $E \leq 0$, no se pueden cumplir las condiciones de contorno $\psi(\pm L) = 0$ salvo cuando $\psi \equiv 0$.

Si $E > 0$ debemos tener

$$\psi(\pm L) = B \sin(\pm kL) = 0$$

de donde

$$k = \pm n\pi/L, \quad \text{con } n \text{ un número natural.}$$

El caso $n = 0$ conduce a la función nula y para $n > 0$, los dos posible signos conducen a funciones linealmente dependientes. Luego, las autofunciones impares y sus autovalores asociados son

$$\psi_n^{(-)}(x) = A \sin(n\pi x/L), \quad E_n^{(-)} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Para las soluciones pares tendremos,

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cos(kx) + B \sin(k|x|) & , \text{ si } E > 0 \\ A + B|x| & , \text{ si } E = 0 \\ A \cosh(kx) + B \sinh(k|x|) & , \text{ si } E < 0 \end{cases} .$$

La derivada correspondiente para $x \neq 0$ es –usando $\text{sgn}(x) = x/|x|$ para $x \neq 0$ –

$$\psi'(x) = \begin{cases} Ak \sin(kx) + Bk \text{sgn}(x) \cos(kx) & , \text{ si } E > 0 \\ B \text{sgn}(x) & , \text{ si } E = 0 \\ Ak \sinh(kx) + Bk \text{sgn}(x) \cosh(kx) & , \text{ si } E < 0 \end{cases} ;$$

con lo cual la condición de discontinuidad (3) de las derivadas en $x = 0$ es:

$$\frac{2m\alpha}{\hbar^2} A = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0) = \psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \begin{cases} 2Bk & , \text{ si } E > 0 \\ 2B & , \text{ si } E = 0 \\ 2Bk & , \text{ si } E < 0 \end{cases} ;$$

por lo tanto

$$\psi(x) = A \begin{cases} \cos(kx) + m\alpha\hbar^{-2}k^{-1} \sin(k|x|) & , \text{ si } E > 0 \\ 1 + m\alpha\hbar^{-2}|x| & , \text{ si } E = 0 \\ \cosh(kx) + m\alpha\hbar^{-2}k^{-1} \sinh(k|x|) & , \text{ si } E < 0 \end{cases} .$$

La condición de contorno (2) impone

$$0 = \begin{cases} \cos(kL) + m\alpha\hbar^{-2}k^{-1} \sin(kL) & , \text{ si } E > 0 \\ 1 + m\alpha\hbar^{-2}L & , \text{ si } E = 0 \\ \cosh(kL) + m\alpha\hbar^{-2}k^{-1} \sinh(kL) & , \text{ si } E < 0 \end{cases} .$$

En términos de los parámetros adimensionales

$$\kappa = kL , \quad \eta = \frac{m\alpha L}{\hbar^2} ,$$

las condiciones para las autoenergías, desglosadas en los tres casos, son:

- *Autoenergías positivas:*

$$(3.7) \quad 0 < E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2mL^2} \text{ es autoenergía si y solo si } -\eta^{-1}\kappa = \tan(\kappa) ;$$

Existen siempre cualquiera sea $\alpha \neq 0$ infinitas autoenergías positivas $E_n^{(+)}$ (enumeradas con $n = 0, 1, 2$ de manera creciente) asociadas a las infinitas raíces positivas κ_n (enumeradas con $n = 0, 1, 2, \dots$ de manera creciente) de $-\eta^{-1}\kappa = \tan(\kappa)$; las raíces negativas conducen a las mismas autoenergías y autofunciones con lo cual las $E_n^{(+)}$ son no degeneradas. Las autofunciones correspondientes son

$$\psi_n^{(+)}(x) = A \left(\cos(\kappa_n x/L) + \eta \kappa_n^{-1} \sin(\kappa_n |x|/L) \right) = \frac{A}{\sin(\kappa_n)} \sin(\kappa_n(1 - |x|/L)) .$$

Un análisis del gráfico de las funciones $\kappa \mapsto -\kappa/\eta$ y $\kappa \mapsto \tan(\kappa)$ muestra que:

- en el caso $\alpha > 0$, $(2n + 1)\pi/2 < \kappa_n < (n + 1)\pi$ con lo cual $E_n^{(+)} < E_{n+1}^{(-)} < E_{n+1}^{(+)}$ para todo $n = 0, 1, 2, \dots$;
- en el caso $\alpha < 0$, $(n + 1)\pi < \kappa_n < (2(n + 1) + 1)\pi/2$ para todo $n = 0, 1, 2, \dots$, y entonces $E_{n+1}^{(-)} < E_n^{(+)} < E_{n+2}^{(-)}$;

luego, para $\alpha > 0$, $E_0^{(+)}$ es la energía fundamental; mientras que para $\alpha < 0$, $E_1^{(-)} < E_0^{(+)}$.

■ *Auotenergía nula:*

$$(3.8) \quad E = 0 \text{ es autoenergía si y solo si } \eta = -1 \text{ (en particular } \alpha < 0 \text{)} ;$$

luego $E = 0$ aparece solo para $\eta = -1$ y es simple; en tal caso es la energía fundamental y la autofunción asociada es

$$\psi_o(x) = A(1 - |x|/L) .$$

■ *Auotenergías negativas:*

$$(3.9) \quad 0 > E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2mL^2} \text{ es autoenergía si y solo si } -\eta^{-1} \kappa = \tanh(\kappa) .$$

No las hay si $\alpha \geq 0$ (la pendiente de la recta $\kappa \mapsto -\kappa/\eta$ es negativa). Para $\alpha < 0$ tampoco hay autoenergías negativas para $|\eta| \leq 1$ (la pendiente de la recta $\kappa \mapsto -\eta/\kappa$ es mayor que 1); si $|\eta| > 1$ entonces la pendiente de la recta $\kappa \mapsto -\eta/\kappa$ es positiva y menor a 1 con lo cual corta a $\kappa \mapsto \tanh(\kappa)$ en dos puntos simétricos $\pm\kappa_{-1}$ que corresponden a la misma autoenergía negativa $E_{-1}^{(+)}$ que es simple y la energía fundamental del sistema. La autofunción asociada es

$$\psi_{-1}(x) = A (\cosh(\kappa_{-1}x/L) + \eta\kappa_{-1}^{-1} \sinh(\kappa_{-1}|x|/L)) = \frac{A}{\sinh(\kappa_{-1})} \sinh(\kappa_{-1}(1 - |x|/L)) .$$

Del gráfico es inmediato que $\kappa_{-1} < |\eta|$ de donde $E_{-1}^{(+)} > -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$.

Si $\alpha = 0$ entonces no hay autoenergías no-positivas y, como $\eta = 0$, la condición para las autoenergías positivas asociadas a autofunciones pares es -viz. (3.7)

$$\cos(kL) = 0 ,$$

luego $k = (2n + 1)\pi/(2L)$ con n entero. Pero n y $-n - 1$ conducen a la misma autofunción y autoenergía $E_n^{(+)} = \frac{\hbar^2(n+2^{-1})^2\pi^2}{2mL^2}$.

En resumen, el espectro del Hamiltoniano es

- puramente discreto, simple e igual a $\{E_0^{(+)}, E_1^{(-)}, E_1^{(+)}, E_2^{(-)}, \dots\} \subset (0, \infty)$ si $\alpha \geq 0$. La energía fundamental satisface $E_0^{(+)} \geq \frac{\hbar^2\pi^2}{8mL^2}$ con igualdad si y solo si $\alpha = 0$. Las autoenergías “impares” $E_n^{(-)}$ son independientes de α y las autoenergías “pares” $E_n^{(+)}$ crecen con α .

- puramente discreto, simple y dado por $\{E_{-1}^{(+)}, E_1^{(-)}, E_0^{(+)}, E_2^{(-)}, E_1^{(+)}, \dots\}$ para $\alpha < 0$. La energía fundamental satisface $-\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} = -\frac{\hbar^2\eta^2}{2mL^2} < E_{-1}^{(+)} \leq 0$ con igualdad si y solo si $\eta = -1$. La dependencia de α de las autoenergías es idéntica a la del caso $\alpha \geq 0$.

3.3. Transmisión y reflexión

Consideramos el caso para el cual los dos números (que, se supone, existen)

$$(3.10) \quad V_{\pm} = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x)$$

son finitos. Entonces, el espectro del Hamiltoniano asociado con (3.1) tiene parte continua contenida en el intervalo $[\min\{V_-, V_+\}, \infty)$, además los valores espectrales en el intervalo

$[\min\{V_-, V_+\}, \max\{V_-, V_+\})$ son simples mientras aquellos en $(\max\{V_-, V_+\}, \infty)$ son dobles. Las soluciones f_{ϵ} de (3.2) asociadas con estos valores de ϵ no son de módulo cuadrado integrable, pero $f_{\epsilon}(x, t) = f_{\epsilon}(x)e^{-i\hbar\epsilon t/(2m)}$ son soluciones (estacionarias) de la ecuación de Schrödinger

$$(3.11) \quad i\hbar \frac{df}{dt}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} f''(x, t) + V(x)f(x, t).$$

Si consideramos una superposición de estas soluciones

$$\psi(x, t) = \int_{\min\{U_-, U_+\}}^{\infty} \rho(\epsilon) f_{\epsilon}(x, t) d\epsilon$$

entonces obtenemos una solución de (3.11) y bajo condiciones sobre la función ρ la función $x \mapsto \psi(x, t)$ será de módulo cuadrado integrable para todo t . En lo que sigue se estudian las soluciones f_{ϵ} ; se introducen los coeficientes de reflexión y transmisión y se discuten sus propiedades genéricas ejemplificandolas en casos simples.

3.3.1. Transmisión y reflexión en el escalón.

Para un escalón de potencial $V(x) = 0$ para $x < 0$ y $V(x) = V > 0$ para $x > 0$ se tiene $U_- = 0$ y $U_+ = \frac{2m}{\hbar^2}V \stackrel{def}{=} U$. La aplicación del método del ejemplo (apartado 2.) permite encontrar las soluciones de (3.2) asociadas a valores de ϵ en $(0, \infty)$, que tiene la propiedad de ser polinomialmente acotadas para $|x| \rightarrow \infty$. Estas son:

1. $\epsilon > U$: Con $\kappa = \sqrt{\frac{\epsilon}{|\epsilon-U|}}$, (observe que $\kappa > 1$),

$$f_{\epsilon}^{(-)}(x) = \begin{cases} e^{i\sqrt{\epsilon}x} + \frac{\kappa-1}{1+\kappa}e^{-i\sqrt{\epsilon}x} & , \text{ para } x \leq 0 \\ \frac{2\kappa}{1+\kappa}e^{i\sqrt{\epsilon-U}x} & , \text{ para } x \geq 0 \end{cases},$$

$$f_{\epsilon}^{(+)}(x) = \begin{cases} \frac{2}{1+\kappa}e^{-i\sqrt{\epsilon}x} & , \text{ para } x \leq 0 \\ e^{-i\sqrt{\epsilon-U}x} - \frac{\kappa-1}{1+\kappa}e^{i\sqrt{\epsilon-U}x} & , \text{ para } x \geq 0 \end{cases};$$

son dos soluciones acotadas linealmente independientes. Se tiene entonces

$$f_{\epsilon}^{(-)}(x, t) = \begin{cases} e^{i(\sqrt{\epsilon}x - \omega t)} + \frac{\kappa - 1}{1 + \kappa} e^{-i(\sqrt{\epsilon}x + \omega t)} & , \text{ para } x \leq 0 \\ \frac{2\kappa}{1 + \kappa} e^{i(\sqrt{\epsilon - U}x - \omega t)} & , \text{ para } x \geq 0 \end{cases} ,$$

con la frecuencia angular $\omega = \hbar\epsilon/(2m)$. Para $x \leq 0$ $f_{\epsilon}^{(-)}(x, t)$ es superposición de una onda incidente desde la izquierda $e^{i(\sqrt{\epsilon}x - \omega t)}$ y una onda reflejada hacia la izquierda $e^{-i(\sqrt{\epsilon}x + \omega t)}$ de amplitud $\frac{\kappa - 1}{1 + \kappa}$; para $x \geq 0$, $f_{\epsilon}^{(-)}(x, t)$ es una onda transmitida hacia la derecha. Una interpretación análoga se puede hacer para $f_{\epsilon}^{(+)}$. Se tiene

$$|f_{\epsilon}^{(-)}(x, t)|^2 = \begin{cases} 1 + \left(\frac{\kappa - 1}{1 + \kappa}\right)^2 + 2\frac{\kappa - 1}{1 + \kappa} \cos(2\sqrt{\epsilon}x) & , \text{ para } x \leq 0 \\ \frac{4\kappa^2}{(1 + \kappa)^2} & , \text{ para } x \geq 0 \end{cases} ,$$

la densidad de probabilidad local es independiente del tiempo, constante para $x \geq 0$, y periódica de período $\pi/\sqrt{\epsilon}$ para $x \leq 0$. Para la densidad de corriente de probabilidad local, $j_{\epsilon}^{(-)}(x, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(f_{\epsilon}^{(-)}(x, t)(f_{\epsilon}^{(-)})'(x, t))$, se obtiene, por un lado

$$j_{\epsilon}^{(-)}(x, t) = \frac{\hbar}{m} \sqrt{\epsilon} \left(1 - \left(\frac{\kappa - 1}{1 + \kappa} \right)^2 \right) , \text{ para } x \leq 0$$

y por el otro lado,

$$j_{\epsilon}^{(-)}(x, t) = \frac{\hbar}{m} \sqrt{\epsilon - U} \frac{4\kappa^2}{(1 + \kappa)^2} , \text{ para } x \geq 0 ;$$

el valor común, que no depende ni de t (como para cualquier solución estacionaria) ni de x , se anota $j_{\epsilon}^{(-)}$. Notese que

$$j_{\epsilon}^{(-)} = j_{\epsilon}^{(-,in)} + j_{\epsilon}^{(-,refl)} , \text{ para } x \leq 0 ,$$

donde

$$j_{\epsilon}^{(-,in)} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(e^{-i\sqrt{\epsilon}d} \frac{d e^{i\sqrt{\epsilon}x}}{dx} \right) = \frac{\hbar\sqrt{\epsilon}}{m}$$

y

$$\begin{aligned} j_{\epsilon}^{(-,refl)} &= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\frac{\kappa - 1}{1 + \kappa} e^{i\sqrt{\epsilon}x} \frac{d}{dx} \left(\frac{\kappa - 1}{1 + \kappa} e^{-i\sqrt{\epsilon}x} \right) \right) \\ &= - \frac{\hbar\sqrt{\epsilon}(\kappa - 1)^2}{m(1 + \kappa)^2} \end{aligned}$$

son las densidades de corriente de probabilidad local para la ondas incidente y reflejada, respectivamente. Ambas son constantes.

