

ANÁLISIS DE POTENCIALES SINGULARES EN SISTEMAS CUÁNTICOS BIDIMENSIONALES

Trabajo Fin de Grado

Autor:

CÉSAR ROMANIEGA SANCHO

Dirigido por:

L. M. Nieto Calzada y J. M^a Muñoz Castañeda

13 de julio de 2016



Universidad de Valladolid

Facultad de Ciencias

Departamento de Física Teórica, Atómica y Óptica

Índice general

Agradecimientos	III
Resumen	v
1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.2. Objetivos	2
1.3. Esquema de trabajo	2
1.4. Desarrollos futuros	3
2. Caso no relativista: uno y dos <i>anillos</i>	5
2.1. Un <i>anillo</i>	5
2.1.1. Dependencia temporal y angular	6
2.1.2. Parte radial	9
2.1.3. Estados ligados	14
2.1.4. Consecuencias físicas	17
2.2. Dos <i>anillos</i>	21
2.2.1. Ecuación trascendente para la energía	21
2.2.2. Estados ligados	23
3. Caso no relativista: n <i>anillos</i>	27
3.1. Condiciones para una región arbitraria	27
3.2. Tres <i>anillos</i>	28