El coeficiente de reflexión $R^{(-)}(\epsilon)$ se obtiene como cociente del flujo reflejado (i.e., negativo) para $x \leq 0$ y el flujo incidente (i.e., positivo) para $x \leq 0$; o sea

$$R^{(-)}(\epsilon) = \frac{|j_{\epsilon}^{(-,refl)}|}{|j_{\epsilon}^{(-,in)}|} = \left(\frac{\kappa - 1}{1 + \kappa} \right)^2$$

y es menor que 1 acercandose a 1 para $\epsilon \rightarrow U$ (o sea $\kappa \rightarrow \infty$) y a 0 para $\epsilon \rightarrow \infty$ (o sea $\kappa \rightarrow 1$).

El coeficiente de transmisión $T^{(-)}(\epsilon)$ es el cociente entre el flujo transmitido hacia la derecha (positivo y para $x \geq 0$) y el flujo incidente (positivo) desde la izquierda ($x \leq 0$); o sea

$$T^{(-)}(\epsilon) = \frac{|j_{\epsilon}^{(-)}(x \geq 0)|}{|j_{\epsilon}^{(-,in)}|} = \frac{|j_{\epsilon}^{(-)}|}{|j_{\epsilon}^{(-,in)}|} = \frac{4\kappa}{(1 + \kappa)^2},$$

es menor que 1 acercandose a 1 para $\epsilon \rightarrow \infty$ (o sea $\kappa \rightarrow 1$) y a 0 para $\epsilon \rightarrow U$ (o sea $\kappa \rightarrow \infty$). Se tiene

$$T^{(-)}(\epsilon) + R^{(-)}(\epsilon) = 1.$$

Un análisis análogo de la solución $f^{(+)}$ que corresponde a onda incidente desde la derecha, onda reflejada hacia la derecha y onda transmitida hacia la izquierda, permite definir los coeficientes de reflexión $R^{(+)}(\epsilon)$ y transmisión $T^{(+)}(\epsilon)$. Se obtiene

$$R^{(+)}(\epsilon) = R^{(-)}(\epsilon), \quad T^{(+)}(\epsilon) = T^{(-)}(\epsilon).$$

2. $\epsilon = U$:

$$f_{\epsilon}^{(-)}(x) = \begin{cases} \cos(\sqrt{\epsilon}x) & , \text{ para } x \leq 0 \\ 1 & , \text{ para } x \geq 0 \end{cases},$$

$$f_{\epsilon}^{(+)}(x) = \begin{cases} \sin(\sqrt{\epsilon}x) & , \text{ para } x \leq 0 \\ \sqrt{\epsilon}x & , \text{ para } x \geq 0 \end{cases};$$

son dos soluciones polinomialmente acotadas linealmente independientes. Podemos combinar linealmente estas soluciones para obtener la solución

$$f_{\epsilon}(x) = \begin{cases} e^{i\sqrt{\epsilon}x} + \alpha e^{-i\sqrt{\epsilon}x} & , \text{ para } x \leq 0 \\ 1 + \alpha + i\sqrt{\epsilon}x(1 - \alpha) & , \text{ para } x \geq 0 \end{cases},$$

que admite una interpretación similar a la de $f_{\epsilon}^{(-)}$ del caso anterior para $x \leq 0$. ¡Pero aquí no hay onda transmitida hacia la derecha! No obstante, como en el caso anterior, se calculan las densidades de corriente de probabilidad local y se obtiene

$$j_U^{(in)} = \hbar\sqrt{\epsilon}/m, \quad j_U^{(refl.)} = -\hbar\sqrt{\epsilon}|\alpha|^2/m, \quad j_U^{(trans)} = \hbar\sqrt{\epsilon}(1 - |\alpha|^2)/m.$$

Formalmente se tiene

$$R(U) = |\alpha|^2, \quad T(U) = 1 - |\alpha|^2$$

lo que depende de la amplitud α que es arbitraria; por ejemplo $R(U) > 1$ y $T(U) < 0$ son posibles. No tiene sentido interpretar esto en términos de reflexión/transmisión.

3. $0 < \epsilon < U$: (observe que ahora $0 < \kappa < \infty$)

$$f_{\epsilon}(x) = \begin{cases} \frac{\kappa-i}{2\kappa}e^{i\sqrt{\epsilon}x} + \frac{\kappa+i}{2\kappa}e^{-i\sqrt{\epsilon}x} = \cos(\sqrt{\epsilon}x) + \kappa^{-1}\sin(\sqrt{\epsilon}x) & , \text{ para } x \leq 0 \\ e^{-\sqrt{U-\epsilon}x} & , \text{ para } x \geq 0 \end{cases};$$

es la única solución polinomialmente acotada de (3.2). Tenemos

$$f_\epsilon(x, t) = e^{-i\omega t} f_\epsilon(x) = \begin{cases} \frac{\kappa-i}{2\kappa} e^{i(\sqrt{\epsilon}x-\omega t)} + \frac{\kappa+i}{2\kappa} e^{-i(\sqrt{\epsilon}x+\omega t)} & , \text{ para } x \leq 0 \\ e^{-\sqrt{U-\epsilon}x} e^{-i\omega t} & , \text{ para } x \geq 0 \end{cases} ,$$

con la frecuencia angular $\omega = \hbar\epsilon/(2m)$. Para la densidad de probabilidad local tenemos

$$|f_\epsilon(x, t)|^2 = \begin{cases} \left(\cos(\sqrt{\epsilon}x) + \frac{\sin(\sqrt{\epsilon}x)}{\kappa} \right)^2 & , \text{ para } x \leq 0 \\ e^{-2\sqrt{U-\epsilon}x} & , \text{ para } x \geq 0 \end{cases} .$$

Contrastando con la situación clásica análoga, la densidad de probabilidad para $x \geq 0$ no se anula; la partícula penetra en la región clásicamente prohibida.

Ya que $f_\epsilon(x, t) = e^{-i\omega t} f_\epsilon(x)$ y $f_\epsilon(x)$ es real, obtenemos

$$j_\epsilon(x, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\overline{f_\epsilon(x, t)} (f_\epsilon)'(x, t)) = 0 .$$

Si insistimos en ver a $f_\epsilon(x, t)$ para $x \leq 0$ como superposición de una onda incidente (desde la izquierda) y otra reflejada, tenemos

$$j_\epsilon^{(in)}(x, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\frac{\kappa+i}{2\kappa} e^{-i(\sqrt{\epsilon}x-\omega t)} \frac{d}{dx} \left(\frac{\kappa-i}{2\kappa} e^{i(\sqrt{\epsilon}x-\omega t)} \right) \right) = \frac{\hbar\sqrt{\epsilon}(1+\kappa^2)}{4m\kappa^2} ,$$

$$j_\epsilon^{(refl)}(x, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\frac{\kappa-i}{2\kappa} e^{i(\sqrt{\epsilon}x-\omega t)} \frac{d}{dx} \left(\frac{\kappa+i}{2\kappa} e^{-i(\sqrt{\epsilon}x-\omega t)} \right) \right) = - \frac{\hbar\sqrt{\epsilon}(1+\kappa^2)}{4m\kappa^2} ;$$

de donde el coeficiente de reflexión definido como cociente de los módulos de estas corrientes es 1. Aquí no hay onda transmitida y por ende el coeficiente de transmisión es nulo.

3.3.2. Transmisión y reflexión en general.

La discusión del caso general se hace accesible si suponemos que las soluciones f_ϵ de (3.2) son lo suficientemente regulares como para que su comportamiento asintótico este dado por las soluciones de la ecuación diferencial asintótica; o sea:

$$(3.12) \quad f_\epsilon(x) \asymp \begin{cases} f_\epsilon^{(-\infty)}(x) = Ae^{ik_-x} + Be^{-ik_-x} & , \text{ para } x \rightarrow -\infty \\ f_\epsilon^{(\infty)}(x) = Ce^{ik_+x} + De^{-ik_+x} & , \text{ para } x \rightarrow \infty \end{cases} ,$$

para $\epsilon > \max\{U_-, U_+\}$, con

$$k_\pm = \sqrt{\epsilon - U_\pm} .$$

En tal caso, la densidad de corriente de probabilidad $j_\epsilon(x, t)$ asociada con $f_\epsilon(x, t) = e^{-i\hbar\epsilon t/(2m)} f_\epsilon(x)$ es independiente del tiempo. Además, recordando el Wronskiano $W(f, g)$ de dos funciones; la relación

$$j_{f_\epsilon}(x, 0) = \frac{-i\hbar}{2m} \left(\overline{f_\epsilon(x)} f'_\epsilon(x) - \overline{f'_\epsilon(x)} f_\epsilon(x) \right) = \frac{-i\hbar}{2m} W(\overline{f_\epsilon}, f_\epsilon)(x);$$

el hecho de que $\overline{f_\epsilon}$ es solución de (3.2) y el hecho de que para dos soluciones de (3.2) el Wronskiano es constante; deducimos que

$$j_\epsilon(x, t) \text{ es constante.}$$

Esto nos permite obtener relaciones entre los coeficientes A, B, C y D calculando los valores asintóticos ($x \rightarrow \pm\infty$) del Wronskiano e igualandolos.

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} W(\overline{f_\epsilon}, f_\epsilon)(x) = \lim_{x \rightarrow -\infty} W(\overline{f_\epsilon^{(-\infty)}}, f_\epsilon^{(-\infty)})(x) = 2ik_-(|A|^2 - |B|^2),$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} W(\overline{f_\epsilon}, f_\epsilon)(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} W(\overline{f_\epsilon^{(\infty)}}, f_\epsilon^{(\infty)})(x) = 2ik_+(|C|^2 - |D|^2).$$

Luego,

$$(3.13) \quad k_-(|A|^2 - |B|^2) = k_+(|C|^2 - |D|^2);$$

además los flujos de probabilidad en $\pm\infty$ son

$$(3.14) \quad j_\epsilon(-\infty) = \underbrace{\frac{\hbar k_-}{m}|A|^2}_{\text{saliente}} + \underbrace{\frac{-\hbar k_-}{m}|B|^2}_{\text{entrante}},$$

$$(3.15) \quad j_\epsilon(\infty) = \underbrace{\frac{\hbar k_+}{m}|C|^2}_{\text{entrante}} + \underbrace{\frac{-\hbar k_+}{m}|D|^2}_{\text{saliente}}.$$

Notese que los coeficientes A, B, C y D además de satisfacer la relación (3.13) deben ser tales que f_ϵ es solución de (3.2).

Supongase que hay dos soluciones $f_\epsilon^{(\pm)}$ de (3.2) que son linealmente independientes y tales que

$$f_\epsilon^{(-)}(x) \asymp \begin{cases} A_- e^{ik_-x} + B_- e^{-ik_-x} & , \text{ para } x \rightarrow -\infty \\ C_- e^{ik_+x} & , \text{ para } x \rightarrow \infty \end{cases}, \text{ con } A_- \neq 0 \neq C_-;$$

$$f_\epsilon^{(+)}(x) \asymp \begin{cases} B_+ e^{-ik_-x} & , \text{ para } x \rightarrow -\infty \\ C_+ e^{ik_+x} + D_+ e^{-ik_+x} & , \text{ para } x \rightarrow \infty \end{cases}, \text{ con } B_+ \neq 0 \neq D_+.$$

Entonces los coeficientes de reflexión y transmisión asociados a $f_\epsilon^{(-)}$ son respectivamente (use las fórmulas (3.14) y (3.15))

$$R^{(-)}(f_\epsilon^{(-)}) = \frac{|\text{flujo entrante a } -\infty|}{|\text{flujo saliente de } -\infty|} = \frac{|B_-|^2}{|A_-|^2},$$

y

$$T^{(-,+)}(f_\epsilon^{(-)}) = \frac{\text{flujo entrante a } \infty}{|\text{flujo saliente de } -\infty|} = \frac{k_+|C_-|^2}{k_-|A_-|^2};$$

estos coeficientes satisfacen (use (3.13))

$$R^{(-)}(f_\epsilon^{(-)}) + T^{(-,+)}(f_\epsilon^{(-)}) = 1, \quad 0 < T^{(-,+)}(f_\epsilon^{(-)}) \leq 1, \quad 0 \leq R^{(-)}(f_\epsilon^{(-)}) < 1.$$

Los coeficientes de reflexión y transmisión asociados a $f_\epsilon^{(+)}$ son, respectivamente

$$R^{(+)}(f_\epsilon^{(+)}) = \frac{|\text{flujo saliente de } \infty|}{|\text{flujo entrante a } \infty|} = \frac{|C_+|^2}{|D_+|^2},$$

$$T^{(+,-)}(f_\epsilon^{(+)}) = \frac{|\text{flujo entrante a } -\infty|}{|\text{flujo saliente de } \infty|} = \frac{k_-|B_+|^2}{k_+|D_+|^2},$$

y satisfacen (use (3.13))

$$R^{(+)}(f_\epsilon^{(+)}) + T^{(+,-)}(f_\epsilon^{(+)}) = 1, \quad 0 < T^{(+,-)}(f_\epsilon^{(+)}) \leq 1, \quad 0 \leq R^{(+)}(f_\epsilon^{(+)}) < 1.$$

Pero además

$$W(f_\epsilon^{(+)}, f_\epsilon^{(-)}) = \lim_{x \rightarrow \infty} W(f_\epsilon^{(+)}, f_\epsilon^{(-)}) = 2ik_+C_-D_+,$$

$$W(f_\epsilon^{(+)}, f_\epsilon^{(-)}) = \lim_{x \rightarrow -\infty} W(f_\epsilon^{(+)}, f_\epsilon^{(-)}) = 2ik_-A_-B_+,$$

con lo cual

$$(3.16) \quad k_-A_-B_+ = k_+C_-D_+.$$

Con esta relación deducimos

$$T^{(-,+)}(f_\epsilon^{(+)}) = T^{(-,+)}(f_\epsilon^{(-)}) \stackrel{def}{=} T(\epsilon)$$

y por ende

$$R^{(-)}(f_\epsilon^{(-)}) = R^{(+)}(f_\epsilon^{(+)}) \stackrel{def}{=} R(\epsilon)$$

y

$$R(\epsilon) + T(\epsilon) = 1.$$

Otra consecuencia de (3.16) concierne a las fases de los coeficientes

$$\text{Arg}(B_+/D_+) = \text{Arg}(C_-/A_-).$$

El cálculo del Wronskiano $W(f_\epsilon^{(-)}, \overline{f_\epsilon^{(+)}})$ conduce a otra relación de fases

$$\text{Arg}(B_-/C_-) = \pi - \text{Arg}(C_+/B_+),$$

Por último, no es complicado pero si tedioso demostrar formalmente que siempre hay dos soluciones linealmente independientes con la forma asintótica de $f_e^{(\pm)}$, y de esta manera garantizar que los coeficientes de reflexión y transmisión están realmente asociados al potencial. Esto se hace en un apartado siguiente.

En resumen, si los límites (3.10) existen y son finitos, entonces la ecuación de Schrödinger permite dos soluciones estacionarias de energía E para $E > \max\{V_-, V_+\}$ de la forma $f_E^{(\pm)}(x, t) = e^{-iEt/\hbar} f_E(x)$ tales que

$$f_E^{(-)}(x) \asymp \begin{cases} e^{ik_-x} + \rho_- e^{-ik_-x} & , \text{ para } x \rightarrow -\infty \\ \sigma_- e^{ik_+x} & , \text{ para } x \rightarrow \infty \end{cases} , \text{ con } \sigma_- \neq 0 ;$$

$$f_E^{(+)}(x) \asymp \begin{cases} \sigma_+ e^{-ik_-x} & , \text{ para } x \rightarrow -\infty \\ \rho_+ e^{ik_+x} + e^{-ik_+x} & , \text{ para } x \rightarrow \infty \end{cases} , \text{ con } \sigma_+ \neq 0 ;$$

donde

$$k_{\pm} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_{\pm})} .$$

El coeficiente de reflexión $R(E)$ está dado por

$$R(E) = |\rho_-|^2 = |\rho_+|^2 ; \quad (0 \leq R(E) < 1)$$

el coeficiente de transmisión $T(E)$ está dado por

$$T(E) = \frac{k_+ |\sigma_-|^2}{k_-} = \frac{k_- |\sigma_+|^2}{k_+} ; \quad (0 < T(E) \leq 1)$$

se tiene

$$R(E) + T(E) = 1 ;$$

además

$$\text{Arg}(\sigma_-) = \text{Arg}(\sigma_+) , \quad \text{Arg}(\rho_-/\sigma_-) = \pi - \text{Arg}(\rho_+/\sigma_+) .$$

Las energías E para las cuales $T(E) = 1$ se denominan resonancias. Para estas energías el potencial es transparente ya que no hay reflexión. El llamado efecto tunel está relacionado con el hecho de $T(E) > 0$ para toda energía $E > \max\{V_-, V_+\}$; se manifiesta cuando $E < V(x)$ para x en algún intervalo (o intervalos).

Un tratamiento análogo del caso $\min\{U_-, U_+\} < \epsilon < \max\{U_-, U_+\}$ permite garantizar de que el coeficiente de reflexión está realmente asociado con el potencial y es igual a 1.

Construcción de las soluciones con interpretación de onda incidente, reflejada y transmitida

Construimos la solución $f_\epsilon^{(-)}$ cuyo comportamiento asintótico es:

$$f_\epsilon^{(-)}(x) \asymp \begin{cases} e^{ik_-x} + \rho_- e^{-ik_-x} & , \text{ para } x \rightarrow -\infty \\ \sigma_- e^{ik_+x} & , \text{ para } x \rightarrow \infty \end{cases} ,$$

con $\sigma_- \neq 0$. La construcción de $f_\epsilon^{(+)}$ es análoga.

1. El primer paso es el cálculo del Wronskiano de dos ondas arbitrarias con el mismo número de onda

$$\begin{aligned} f(x) &= Ae^{itx} + Be^{-itx} , \\ g(x) &= \alpha e^{itx} + \beta e^{-itx} ; \end{aligned}$$

se tiene entonces

$$W(g, f)(x) = 2it(\beta A - \alpha B) ;$$

el Wronskiano es, en particular constante.

2. Consideramos ϵ fijo con $\epsilon > \max(U_+, U_-)$. Si f es solución de

$$(3.17) \quad f''(x) = (U(x) - \epsilon)f(x) ,$$

entonces,

$$U(x) - \epsilon \asymp \begin{cases} U_- - \epsilon & , \text{ para } x \rightarrow -\infty \\ U_+ - \epsilon & , \text{ para } x \rightarrow \infty \end{cases} ,$$

y entonces

$$f''(x) \asymp \begin{cases} -k_-^2 f(x) & , \text{ para } x \rightarrow -\infty \\ -k_+^2 f(x) & , \text{ para } x \rightarrow \infty \end{cases} ,$$

donde los números de onda asintóticos $k_\pm = \sqrt{\epsilon - U_\pm}$ ambos no nulos. Luego,

$$(3.18) \quad f(x) \asymp \begin{cases} Ae^{ik_-x} + Be^{-ik_-x} & , \text{ para } x \rightarrow -\infty \\ Ce^{ik_+x} + De^{-ik_+x} & , \text{ para } x \rightarrow \infty \end{cases} ,$$

con ciertas constantes complejas A, B, C , y D . Es conveniente abreviar esta fórmula como

$$\boxed{f \asymp [A, B|C, D]} .$$

Probemos ahora que A y B no pueden ser simultáneamente nulas y que C y D tampoco si f no es nula; i.e., si f no es nula entonces no puede ser asintóticamente nula en cada una de las dos direcciones. En efecto, sea g otra solución de (3.17) linealmente independiente de f ; entonces, ya que $W(f, g)$ es constante para soluciones de (3.17)

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} W(f, g) = \lim_{x \rightarrow \infty} W(f, g) = W(f, g) \neq 0 .$$

El primer miembro de esta igualdad se anula si $f(x) \asymp 0$ para $x \rightarrow -\infty$, lo que ocurre si y solo si $A = B = 0$ en (3.18); similarmente, el segundo miembro se anula si y solo si $C = D = 0$.

Veamos también que si $D = 0$, entonces $|A| > |B| \geq 0$. Como \bar{f} es solución de (3.17) pues U es real, se tiene: $W(\bar{f}, f)$ es constante. Ya que $\bar{f} \asymp [\bar{B}, \bar{A}|\bar{D}, \bar{C}]$ la fórmula del primer paso, da

$$W(\bar{f}, f) = \lim_{x \rightarrow -\infty} W(\bar{f}, f)(x) = 2ik_-(|A|^2 - |B|^2),$$

$$W(\bar{f}, f) = \lim_{x \rightarrow \infty} W(\bar{f}, f)(x) = 2ik_+(|C|^2 - |D|^2).$$

Luego,

$$k_+(|C|^2 - |D|^2) = k_-(|A|^2 - |B|^2).$$

Por lo tanto, si $D = 0$, $C \neq 0$ ya que estos dos números no pueden ser ambos nulos. Pero entonces, $|A|^2 - |B|^2 > 0$, y esto implica que $|A| > |B|$.

3. Sean f y g dos soluciones linealmente independientes de (3.17) con $f \asymp [A, B|C, D]$ y $g \asymp [\alpha, \beta|\gamma, \delta]$, entonces $W(g, f)$ es constante y no nulo. La fórmula del primer paso da:

$$0 \neq W(g, f) = \lim_{x \rightarrow -\infty} W(g, f)(x) = 2ik_-(\beta A - \alpha B),$$

$$0 \neq W(g, f) = \lim_{x \rightarrow \infty} W(\bar{f}, f)(x) = 2ik_+(\delta C - \gamma D).$$

Con $h = \delta f - Dg$ tenemos $h \neq 0$ pues δ y D no pueden ser ambos nulos y f y g son linealmente independientes; h es solución; y

$$h \asymp [A', B'|C', 0]$$

con

$$A' = \delta A - \alpha D, \quad B' = \delta B - \beta D, \quad C' = \delta C - \gamma D.$$

Pero $C' \neq 0$ y, por lo visto en el paso anterior, $A' \neq 0$ ya que el coeficiente D de h es nulo. Por último, $(A')^{-1}h$ tiene la forma asintótica

$$[1, \rho_-|\sigma_-, 0]$$

deseada con $\rho_- = B'/A'$ y $\sigma_- = C'/A' \neq 0$.

3.3.3. Resonancias en el pozo cuadrado.

Damos un ejemplo concreto para el fenómeno de resonancia. Consideramos el pozo de potencial (tratado en el Problema 2 de la Guía 5):

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

con $V > 0$.

Consideramos energías E mayores a $V_{\pm} = V$. Con

$$k = \sqrt{\epsilon - U} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)},$$

tenemos

$$f_{\epsilon}(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \rho e^{-ikx} & , \quad x < -a \\ \sigma e^{ikx} & , \quad x > a \end{cases},$$

y

$$f_{\epsilon}(x) = \alpha \cos(\kappa x) + \beta \sin(\kappa x), \quad |x| < a,$$

donde

$$\kappa = \sqrt{\epsilon} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}.$$

La continuidad de f_{ϵ} y su derivada en $x = -a$ conduce a:

$$\begin{pmatrix} e^{-ika} + \rho e^{ika} \\ ik(e^{-ika} - \rho e^{ika}) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cos(\kappa a) & , & -\sin(\kappa a) \\ \kappa \sin(\kappa a) & , & \kappa \cos(\kappa a) \end{pmatrix}}_{\mathbf{M}(-a)} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}.$$

La continuidad de f_{ϵ} y su derivada en $x = a$ conduce a:

$$\begin{pmatrix} \sigma e^{ika} \\ ik\sigma e^{ika} \end{pmatrix} = \mathbf{M}(a) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}.$$

Por lo tanto,

$$\begin{pmatrix} e^{-ika} + \rho e^{ika} \\ ik(e^{-ika} - \rho e^{ika}) \end{pmatrix} = \mathbf{M}(-a)\mathbf{M}(a)^{-1} \begin{pmatrix} \sigma e^{ika} \\ ik\sigma e^{ika} \end{pmatrix};$$

Multiplicando por e^{-ika} , tenemos

$$\begin{pmatrix} e^{-2ika} + \rho \\ ik(e^{-2ika} - \rho) \end{pmatrix} = \mathbf{M}(-a)\mathbf{M}(a)^{-1} \begin{pmatrix} \sigma \\ ik\sigma \end{pmatrix}.$$

Usando la fórmula

$$\begin{pmatrix} a & , & b \\ c & , & d \end{pmatrix}^{-1} = (ad - bc)^{-1} \begin{pmatrix} d & , & -b \\ -c & , & a \end{pmatrix},$$

obtenemos

$$\mathbf{M}(-a)\mathbf{M}(a)^{-1} = \begin{pmatrix} \cos(2\kappa a) & , & -\kappa^{-1} \sin(2\kappa a) \\ \kappa \sin(2\kappa a) & , & \cos(2\kappa a) \end{pmatrix};$$

luego

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{e^{-2i\kappa a}}{\cos(2\kappa a) - i \frac{\kappa^2 + \kappa^2}{2\kappa k} \sin(2\kappa a)}, \\ \rho &= i \frac{\kappa^2 - k^2}{2\kappa k} \sin(2\kappa a) \sigma; \end{aligned}$$

de donde

$$T(E) = |\sigma|^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2 - \kappa^2}{2\kappa k}\right)^2 \sin(2\kappa a)^2},$$

y

$$R(E) = 1 - T(E) = |\rho|^2 = \frac{\left(\frac{k^2 - \kappa^2}{2\kappa k}\right)^2 \sin(2\kappa a)^2}{1 + \left(\frac{k^2 - \kappa^2}{2\kappa k}\right)^2 \sin(2\kappa a)^2}.$$

Las resonancias E son las soluciones de $R(E) = 0$ o alternativamente $T(E) = 1$ y estas condiciones son equivalentes a

$$\sin(2\kappa a) = 0,$$

o sea

$$\kappa a = \frac{n\pi}{2}, \quad \text{con } n \text{ entero positivo arbitrario tal que } \kappa^2 = \epsilon > U.$$

Entonces, las resonancias son

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{8ma^2}, \quad n \text{ entero mayor a } \frac{2a}{\hbar\pi} \sqrt{2mV}.$$

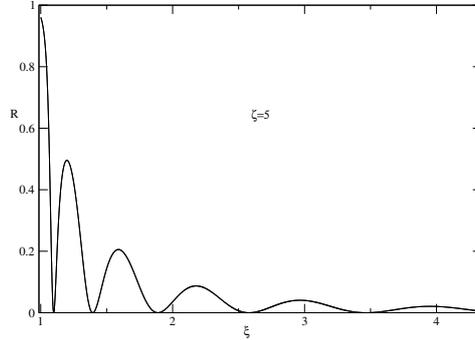


Figura 3.1: El coeficiente de reflexión en el pozo cuadrado vs. el parámetro adimensional $\xi = E/V$ para $\zeta = \sqrt{2m\hbar^{-2}a^2V} = 5$.

3.3.4. Efecto tunel y resonancias en la barrera cuadrada.

Vemos un caso concreto, la barrera cuadrada:

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

con $V > 0$.

Para energías E con $0 < E < V$, una partícula clásica no puede pasar la barrera V . Tenemos $V_{\pm} = 0$ y en cuántica,

$$f_{\epsilon}(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \rho e^{-ikx} & , \quad x < -a \\ \sigma e^{ikx} & , \quad x > a \end{cases} ,$$

con

$$k = \sqrt{\epsilon} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} ;$$

y

$$f_{\epsilon}(x) = \alpha \cosh(\kappa x) + \beta \sinh(\kappa x) , \quad |x| < a ,$$

donde

$$\kappa = \sqrt{|U - \epsilon|} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} |V - E|} .$$

La continuidad de f_{ϵ} y su derivada en $x = -a$ conduce a:

$$\begin{pmatrix} e^{-ika} + \rho e^{ika} \\ ik(e^{-ika} - \rho e^{ika}) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cosh(\kappa a) & , & -\sinh(\kappa a) \\ -\kappa \sinh(\kappa a) & , & \kappa \cosh(\kappa a) \end{pmatrix}}_{\mathbf{M}_h(-a)} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} .$$

La continuidad de f_{ϵ} y su derivada en $x = a$ conduce a:

$$\begin{pmatrix} \sigma e^{ika} \\ ik\sigma e^{ika} \end{pmatrix} = \mathbf{M}_h(a) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} .$$

Por lo tanto,

$$\begin{pmatrix} e^{-ika} + \rho e^{ika} \\ ik(e^{-ika} - \rho e^{ika}) \end{pmatrix} = \mathbf{M}_h(-a) \mathbf{M}_h(a)^{-1} \begin{pmatrix} \sigma e^{ika} \\ ik\sigma e^{ika} \end{pmatrix} ;$$

Multiplicando por e^{-ika} , tenemos

$$\begin{pmatrix} e^{-2ika} + \rho \\ ik(e^{-2ika} - \rho) \end{pmatrix} = \mathbf{M}_h(-a) \mathbf{M}_h(a)^{-1} \begin{pmatrix} \sigma \\ ik\sigma \end{pmatrix} .$$

Del mismo modo que en el pozo obtenemos obtenemos

$$\mathbf{M}_h(-a) \mathbf{M}_h(a)^{-1} = \begin{pmatrix} \cosh(2\kappa a) & , & -\kappa^{-1} \sinh(2\kappa a) \\ -\kappa \sinh(2\kappa a) & , & \cosh(2\kappa a) \end{pmatrix} ;$$

luego

$$\sigma = \frac{e^{-2i\kappa a}}{\cosh(2\kappa a) - i \frac{k^2 - \kappa^2}{2\kappa k} \sinh(2\kappa a)} ,$$

$$\rho = i \frac{k^2 - \kappa^2}{2\kappa k} \sinh(2\kappa a) \sigma ;$$

de donde

$$T(E) = |\sigma|^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2 + \kappa^2}{2\kappa k}\right)^2 \sinh(2\kappa a)^2},$$

y

$$R(E) = 1 - T(E) = |\rho|^2 = \frac{\left(\frac{k^2 + \kappa^2}{2\kappa k}\right)^2 \sinh(2\kappa a)^2}{1 + \left(\frac{k^2 + \kappa^2}{2\kappa k}\right)^2 \sinh(2\kappa a)^2}.$$

Ahora, no hay resonancias; el comportamiento de $T(\cdot)$ es el siguiente⁵:

$$(0, V) \ni E \mapsto T(E) \text{ es creciente, } \lim_{E \downarrow 0} T(E) = 0, \quad \lim_{E \uparrow V} T(E) = (1 + Ua^2)^{-1}.$$

Siempre hay efecto tunel y el efecto crece con E (siempre con $0 < E < V$) como uno quizás esperaría.

Si aumentamos la energía y consideramos $E > V$ entonces un cálculo análogo al realizado para el pozo da

$$T(E) = \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2 - \kappa^2}{2\kappa k}\right)^2 \sin(2\kappa a)^2},$$

de donde se obtienen las resonancias

$$E_n = V + \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{8ma^2}, \quad n \text{ entero positivo arbitrario};$$

$E_0 = V$ no es una resonancia.

⁵El crecimiento de la función T en el intervalo $(0, V)$ es equivalente al decrecimiento de la función $(0, V) \ni E \mapsto \left(\frac{k^2 + \kappa^2}{2\kappa k}\right)^2 \sinh(2\kappa a)^2$, que es a su vez equivalente al decrecimiento de la función $(0, V) \ni E \mapsto g(E) \stackrel{def}{=} \frac{k^2 + \kappa^2}{\kappa k} \sinh(2\kappa a)$. Ahora,

$$g(E) = \frac{\sinh(2c\sqrt{1-\xi})}{\sqrt{\xi(1-\xi)}},$$

en términos del parametro adimensional $c = \sqrt{2m\hbar^{-2}a^2V}$ y de la variable adimensional $\xi = E/V$ que varia en $(0, 1)$. Para terminar, veamos que

$$(0, 1) \ni \xi \mapsto \alpha_t(\xi) \stackrel{def}{=} \frac{\sinh(t\sqrt{1-\xi})}{\sqrt{\xi(1-\xi)}}$$

es decreciente para todo $t > 0$. Calculamos

$$\alpha'_t(\xi) = -\frac{1}{2(1-\xi)\sqrt{\xi}} \left(t \cosh(t\sqrt{1-\xi}) + \frac{1-2\xi}{\xi\sqrt{1-\xi}} \sinh(t\sqrt{1-\xi}) \right).$$

El decrecimiento de α_t es equivalente a

$$t \cosh(t\sqrt{1-\xi}) + \frac{1-2\xi}{\xi\sqrt{1-\xi}} \sinh(t\sqrt{1-\xi}) \geq 0.$$

Para ver esto, usamos la desigualdad $\tanh(x) < x$ válida para todo $x > 0$. Entonces, $\cosh(x) > x^{-1} \sinh(x)$ para todo $x > 0$ con lo cual

$$\begin{aligned} t \cosh(t\sqrt{1-\xi}) + \frac{1-2\xi}{\xi\sqrt{1-\xi}} \sinh(t\sqrt{1-\xi}) &> t \frac{\sinh(t\sqrt{1-\xi})}{t\sqrt{1-\xi}} + \frac{1-2\xi}{\xi\sqrt{1-\xi}} \sinh(t\sqrt{1-\xi}) \\ &= \frac{\sqrt{1-\xi}}{\xi} \sinh(t\sqrt{1-\xi}) > 0. \end{aligned}$$

En términos de la variable adimensional $\xi(E) = E/V = \epsilon/U$ y del parámetro adimensional $\zeta = \sqrt{2m\hbar^{-2}a^2V} = \sqrt{a^2U}$ obtenemos entonces el coeficiente de transmisión para la barrera cuadrada como

$$T(E) = \begin{cases} \left(1 + \frac{(\sinh(2\zeta\sqrt{1-\xi(E)}))^2}{4\xi(E)(1-\xi(E))}\right)^{-1} & , \text{ para } E < V \\ (1 + \zeta^2)^{-1} & , \text{ para } E = V \\ \left(1 + \frac{(\sin(2\zeta\sqrt{\xi(E)-1}))^2}{4\xi(E)(\xi(E)-1)}\right)^{-1} & , \text{ para } E > V \end{cases} ;$$

esto se grafica en las figuras 2,3 y 4.

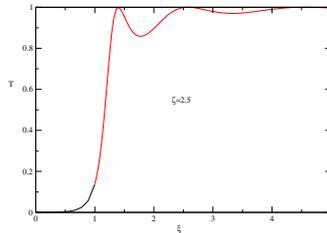


Figura 3.2: T vs. $\xi = E/V$ para para la barrera cuadrada con $\zeta = \sqrt{2m\hbar^{-2}a^2V} = 2,5$.

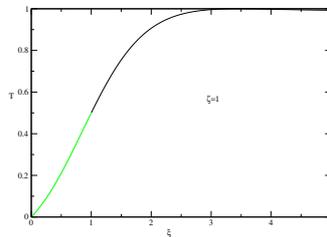


Figura 3.3: T vs. $\xi = E/V$ para la barrera cuadrada con $\sqrt{2m\hbar^{-2}a^2V} = 1$.

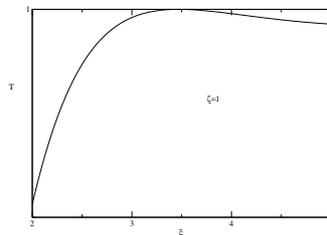


Figura 3.4: Detalle de la figura 3.

3.4. El oscilador armónico

Consideramos el potencial armónico $V(x) = kx^2/2$ con $k > 0$, y el correspondiente Hamiltoniano

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(\hat{x}) .$$

Ya que $V_{\pm} = \infty$ y $V_o = 0$, los resultados anteriores indicarían que el espectro de H es puramente discreto y está contenido en $(0, \infty)$. Además, los autovalores son simples (i.e., no degenerados) y las autofunciones asociadas pueden elegirse a valores reales.

Para analizar la ecuación diferencial asociada con H conviene trabajar en variables adimensionales. Del oscilador clásico sabemos que la frecuencia angular natural asociada con el movimiento periódico es $\omega = \sqrt{k/m}$. Si

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

entonces ξ no tiene dimensión pues

$$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

tiene la dimensión de una longitud recíproca. La ecuación de autovalores es equivalente a

$$(3.19) \quad \frac{\hbar\omega}{2} \left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right) \tilde{\psi}(\xi) = E\tilde{\psi}(\xi)$$

donde

$$\tilde{\psi}(\xi) = \psi(\alpha^{-1}\xi) .$$

Hay una solución inmediata: con $\tilde{\phi}_o(\xi) = \exp(-a\xi^2)$, obtenemos

$$\tilde{\phi}'_o(\xi) = -2a\xi\tilde{\phi}_o(\xi) , \quad \tilde{\phi}''_o(\xi) = -2a\tilde{\phi}_o(\xi) + 4a^2\xi^2\tilde{\phi}_o(\xi) ;$$

insertando en (3.19),

$$\frac{\hbar\omega}{2} \left(-4a^2\xi^2\tilde{\phi}_o(\xi) + 2a\tilde{\phi}_o(\xi) + \xi^2\tilde{\phi}_o(\xi) \right) = E\tilde{\psi}(\xi)$$

vemos que con $a = 1/2$, $\tilde{\phi}_o$ es autofunción al autovalor $E_o = \hbar\omega/2$. Volviendo a la variable original, tenemos

$$\phi_o(x) = \sqrt{\frac{\alpha^2}{\pi}} \exp(-\alpha^2 x^2/2)$$

es autofunción normalizada de H al autovalor $E_o = \hbar\omega/2$.

3.4.1. Tratamiento algebraico

Escribiendo

$$H = (1/2m)\hat{p}^2 + (m\omega^2/2)\hat{x}^2$$

se pone de manifiesto que el operador H es positivo

$$\langle \psi, H\psi \rangle = (1/2m) \|\widehat{p}\psi\|^2 + (m\omega^2/2) \|\widehat{x}\psi\|^2 .$$

En analogía con los números complejos, uno podría tratar de escribir

$$H = A^*A$$

para algún operador A . Por otra parte $(\widehat{x} - i\widehat{p})(\widehat{x} + i\widehat{p}) = \widehat{x}^2 + \widehat{p}^2 + i[\widehat{x}, \widehat{p}] = \widehat{x}^2 + \widehat{p}^2 - \hbar$, lo que sugiere intentar con $A = a\widehat{x} + ib\widehat{p}$ con a y b constantes apropiadas. La elección apropiada resulta ser

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\alpha\widehat{x} + \frac{i}{\hbar\alpha}\widehat{p} \right)$$

y conduce a

$$H = \hbar\omega(a^*a + \frac{1}{2}\mathbf{1}) .$$

El operador

$$N = a^*a$$

que es manifiestamente positivo se denomina *operador número*. Se tiene $\sigma(H) = \hbar\omega(\sigma(N) + \frac{1}{2})$.

Tenemos

$$\begin{aligned} [a, a^*] &= (1/2)[\alpha\widehat{x} + i\alpha^{-1}\hbar^{-1}\widehat{p}, \alpha\widehat{x} - i\alpha^{-1}\hbar^{-1}\widehat{p}] = (1/2)i\hbar^{-1}[\widehat{p}, \widehat{x}] - (1/2)i\hbar^{-1}[\widehat{x}, \widehat{p}] \\ &= (1/2) + (1/2) = 1 ; \end{aligned}$$

$$[N, a] = [a^*a, a] = a^*[a, a] + [a^*, a]a = -a ;$$

$$[N, a^*] = ([a, N^*])^* = a^* .$$

Lo notable es que, empezando con los cuatro operadores $\mathbf{1}, a, a^*, N$; y calculando los posibles conmutadores no se obtienen nuevos operadores (descontando el operador nulo). Esta es la propiedad que nos permite deducir el espectro de N , y por ende el de H .

Hay que tener en cuenta que los operadores, a, a^*, H , etc. son no acotados (son discontinuos) por lo cual el manejo que haremos es formal. Sin embargo, todo el manipuleo que sigue es riguroso en un subespacio \mathcal{D} de $L^2(\mathbb{R})$ tal que:

$$\widehat{x}(\mathcal{D}) \subset \mathcal{D}, \widehat{p}(\mathcal{D}) \subset \mathcal{D} \text{ y por ende } a(\mathcal{D}) \subset \mathcal{D} \text{ y } a^*(\mathcal{D}) \subset \mathcal{D} .$$

Más adelante construimos \mathcal{D} denso en $L^2(\mathbb{R})$ con estas propiedades.

Las siguientes propiedades son cruciales:

1. Si λ es autovalor de N y ψ es una autofunción asociada, se tiene

$$\lambda \|\psi\|^2 = \langle \psi, N\psi \rangle = \langle a\psi, a\psi \rangle = \|a\psi\|^2$$

y por ende $\lambda \geq 0$ con igualdad si y solo si $a\psi = 0$.

2. Si ψ es autofunción de N al autovalor λ ,

$$\|a^*\psi\|^2 = \langle \psi, aa^*\psi \rangle = \langle \psi, ([a, a^*] + a^*a)\psi \rangle = \langle \psi, (\mathbf{1} + N)\psi \rangle = (\lambda + 1) \|\psi\|^2$$

en particular, $a^*\psi \neq 0$.

3. Si ψ es autofunción de N al autovalor λ entonces

$$N(a\psi) = a^*aa\psi = ([a^*, a] + aa^*)a\psi = -a\psi + aN\psi = (\lambda - 1)(a\psi)$$

luego $a\psi$ es o bien autofunción de N al autovalor $\lambda - 1$ o sino $a\psi = 0$ lo que sucede si y solo si $\lambda = 0$.

4. Si ψ es autofunción de N al autovalor λ entonces

$$N(a^*\psi) = a^*aa^*\psi = a^*([a, a^*] + a^*a)\psi = a^*\psi + a^*N\psi = (\lambda + 1)(a^*\psi)$$

luego $a^*\psi$ es autofunción de N al autovalor $\lambda + 1$.

Las propiedades 3. y 4, son responsables de las denominaciones “operador de creación” para a^* y “operador de aniquilación” para a . Ya sabemos que ϕ_o es autofunción de N al autovalor 0, pero recuperemos este resultado. Si $N\psi = 0$ con $\psi \neq 0$ entonces por 1., $\|a\psi\| = 0$ o sea

$$a\psi = 0, \quad \alpha x\psi(x) + \alpha^{-1}\psi'(x) = 0.$$

La ecuación diferencial es separable y la solución es

$$\psi(x) = \psi(0)\exp(-\alpha^2 x^2/2);$$

normalizando se obtiene ϕ_o . La solución es única modulo multiplicación por una constante pues si f es solución,

$$\left(\frac{f}{\phi_o}\right)'(x) = \left(\frac{f'}{\phi_o}\right)(x) - \left(\frac{f\phi_o'}{\phi_o^2}\right)(x) = \frac{-\alpha^2 x f(x)}{\phi_o(x)} - \frac{-f(x)\alpha^2 x \phi_o(x)}{\phi_o(x)^2} = 0.$$

Tenemos el primer resultado:

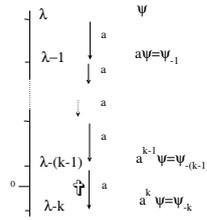
(3.20) 0 es un autovalor simple de N y ϕ_o es autofunción normalizada .

Por aplicación sucesiva de 4. obtenemos que para todo número natural n , $(a^*)^n \phi_o$ es autofunción de N al autovalor n y $\|(a^*)^n \phi_o\|^2 = n!$ Esto se ve por ejemplo por inducción. En efecto de 4. y 1., se obtiene la afirmación para $n = 1$. Si la afirmación es válida para n entonces, por 4., $(a^*)^{n+1} \phi_o = a^*(a^*)^n \phi_o$ es autofunción de N al autovalor $n + 1$ y $\|(a^*)^{n+1} \phi_o\|^2 = \|a^*(a^*)^n \phi_o\|^2 = (n + 1)\|(a^*)^n \phi_o\|^2 = (n + 1)n! = (n + 1)!$ Luego –y este es el segundo resultado–

(3.21) todo n es autovalor de N y $\phi_n = (n!)^{-1/2} \phi_o$ es una autofunción normalizada .

Veamos ahora que hemos encontrado todos los autovalores de N . Sea λ un autovalor de N con autofunción ψ . La aplicación sucesiva de 3. se ilustra en la figura.

Por 1., $\lambda \geq 0$; sea k el menor número natural tal que $\lambda - k < 0$; se tiene $k \geq 1$. La aplicación sucesiva (k veces) de 4. indica que $a^k \psi \stackrel{def}{=} \psi_{-k}$ es autofunción de N al autovalor



$\lambda - k$ o bien $\psi_{-k} = 0$ lo que sucede si y solo si $\lambda - (k - 1) = 0$, por 1.. Como $\lambda - k < 0$, no puede ser autovalor por 1., deducimos que $\psi_{-k} = 0$ y $\lambda = k - 1$; entonces, λ es un número natural.

Veamos que n es siempre autovalor simple. En efecto, si ψ_1, ψ_2 son autofunciones ortogonales de N al autovalor n entonces $\langle a\psi_1, a\psi_2 \rangle = \langle \psi_1, N\psi_2 \rangle = n\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = 0$, o sea que $a\psi_1$ y $a\psi_2$ son ortogonales. Pero entonces, $a^n\psi_1$ y $a^n\psi_2$ son autofunciones ortogonales de N al autovalor 0 lo que contradice (3.20).

Con esto hemos demostrado que el espectro discreto de H es el conjunto

$$\left\{ \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) : n = 0, 1, 2, \dots \right\}$$

y que estos autovalores son simples. Para completar la discusión faltaría ver que el espectro continuo de H o de N es vacío.

De lo expuesto se obtienen las siguientes relaciones útiles

$$a^* \phi_n = \sqrt{n+1} \phi_{n+1}, \quad a \phi_n = \sqrt{n} \phi_{n-1}$$

válidas para todo natural n , donde se pone de manifiesto que a^* sube por la escalera (infinita) de los autoestados de a un peldano, y a hace lo inverso. Estas relaciones junto con

$$\hat{x} = \frac{a + a^*}{\sqrt{2}\alpha}, \quad \hat{p} = i\hbar\alpha \frac{a^* - a}{\sqrt{2}}$$

permiten calcular sin esfuerzo los valores esperados u elementos de matriz de posición, momento y productos de ellos.

Construcción de \mathcal{D}

El espacio de Schwartz $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ de funciones infinitamente diferenciables y de decaimiento rápido tiene todas las propiedades requeridas del subespacio \mathcal{D} . Concretamente, $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ es el conjunto de las funciones u sobre \mathbb{R} a valores complejos que son tantas veces diferenciables como se quiera y de modo que cualesquiera sean los números naturales n y m se tiene

$$\sup_{x \in \mathbb{R}} \{ |x^n (d^m u / dx^m)(x)| \} < \infty.$$

Claramente $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ está contenido en el dominio de definición de los operadores \hat{x}, \hat{p} y, además se cumple $\hat{x}^k \hat{p}^r \hat{x}^s u \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$, cualesquiera sean los naturales k, r, s si $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$.

$\{\phi_n : n = 0, 1, 2, \dots\}$ es una base ortonormal en $\mathcal{S}(\mathbb{R})$

Probamos esta afirmación en lo que sigue. Como consecuencia obtenemos que los autovalores encontrados son todos (no falta ninguno; lo que ya sabíamos) y, además, que no hay espectro continuo.

Recordamos que un conjunto \mathcal{A} en un espacio de Hilbert \mathcal{H} es total si para $f \in \mathcal{H}$ y $\langle f, g \rangle = 0$ para todo $g \in \mathcal{A}$, entonces $f = 0$.

Observación 1: Para k real sea $\phi^{(k)}(x) = e^{-ikx} \phi_o(x)$, entonces $\phi^{(k)}$ está en $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ y $\{\phi^{(k)} : k \in \mathbb{R}\}$ es total en $L^2(\mathbb{R})$.

$\phi^{(k)}$ es producto de dos funciones infinitamente diferenciables y $|\phi^{(k)}| = \phi_o$. Si f satisface la condición, entonces

$$0 = \int \bar{f} \phi_o(x) e^{-ikx} dx = \sqrt{2\pi} \widehat{(\bar{f} \phi_o)}(k),$$

donde $\widehat{}$ denota la transformada de Fourier. Como la transformación de Fourier es unitaria en $L^2(\mathbb{R})$, deducimos que $\widehat{\bar{f} \phi_o} = 0$ y por ende $f = 0$.

Observación 2: Sea $\psi_n(x) = x^n \phi_o(x)$ para $n = 0, 1, 2, \dots$. Entonces, $\psi_n \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ y $\{\psi_n : n = 0, 1, 2, \dots\}$ es total en $L^2(\mathbb{R})$.

Es obvio que ψ_n está en $\mathcal{S}(\mathbb{R})$. Se tiene

$$\phi^{(k)}(x) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-ik)^j}{j!} x^j \phi_o(x).$$

Si cortamos la serie en $j = N$, obtenemos la función

$$\theta_N^{(k)}(x) = \sum_{j=0}^N \frac{(-ik)^j}{j!} x^j \phi_o(x);$$

queremos demostrar que $\lim_{N \rightarrow \infty} \|\phi^{(k)} - \theta_N^{(k)}\| = 0$. Si esto es cierto, obtenemos de la hipótesis sobre f , que $\langle \theta_N^{(k)}, f \rangle = 0$ para todo real k y todo $N = 0, 1, 2, \dots$. Pero se tiene

$$|\langle \phi^{(k)}, f \rangle| = |\langle \phi^{(k)} - \theta_N^{(k)}, f \rangle + \langle \theta_N^{(k)}, f \rangle| = |\langle \phi^{(k)} - \theta_N^{(k)}, f \rangle| \leq \|f\| \|\phi^{(k)} - \theta_N^{(k)}\|$$

y tomando el límite $N \rightarrow \infty$ se tiene $\langle f, \phi^{(k)} \rangle = 0$ para todo k real. Luego $f = 0$ por la primera observación.

Veamos entonces que $\lim_{N \rightarrow \infty} \|\phi^{(k)} - \theta_N^{(k)}\| = 0$. Sabemos que la serie exponencial en z , con z complejo, converge uniformemente a e^z en cualquier disco cerrado del plano complejo. Sea

$$t_N(x) \stackrel{def}{=} \left| e^{-ikx} - \sum_{n=0}^N \frac{(-ikx)^n}{n!} \right|.$$

Para un $R > 0$ arbitrario tenemos

$$\|\phi^{(k)} - \theta_N^{(k)}\|^2 = \int t_N(x) \phi_o(x)^2 dx$$

$$= \int_{-R}^R t_N(x)^2 \phi_o(x)^2 dx + \int_{-\infty}^{-R} t_N(x)^2 \phi_o(x)^2 dx + \int_R^{\infty} t_N(x)^2 \phi_o(x)^2 dx .$$

La idea es usar la convergencia uniforme de t_N a 0 en el intervalo $[-R, R]$ en la primera integral y estimar adecuadamente las otras dos integrales. Ya que

$$\left| \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ikx)^n}{n!} \right| \leq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|k|^n |x|^n}{n!} < e^{|k||x|} ,$$

obtenemos de la desigualdad del triángulo y del hecho que $e^a \leq 1$ para $a \geq 0$, la desigualdad

$$t_N(x) \leq 1 + \left| \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ikx)^n}{n!} \right| < 2e^{|k||x|} .$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{-R} t_N(x)^2 \phi_o(x)^2 dx < 4 \int_{-\infty}^{-R} e^{2|k||x|} \phi_o(x)^2 dx \\ & = 4\sqrt{\frac{\alpha^2}{\pi}} e^{\alpha^{-2}|k|^2} \int_{-\infty}^{-R} e^{-\alpha^2(x+\alpha^{-2}|k|)^2} dx = 4e^{\alpha^{-2}|k|^2} \int_{-\infty}^{-R+\alpha^{-2}|k|} \phi_o(x)^2 dx ; \end{aligned}$$

y análogamente

$$\int_R^{\infty} t_N(x)^2 \phi_o(x)^2 dx < 4e^{\alpha^{-2}|k|^2} \int_{R-\alpha^{-2}|k|}^{\infty} \phi_o(x)^2 dx .$$

Entonces, ya que $\int \phi_o(x)^2 dx = 1$,

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{-R} t_N(x)^2 \phi_o(x)^2 dx + \int_R^{\infty} t_N(x)^2 \phi_o(x)^2 dx \\ & < 4e^{\alpha^{-2}|k|^2} \left(\int_{-\infty}^{-R+\alpha^{-2}|k|} \phi_o(x)^2 dx + \int_{R-\alpha^{-2}|k|}^{\infty} \phi_o(x)^2 dx \right) \\ & = 4e^{\alpha^{-2}|k|^2} \left(1 - \int_{-R+\alpha^{-2}|k|}^{R-\alpha^{-2}|k|} \phi_o(x)^2 dx \right) \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} \|\phi^{(k)} - \theta_N^{(k)}\|^2 & < \int_{-R}^R t_N(x)^2 \phi_o(x)^2 dx + 4e^{\alpha^{-2}|k|^2} \left(1 - \int_{-R+\alpha^{-2}|k|}^{R-\alpha^{-2}|k|} \phi_o(x)^2 dx \right) \\ & \leq \left(\max_{-R \leq x \leq R} t_N(x)^2 \right) \int_{-R}^R \phi_o(x)^2 dx + 4e^{\alpha^{-2}|k|^2} \left(1 - \int_{-R+\alpha^{-2}|k|}^{R-\alpha^{-2}|k|} \phi_o(x)^2 dx \right) \\ & \leq \max_{-R \leq x \leq R} t_N(x)^2 + 4e^{\alpha^{-2}|k|^2} \left(1 - \int_{-R+\alpha^{-2}|k|}^{R-\alpha^{-2}|k|} \phi_o(x)^2 dx \right) , \end{aligned}$$

ya que $\int_{-R}^R \phi_o(x)^2 dx < 1$. Entonces, dado $\epsilon > 0$, podemos elegir primeramente un $R > 0$ lo suficientemente grande tal que

$$\int_{-R+\alpha^{-2}|k|}^{R-\alpha^{-2}|k|} \phi_o(x)^2 \geq 1 - \frac{e^{-\alpha^{-2}|k|^2}}{8} \epsilon ,$$

pues la integral es positiva y su límite cuando $R \rightarrow \infty$ es igual a 1; y luego elegir y un número natural N tal que $t_N(x) \leq \sqrt{\epsilon/2}$ para todo $x \in [-R, R]$. Luego,

$$\|\phi^{(k)} - \theta_N^{(k)}\|^2 < \frac{\epsilon}{2} + 4e^{\alpha^{-2}|k|^2} \left(1 - 1 + \frac{e^{-\alpha^{-2}|k|^2}}{8} \epsilon \right) = \epsilon .$$

Esto completa la demostración.

Observación 3: $\phi_n = P_n \phi_o$ donde P_n es un polinomio de grado n .

La afirmación es trivial para $n = 0$. Ahora, usando la hipótesis inductiva,

$$\phi_{n+1} = ((n+1)!)^{-1/2} (a^*)^{n+1} \phi_o = \sqrt{\frac{n!}{(n+1)!}} a^* \left(\frac{1}{\sqrt{n!}} (a^*)^n \phi_o \right) = (n+1)^{-1/2} a^* (P_n \phi_o) .$$

Con $a^* = (2)^{-1/2} (\alpha \hat{x} - i(\alpha \hbar)^{-1} \hat{p})$ y $\phi'_o(x) = -\alpha^2 x \phi_o(x)$, tenemos

$$\begin{aligned} \sqrt{2} (a^* P_n \phi_o)(x) &= \alpha x P_n(x) \phi_o(x) - \alpha^{-1} (P_n \phi_o)'(x) \\ &= \alpha x P_n(x) \phi_o(x) - \alpha^{-1} (P_n)'(x) \phi_o(x) - \alpha^{-1} P_n(x) (-\alpha^2 x \phi_o(x)) \\ &= 2\alpha x P_n(x) \phi_o(x) - \alpha^{-1} (P_n)'(x) \phi_o(x) ; \end{aligned}$$

luego $\phi_{n+1} = P_{n+1} \phi_o$ con $P_{n+1}(x) = (2(n+1))^{-1/2} (2\alpha x P_n(x) - \alpha^{-1} (P_n)'(x))$ que es un polinomio de orden de orden $n+1$.

Observación 4: $\{\phi_n : n = 0, 1, 2, \dots\}$ es una base ortonormal.

Ya que $\langle \phi_n, \phi_m \rangle = \delta_{n,m}$, falta ver que $\{\phi_n : n = 0, 1, 2, \dots\}$ es total. Sea $f \in L^2(\mathbb{R})$ con $\langle f, \phi_n \rangle = 0$ para todo $n = 0, 1, 2, \dots$. Probamos por inducción en n que $\langle f, \psi_n \rangle = 0$ para todo $n = 0, 1, 2, \dots$; la observación 2 indica que $f = 0$.

Para $n = 0$, se tiene $\psi_o = \phi_o$ y por ende $\langle f, \psi_o \rangle = 0$. La hipótesis inductiva es que

$$\langle f, \psi_n \rangle = 0 , \quad \text{para } n = 0, 1, \dots, N .$$

Ahora, usando la observación anterior, $\phi_{N+1} = P_{N+1} \phi_o = \sum_{j=0}^{N+1} c_j \psi_j$ con $c_{N+1} \neq 0$; entonces

$$0 = \langle f, \phi_{N+1} \rangle = \sum_{j=0}^{N+1} c_j \langle f, \psi_j \rangle = c_{N+1} \langle f, \psi_{N+1} \rangle$$

y por ende $\langle f, \psi_{N+1} \rangle = 0$.

3.4.2. Consideraciones sobre el tratamiento analítico

La ecuación de Schrödinger estacionaria en variables adimensionales (3.19) es

$$-f''(\xi) + \xi^2 f(\xi) = \epsilon f(\xi) ,$$

con $\epsilon = 2E/(\hbar\omega)$. E está en el espectro si esta ecuación admite solución polinomialmente acotada. El Ansatz $f = g\phi_o$ conduce a la ecuación diferencial

$$g''(\xi) - 2\xi g'(\xi) + (\epsilon - 1)g(\xi) = 0$$

para g . Ahora si g_o es solución de esta ecuación para $\xi \geq 0$ entonces $\tilde{g}(\xi) = g_o(-\xi)$ es solución de la misma ecuación para $\xi \leq 0$. Por lo tanto, podemos estudiar las soluciones para $\xi \geq 0$. El cambio de variables $g(\xi) = \Phi(\xi^2)$ produce la ecuación diferencial

$$z\Phi''(z) + \left(\frac{1}{2} - z\right)\Phi'(z) + \frac{\epsilon - 1}{4}\Phi(z) = 0$$

para Φ . Esta ecuación es un caso particular de la ecuación diferencial hipergeométrica confluyente degenerada –o ecuación de Kummer–⁶

$$(3.22) \quad zF''(z) + (\gamma - z)F'(z) - \alpha F(z) = 0$$

tomando $\gamma = 1/2$ y $\alpha = (1 - \epsilon)/4$. Cuando $-\gamma$ no es un número natural, esta ecuación tiene dos soluciones linealmente independientes, por ejemplo (estas se construyen mas abajo en el 2.1.)

$$M(\alpha, \gamma; z) , \quad y \quad z^{1-\gamma}M(\alpha - \gamma + 1, 2 - \gamma; z) ,$$

donde $M(\mu, \nu, \cdot)$ es una de las funciones hipergeométricas confluentes, la función de Kummer

$$M(\mu, \nu, z) = 1 + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\mu(\mu+1)\cdots(\mu+j-1)}{\nu(\nu+1)\cdots(\nu+j-1)} \frac{z^j}{j!} .$$

Vemos que la serie se corta si y solo si $\mu = -n$ para algún número natural n ; y en tal caso, $M(-n, \nu, \cdot)$ es un polinomio de grado n . En caso contrario, un análisis detallado muestra que la serie crece como e^z para $z \rightarrow \infty$ ⁷. Aplicando todo esto a nuestro caso, para cualquier ϵ

$$\Phi(z) = AM\left(\frac{1-\epsilon}{4}, \frac{1}{2}; z\right) + B\sqrt{z}M\left(\frac{3-\epsilon}{4}, \frac{3}{2}; z\right) ,$$

con constantes arbitrarias A y B . Ahora, como $f(\xi) = \phi_o(\xi)\Phi(\xi^2) \propto e^{-\xi^2/2}\Phi(\xi^2)$, si $\Phi(z) \asymp e^z$ se tendrá $f(\xi) \asymp e^{\xi^2/2}$. Por lo tanto, solo pertenecen al espectro aquellos valores de E para los cuales Φ es un polinomio. Repitamos esto:

⁶Consultar el Capítulo 13 de *Handbook of Mathematical Functions* (edited by M. Abramowitz, and I.A. Stegun, Dover Publications, Inc. New York) uno de los libros mas útiles que hay en el mundo, que citaremos de ahora en más como A&S. Hay una versión abreviada, *Pocketbook of Mathematical Functions* (edited by M. Danos and J. Rafelski, Verlag Harri Deutsch, Frankfurt/Main, 1984).

Alternativamente, consultar

⁷Consultar loc. cit.; se tiene

$$M(a, b, z) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-b} (1 + \mathcal{O}(|z|^{-1})) ,$$

para $z > 0$.

- Si $\frac{1-\epsilon}{4} = -n$, o sea $\epsilon = 4n+1$, o sea $\epsilon \in \{1, 5, 9, \dots\}$, tomando $B = 0$, Φ es un polinomio⁸.
- Si $\frac{3-\epsilon}{4} = -n$, o sea $\epsilon = 4n + 3$, o sea $\epsilon \in \{3, 7, 11, \dots\}$, tomando $A = 0$, Φ es un polinomio⁹.
- Para todos los demas valores de ϵ , Φ crece exponencialmente con $z = \xi^2$ y por ende f crece como $e^{\xi^2/2}$ para $\xi \rightarrow \infty$.

Por lo tanto, los únicos valores de ϵ que conducen a valores espectrales de E son los números $2n + 1$ con n un número natural arbitrario. Además, estos valores espectrales son simples. Para los valores $2n + 1$ de ϵ , la ecuación diferencial para g es

$$g''(\xi) - 2\xi g'(\xi) + 2ng(\xi) = 0$$

y esta es la ecuación diferencial de los polinomios de Hermite¹⁰ H_n . Entonces, las autofunciones son

$$\phi_n(x) = c_n \phi_0(\alpha x) H_n(\alpha x)$$

con una constante c_n arbitraria que resulta ser igual a $(\sqrt{\pi} 2^n n! / \alpha)^{-1/2}$ para que ϕ_n este normalizada; vale decir

$$c_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi \hbar}}}.$$

Solución de la ecuación diferencial de Kummer (3.22):

El “Ansatz”

$$F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n$$

conduce a

$$\sum_{n=0}^{\infty} n(n-1)c_n z^{n-1} + \gamma \sum_{n=0}^{\infty} n c_n z^{n-1} - \sum_{n=0}^{\infty} n c_n z^n - \alpha \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n = 0$$

e igualando los coeficientes de cada una de las potencias de z ,

$$(k+1)(k+\gamma)c_{k+1} = (k+\alpha)c_k, \quad k = 0, 1, 2, \dots;$$

si $(-\gamma)$ no es un número natural,

$$c_n = c_0 \frac{\alpha(\alpha+1)\cdots(\alpha+n-1)}{n! \gamma(\gamma+1)\cdots(\gamma+n-1)}.$$

Ahora,

$$\frac{|c_{n+1} z^{n+1}|}{|c_n z^n|} = \frac{|1 + (\alpha/n)| |z|}{|1 + (\gamma/n)|(n+1)} \leq \frac{(1 + |(\alpha/n)|) |z|}{(1 - |(\gamma/n)|)(n+1)};$$

⁸En este caso, $\Phi = M(-n, 1/2, \cdot)$ es un polinomio de grado n y por ende g es un polinomio de grado $2n$ sin potencias impares; en particular, g es par.

⁹En este caso, $\Phi(z) = \sqrt{z} M(-n, 1/2, \cdot)$ y por ende g es un polinomio de grado $2n+1$ sin potencias pares; en particular g es impar.

¹⁰Ver, loc. cit., Capítulo 22.

para $\rho > 0$ arbitrario y $|z| \leq \rho$, podemos elegir n_o tal $\rho/(n+1) < 1/4$ para todo $n \geq n_o$ y podemos elegir n_1 tal que $|(\alpha/n)| < 1 - 2|(\gamma/n)|$; luego, para $n \geq \max(n_o, n_1)$ tenemos

$$\frac{|c_{n+1}z^{n+1}|}{|c_n z^n|} < 1/2 .$$

Una aplicación del criterio del cociente indica que la serie

$$M(\alpha, \gamma; z) = 1 + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\alpha(\alpha+1) \cdots (\alpha+j-1) z^j}{\gamma(\gamma+1) \cdots (\gamma+j-1) j!}$$

es absolutamente y uniformemente convergente en el disco de radio ρ del plano complejo. Hemos encontrado entonces una solución de (3.22).

El Ansatz, $F(z) = z^{1-\gamma}G(z)$, para z complejo y no negativo, nos da

$$z^{1-\gamma} (zG''(z) + (2-\gamma-z)G'(z) - (1-\gamma+\alpha)G(z)) = 0 ,$$

y por lo tanto G satisface la ecuación diferencial (3.22) con parámetros $\alpha' = 1 - \gamma + \alpha$ y $\gamma' = 2 - \gamma$. Por lo tanto

$$z^{1-\gamma}M(\alpha+1-\gamma, 2-\gamma; z)$$

es otra solución de (3.22), y es inmediato verificar que es linealmente independiente de $M(\alpha, \gamma; z)$.

3.5. Potenciales periódicos

Consideramos un potencial V periódico de período a ($a > 0$)

$$V(x+a) = V(x) , \quad x \in \mathbb{R} ,$$

y el correspondiente Hamiltoniano

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(\hat{x}) .$$

Escribimos $U(x) = 2m\hbar^{-2}V(x)$.

3.5.1. H no tiene estados ligados:

Para demostrar esto usamos la simetría de traslación del potencial.

El operador de traslación por $y \in \mathbb{R}$ está definido por

$$(V_y \psi)(x) = \psi(x-y) , \quad \psi \in \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}) .$$

V_y es unitario con $(V_y)^* = V_{-y}$. Si $\tilde{\psi}$ es la transformada de Fourier de ψ ,

$$\tilde{\psi}(k) = (2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}} e^{-ikx} \psi(x) dx ,$$

entonces

$$\widetilde{V_y\psi}(k) = (2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}} e^{-ikx} \psi(x-y) dx = (2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}} e^{-ik(x+y)} \psi(x) dx = e^{-iky} \widetilde{\psi}(k).$$

Esto nos permite demostrar facilmente que V_y no tiene autovalores si $y \neq 0$ ($V_0 = \mathbf{1}$ si los tiene). En efecto, si $V_y\psi = \lambda\psi$, entonces $e^{-iky} \widetilde{\psi}(k) = \widetilde{V_y\psi}(k) = \lambda \widetilde{\psi}(k)$ de donde $\widetilde{\psi}(k) = 0$ para $y \neq 0$ y por ende $\psi = 0$.

V_a conmuta con H : $V_a H = H V_a$

$$\begin{aligned} (V_a H \psi)(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x-a) + V(x-a) \psi(x-a) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} (V_a \psi)''(x) + V(x) (V_a \psi)(x) = (H V_a \psi)(x). \end{aligned}$$

No hay estados ligados:

Suponga que $H\psi = E\psi$ con $\|\psi\| = 1$ de manera que el autoespacio \mathcal{E}_E asociado con el autovalor E no es $\{0\}$. Ya que la ecuación diferencial es de segundo orden, la dimensión de \mathcal{E}_E es a lo máximo 2. Como $H(V_a\psi) = V_a H\psi = V_a(E\psi) = E(V_a\psi)$ el subespacio \mathcal{E}_E es invariante ante V_a . Si W_a es la restricción del operador V_a al subespacio \mathcal{E}_E entonces W_a es un operador unitario. Como \mathcal{E}_E es de dimensión finita, W_a puede diagonalizarse en tanto que es un operador normal. Luego, existe $\phi \in \mathcal{E}_E$ con $W_a\phi = \lambda\phi$ y $\phi \neq 0$. Pero entonces ϕ es autofunción de V_a lo que contradice lo visto. Por lo tanto, $\mathcal{E}_E = \{0\}$.

3.5.2. El espectro de H

El espectro de H es entonces puramente continuo. Procedemos a determinar su estructura y veremos que consiste de infinitos intervalos disjuntos. Esta estructura de bandas es crucial para entender fenómenos de la física del sólido cristalino (donde los potenciales son periódicos).

Como en los casos anteriores el problema de encontrar los E que pertenecen al espectro continuo es equivalente a encontrar los $\epsilon = 2m\hbar^{-2}E$ para los cuales la ecuación diferencial

$$(3.23) \quad f''(x) + (\epsilon - U(x))f(x) = 0$$

admite soluciones polinomialmente acotadas pero no de módulo cuadrado integrable (¡ya sabemos que no hay!).

Suponemos que en cualquier intervalo de largo a , V (luego U) es continua salvo en un número finito de discontinuidades finitas. Estas condiciones pueden relajarse para acomodar potenciales más singulares (e.g., potenciales con funciones δ).

Estados de Bloch-Floquet

Para $\epsilon \in \mathbb{R}$ fijo la ecuación diferencial (3.23) admite dos soluciones linealmente independientes f_1 y f_2 . El Wronskiano $W(f_1, f_2)$ dado por

$$W(f_1, f_2)(x) = f_1(x)f_2'(x) - f_1'(x)f_2(x) ,$$

es constante y no nulo. Puesto que U es real, podemos suponer que tanto f_1 como f_2 son funciones a valores reales. Toda solución ψ de (3.23) es de la forma

$$(3.24) \quad \psi = Af_1 + Bf_2 , \quad A, B \in \mathbb{C} .$$

Pero, $V_a f_j$ para $j = 1, 2$ también es solución ya que

$$(V_a f_j)''(x) + (\epsilon - U(x))(V_a f_j)(x) = f_j''(x - a) + (\epsilon - U(x - a))f_j(x - a) = 0 .$$

Luego, existen coeficientes reales $C_{j,\ell}$ tales que

$$(V_a f_1)(x) = f_1(x - a) = C_{1,1}f_1(x) + C_{2,1}f_2(x) ,$$

$$(V_a f_2)(x) = f_2(x - a) = C_{1,2}f_1(x) + C_{2,2}f_2(x) .$$

La matriz

$$C(\epsilon) = \begin{pmatrix} C_{1,1} & , & C_{1,2} \\ C_{2,1} & , & C_{2,2} \end{pmatrix}$$

será la base del análisis que hacemos. Tenemos

1. Si \underline{f} denota el vector columna de componentes f_1 y f_2 ,

$$(3.25) \quad \underline{f}(x - a) = C(\epsilon)^T \underline{f}(x) ,$$

donde T denota la matriz transpuesta, i.e., $(C(\epsilon)^T)_{j,k} = C_{k,j}$.

2. $\det(C(\epsilon)) = 1$.

Tenemos $W(f_1, f_2)(x - a) = W(f_1, f_2)(x)$ pues el Wronskiano es constante. Por otro lado, usando (3.25),

$$\begin{aligned} W(f_1, f_2)(x - a) &= (C_{1,1}f_1(x) + C_{2,1}f_2(x))(C_{1,2}f_1(x) + C_{2,2}f_2(x))' \\ &\quad - (C_{1,1}f_1(x) + C_{2,1}f_2(x))'(C_{1,2}f_1(x) + C_{2,2}f_2(x)) \\ &= \det(C(\epsilon))W(f_1, f_2)(x) ; \end{aligned}$$

luego $1 = \det(C(\epsilon))$.

3. Si g_1, g_2 es otro par de soluciones de (3.23) linealmente independientes la matriz $C(\epsilon)$ asociada con este par es similar a la matriz $C(\epsilon)$ asociada con el par f_1, f_2 . En particular, la traza y los autovalores de $C(\epsilon)$ solo dependen de ϵ y no del sistema fundamental elegido.

En efecto si g_1, g_2 es otro par de soluciones linealmente independientes de (3.23) (al mismo ϵ) entonces por (3.24)

$$\underline{g} = S\underline{f} .$$

Además, $W(g_1, g_2)$ es constante y no nulo por un lado, e igual a $\det(S)W(f_1, f_2)$ por otro lado (con el mismo cálculo hecho en el punto 2.). Luego $\det(S)$ no es 0 con lo cual S es invertible. Sea $C'(\epsilon)$ la matriz asociada con \underline{g} o sea

$$\underline{g}(x - a) = C'(\epsilon)^T \underline{g}(x) .$$

Tenemos,

$$C'(\epsilon)^T \underline{g}(x) = \underline{g}(x - a) = S \underline{f}(x - a) = SC(\epsilon)^T \underline{f}(x) = SC(\epsilon)^T S^{-1} \underline{g}(x) ,$$

o sea

$$C'(\epsilon)^T = SC(\epsilon)^T S^{-1} ,$$

y entonces

$$C'(\epsilon) = (S^T)^{-1} C(\epsilon) S^T$$

4. Los autovalores de $C(\epsilon)$ son las soluciones de la ecuación

$$\lambda^2 - \text{tr}(C(\epsilon))\lambda + 1 = 0 ,$$

o sea

$$\lambda_{\pm} = \frac{\text{tr}(C(\epsilon))}{2} \pm \frac{\sqrt{\text{tr}(C(\epsilon))^2 - 4}}{2} .$$

Se tienen las siguientes alternativas:

- a) $|\text{tr}(C(\epsilon))| > 2$: los autovalores son reales y distintos, $\lambda_+ \neq \lambda_-$; uno de ellos es de módulo estrictamente mayor que 1 y el otro es de módulo estrictamente menor que 1. Hay autovectores a estos autovalores.
- b) $|\text{tr}(C(\epsilon))| = 2$: los autovalores son idénticos, $\lambda_+ = \lambda_- = \text{tr}(C(\epsilon))/2$, y de módulo 1. Hay a lo menos un autovector, pero puede haber un solo.
- c) $|\text{tr}(C(\epsilon))| < 2$: los autovalores son distintos y complejos conjugados entre si, $\lambda_- = \overline{\lambda_+}$, y de módulo 1. Hay autovectores a estos autovalores.

Podemos ahora demostrar que hay soluciones de (3.23) tales que

$$(3.26) \quad (V_a f)(x) = f(x - a) = \lambda f(x) .$$

En efecto, si f es solución entonces tiene el desarrollo (3.24) y (3.26) es equivalente a

$$\begin{aligned} \lambda(Af_1(x) + Bf_2(x)) &= Af_1(x - a) + Bf_2(x - a) \\ &= A(C_{1,1}f_1(x) + C_{2,1}f_2(x)) + B(C_{1,2}f_1(x) + C_{2,2}f_2(x)) \\ &= (C_{1,1}A + C_{1,2}B)f_1(x) + (C_{2,1}A + C_{2,2}B)f_2(x) , \end{aligned}$$

o sea

$$(3.27) \quad C(\epsilon) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} .$$

Observe que si la solución f satisface (3.26) entonces para todo entero n se tiene

$$(3.28) \quad |f(x - na)| = |\lambda|^n |f(x)| .$$

Discutimos entonces los tres casos posibles identificados en la discusión del espectro de $C(\epsilon)$:

- a) $|tr(C(\epsilon))| > 2$: Hay soluciones (A, B) no triviales de (3.27) para λ_{\pm} y por ende soluciones f_{\pm} de (3.23) linealmente independientes que satisfacen (3.26), luego (3.28), para λ_{\pm} . Entonces, suponiendo que $|\lambda_+| > 1 > |\lambda_-|$ (el otro caso es análogo), se tiene

$$|f_+(x - na)| = |\lambda_+|^n |f_+(x)|, \quad |f_-(x - na)| = |\lambda_-|^n |f_-(x)|.$$

Veamos que entonces f_{\pm} no es polinomialmente acotada. Considere f_+ y $x < -a$; entonces $x = -na - z$ con $0 \leq z < a$ y n entero positivo, con lo cual

$$\begin{aligned} |f_+(x)| &= |\lambda_+|^n |f_+(-z)| = |f_+(-z)| \exp(n \log(|\lambda_+|)) \\ &= |f_+(-z)| \exp(a^{-1}(|x| - z) \log(|\lambda_+|)) \geq |f_+(-z)| \exp(a^{-1}(|x| - a) \log(|\lambda_+|)) \end{aligned}$$

y f_+ crece exponencialmente para $x \rightarrow -\infty$ ya que $\log(|\lambda_+|) > 0$. Considere f_- y $x > a$; entonces $x = -na + z$ con $0 \leq z < a$ y n entero negativo,

$$\begin{aligned} |f_-(x)| &= |\lambda_-|^n |f_-(z)| = |f_-(z)| \exp(n \log(|\lambda_-|)) \\ &= |f_-(z)| \exp(a^{-1}(-x + z) \log(|\lambda_-|)) \geq |f_-(z)| \exp(a^{-1}(x - a) \log(1/|\lambda_-|)) \end{aligned}$$

y f_- crece exponencialmente para $x \rightarrow \infty$ ya que $\log(1/|\lambda_-|) > 0$. Pero entonces ni f_1 ni f_2 son polinomialmente acotadas.

- b) Hay a lo menos una solución no trivial de (3.27) y por ende una solución g que satisface (3.26) y (3.28). Luego, ya que g es acotada en algún intervalo de largo a por su continuidad, g resulta acotada.
- c) Hay soluciones no triviales de (3.27) para λ_{\pm} y, asociadas a estas, dos soluciones f_{\pm} que satisfacen (3.26) y (3.28). Como f_{\pm} son acotadas en algún intervalo de largo a , (3.28) indica que son acotadas. Además, conviniendo que $\lambda_{\pm} = \frac{tr(C(\epsilon))}{2} \pm i \frac{\sqrt{4 - tr(C(\epsilon))^2}}{2}$ con lo cual $Im(\lambda_+) > 0$, tenemos

$$\lambda_+ = e^{iKa}, \quad \lambda_- = e^{-iKa}$$

donde $K \in (0, \pi/a)$. Para las funciones

$$\phi_{\pm}(x) = \exp\{\pm iKx\} f_{\pm}(x)$$

se tiene la propiedad

$$\phi_{\pm}(x - a) = \exp\{\pm iK(x - a)\} f_{\pm}(x - a) = \exp\{\pm iK(x - a)\} e^{\pm iKa} f_{\pm}(x) = \phi_{\pm}(x)$$

derivada de (3.26), o sea que ϕ_{\pm} son periódicas de período a .

Lo recién visto se conoce como Teorema de Floquet-Bloch:

Si $-2 < tr(C(\epsilon)) < 2$ entonces (3.23) admite dos soluciones acotadas linealmente independientes

$$f_{\pm}(x) = e^{\mp iKx} \phi_{\pm}(x),$$

donde ϕ_{\pm} son periódicas con el mismo período que el potencial. Se tiene

$$(3.29) \quad \cos(Ka) = tr(C(\epsilon))/2.$$

$\hbar^2\epsilon/(2m)$ pertenece al espectro de H .

Si $\text{tr}(C(\epsilon)) = \pm 2$ entonces (3.23) admite a lo menos una solución f acotada que es periódica en el caso $\text{tr}(C(\epsilon)) = 2$ y anti-periódica, o sea $f(x - a) = -f(x)$, para el caso $\text{tr}(C(\epsilon)) = -2$. $\hbar^2\epsilon/(2m)$ pertenece al espectro de H .

Si $|\text{tr}(C(\epsilon))| > 2$ entonces (3.23) no admite soluciones acotadas y $\hbar^2\epsilon/(2m)$ no pertenece al espectro de H .

Sabemos también que el espectro de H es acotado por debajo por el número $V_o = \inf_{x \in \mathbb{R}} V(x)$, o sea $\sigma(H) \subset [V_o, \infty)$. No es un gran acto de fé creer que $\epsilon \mapsto \text{tr}(C(\epsilon))$ es continua (jesto se puede demostrar!). Aceptado esto, y teniendo en cuenta que el espectro no es vacío, habrá un primer valor ϵ_o de ϵ a la derecha de V_o tal que $|\text{tr}(C(\epsilon_o))| = 2$. Por lo tanto la curva $\epsilon \rightarrow \text{tr}(C(\epsilon))$ toca o entra a la banda $[-2, 2]$. Pero como el espectro es continuo, en todo entorno de ϵ_o hay otro punto del espectro; por lo tanto no toca sino que entra a la banda. ¿Se puede quedar para siempre en la banda $[-2, 2]$ a la derecha de ϵ_o ? Si, esto sucede cuando U (o sea V) es constante y en ese caso $\epsilon_o = U$. Pero si U no es constante vuelve a salir de $[-2, 2]$ a la derecha de ϵ_o en ϵ_1 , luego vuelve a entrar en ϵ_2 a la derecha de ϵ_1 , etc., etc. sin límite. Un resultado debido a Birkhoff es endemoniadamente preciso¹¹:

Si definimos la multiplicidad de una raíz de la ecuación $|\text{tr}(C(\epsilon))| = 2$ como 2 si hay dos soluciones linealmente independientes y acotadas de (3.23), y como 1 si hay (módulo multiplicación por una constante) una sola solución acotada de (3.23); entonces: Sean $\epsilon_o \leq \epsilon_1 \leq \epsilon_2 \leq \dots$ las raíces de $\text{tr}(C(\epsilon)) = 2$ enumeradas crecientemente y teniendo en cuenta la multiplicidad. Sean $\epsilon'_o \leq \epsilon'_1 \leq \dots$ las raíces de $\text{tr}(C(\epsilon)) = -2$ enumeradas de la misma manera. Entonces se tiene:

$$\epsilon_o < \epsilon'_o \leq \epsilon'_1 < \epsilon_1 \leq \epsilon_2 < \epsilon'_2 \leq \epsilon'_3 < \epsilon_3 \leq \epsilon_4 < \epsilon'_4 \leq \epsilon'_5 < \dots$$

El espectro es entonces

$$[\epsilon_o, \epsilon'_o] \cup [\epsilon'_1, \epsilon_1] \cup [\epsilon_2, \epsilon'_2] \cup [\epsilon'_3, \epsilon_3] \cup [\epsilon_4, \epsilon'_4] \cup [\epsilon'_5, \epsilon_5] \cup \dots$$

Todos los intervalos de esta unión infinita son no vacíos, pero dos intervalos sucesivos pueden tener un punto en común. Por ejemplo si $\epsilon'_o = \epsilon'_1$ entonces $[\epsilon_o, \epsilon'_o] \cup [\epsilon'_1, \epsilon_1] = [\epsilon_o, \epsilon_1]$. Esto sucede cuando para $\epsilon'_o = \epsilon'_1$ hay dos soluciones acotadas de (3.23).

Determinación de la matriz $C(\epsilon)$

Proveemos ahora una construcción de la matriz $C(\epsilon)$. Consideremos la ecuación diferencial (3.23) en el intervalo $I_o = [0, a]$. Sean $f_1^{(0)}$ y $f_2^{(0)}$ soluciones en este intervalo con

$$(3.30) \quad \boxed{f_1^{(0)}(0) = 1, \quad (f_1^{(0)})'(0) = 0;}$$

¹¹Vea: H. Hochstadt, *The Functions of Mathematical Physics*. Wiley, New York, 1971.

$$(3.31) \quad \boxed{f_2^{(0)}(0) = 0, \quad (f_2^{(0)})'(0) = 1.}$$

Considere ahora el intervalo $I_1 = [a, 2a]$ y sean $f_j^{(1)}$ soluciones de (3.23) en I_1 con

$$f_j^{(1)}(a) = f_j^{(0)}(a), \quad (f_j^{(1)})'(a) = (f_j^{(0)})'(a);$$

o sea que las soluciones en I_1 se pegan continuamente con las correspondientes soluciones en I_0 en el punto común (a) de estos intervalos. Procedamos con este proceso obteniendo para cada $n \in \{0, 1, 2, \dots\}$ un par de soluciones $f_j^{(n)}$ de (3.23) en el intervalo $I_n = [na, (n+1)a]$ tales que

$$f_j^{(n+1)}((n+1)a) = f_j^{(n)}((n+1)a), \quad (f_j^{(n+1)})'((n+1)a) = (f_j^{(n)})'((n+1)a);$$

Hagamos lo mismo hacia la izquierda de I_0 , obteniendo para cada intervalo $I_{-n-1} = [-(n+1)a, -na]$ con $n \in \{0, 1, 2, \dots\}$ un par de soluciones $f_j^{(-n-1)}$ de (3.23) en ese intervalo con

$$f_j^{(-n-1)}(-na) = f_j^{(-n)}(-na), \quad (f_j^{(-n-1)})'(-na) = (f_j^{(-n)})'(-na).$$

Obtenemos así –pegando las $f_j^{(m)}$ – funciones continuas f_j ($j = 1, 2$) que son soluciones de (3.23) linealmente independientes. La definición de la matriz $C(\epsilon)$, evaluada en $x = a$ indica que

$$\underline{f}(0) = C(\epsilon)^T \underline{f}(a)$$

de donde

$$\begin{aligned} \underline{f}(a) &= (C(\epsilon)^T)^{-1} \underline{f}(0) = \begin{pmatrix} C_{2,2} & , & -C_{2,1} \\ -C_{1,2} & , & C_{1,1} \end{pmatrix} \underline{f}(0) \\ &= \begin{pmatrix} C_{2,2} & , & -C_{2,1} \\ -C_{1,2} & , & C_{1,1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{2,2} \\ -C_{1,2} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

y

$$\underline{f}'(a) = \begin{pmatrix} C_{2,2} & , & -C_{2,1} \\ -C_{1,2} & , & C_{1,1} \end{pmatrix} \underline{f}'(0) = \begin{pmatrix} -C_{2,1} \\ C_{1,1} \end{pmatrix};$$

o sea

$$\boxed{C(\epsilon) = \begin{pmatrix} f_2'(a) & , & -f_2(a) \\ -f_1'(a) & , & f_1(a) \end{pmatrix}.}$$

Para construir $C(\epsilon)$ basta entonces resolver (3.23) en el intervalo $[0, a]$ con las condiciones (3.30) y (3.31) en el punto $x = 0$.

La ecuación (3.29) que determina implícitamente la relación de dispersión $K \rightarrow \epsilon(K)$ en los intervalos que pertenecen al espectro, es entonces:

$$\boxed{\cos(Ka) = (f_1(a) + f_2'(a))/2.}$$

El potencial de Kronig-Penney

El potencial de Kronig-Penney modela el potencial en una red periódica infinita unidimensional. En el intervalo $(0, a)$, con $a > 0$ está dado por

$$U(x) = \begin{cases} 0 & , \quad 0 < x < b \\ U_o & , \quad b < x < a \end{cases}$$

donde $0 < b < a$ y $U_o > 0$, y se extiende periódicamente a toda la recta real.

En un ejercicio se requiere estudiar este potencial y determinar el espectro del operador asociado. Usando el método descripto, podemos determinar $tr(C(\epsilon))$ obteniendo el siguiente resultado:

$$tr(C(\epsilon)) = \begin{cases} 2 \cosh(\kappa(a-b)) + b\kappa \sinh(\kappa(a-b)) & , \quad \epsilon = 0 \\ 2 \cos(kb) \cosh(\kappa(a-b)) + \frac{\kappa^2 - k^2}{k\kappa} \sin(kb) \sinh(\kappa(a-b)) & , \quad 0 < \epsilon < U_o \\ 2 \cos(kb) - k \sin(kb)(a-b) & , \quad \epsilon = U_o \\ 2 \cos(kb) \cos(\kappa(a-b)) - \frac{\kappa^2 + k^2}{k\kappa} \sin(kb) \sin(\kappa(a-b)) & , \quad \epsilon > U_o \end{cases}$$

donde

$$k = \sqrt{|\epsilon|} , \quad \kappa = \sqrt{|\epsilon - U_o|} .$$

Ya sabemos que para $\epsilon < 0$ se tiene $|tr(C(\epsilon))| > 2$, pero de todas maneras,

$$tr(C(\epsilon)) = 2 \cosh(kb) \cosh(\kappa(a-b)) + \frac{\kappa^2 + k^2}{k\kappa} \sinh(kb) \sinh(\kappa(a-b)) , \quad \text{si } 0 > \epsilon ;$$

y esto es estrictamente mayor que 2 pues el cosh es mayor que 1 para cualquier argumento no nulo, y el sinh de un argumento positivo es positivo. Obsérvese también que, $\mathbb{R} \ni \epsilon \rightarrow tr(C(\epsilon))$ es continua; esto se verifica en las fórmulas con ayuda de las relaciones $\lim_{y \rightarrow 0} \sin(yx)/y = x$ y $\lim_{y \rightarrow 0} \sinh(yx)/y = x$.

Ya que

$$\lim_{\epsilon \rightarrow \infty} (tr(C(\epsilon)) - 2 \cos(ka)) = 0 ,$$

vemos que la distancia entre las bandas sucesivas del espectro tiende a 0 a medida que aumentamos ϵ , i.e., el espectro se vuelve “continuo”.

3.6. Generalidades II

3.6.1. Criterios para la existencia de estados ligados. Cotas para el número de estados ligados

Serra: Si $|V|$ es integrable y $\int V(x)dx < 0$ y H es acotado por debajo, entonces H admite un estado ligado.

3.6.2. Otros resultados

El teorema virial no tiene nada que ver con la dimensión. En una dimensión, dice que si

$$H = (2m)^{-1}\widehat{p}^2 + V(\widehat{x})$$

entonces para cualquier estado ligado ψ de H ,

$$(3.32) \quad \frac{1}{2m}\langle\psi, \widehat{p}^2\psi\rangle = \frac{1}{2}\langle\psi, \widehat{x}V'(\widehat{x})\psi\rangle .$$

Un caso particular útil se obtiene cuando V es una función homogénea de grado α , o sea

$$V(\lambda x) = \lambda^\alpha V(x) , \quad \text{para todo } \lambda > 0 .$$

En tal caso se tiene la relación de Euler (derive respecto de λ y luego ponga $\lambda = 1$) $xV'(x) = \alpha V(x)$ y el teorema virial toma la forma

$$\frac{1}{2m}\langle\psi, \widehat{p}^2\psi\rangle = \frac{\alpha}{2}\langle\psi, V(\widehat{x})\psi\rangle ,$$

conectando directamente el valor esperado de la energía cinética con aquel de la energía potencial para estados ligados. En el caso del oscilador armónico, $\alpha = 2$, y entonces ambos valores esperados son iguales.

La demostración formal de (3.32) es otra aplicación de que cualquiera sea A se tiene

$$\langle\psi, [H, A]\psi\rangle = 0$$

si ψ es estado ligado. Eligiendo $A = \widehat{x}\widehat{p}$, se obtiene (3.32):

$$\begin{aligned} [\widehat{H}, \widehat{x}\widehat{p}] &= \frac{1}{2m} (\widehat{p}[\widehat{p}, \widehat{x}]\widehat{p} + \widehat{p}\widehat{x}[\widehat{p}, \widehat{p}] + \widehat{x}[\widehat{p}, \widehat{p}]\widehat{p} + [\widehat{p}, \widehat{x}]\widehat{p}\widehat{p}) + \widehat{x}[V(\widehat{x}), \widehat{p}] + [V(\widehat{x}), \widehat{x}]\widehat{p} \\ &= \frac{-i\hbar}{m}\widehat{p}^2 + \widehat{x}(i\hbar)V'(\widehat{x}) = -2i\hbar \left(\frac{1}{2m}\widehat{p}^2 - \frac{1}{2}\widehat{x}V'(\widehat{x}) \right) . \end{aligned}$$

La demostración es formal pues tanto H como A son operadores no acotados y se precisa cierto cuidado en el manejo de los conmutadores; bajo condiciones típicas sobre V (que garantizan que H sea autoadjunto) y sobre V' , las manipulaciones formales pueden fundamentarse.

Faltan, quizás, otros resultados. Sino cambiar el título de esto.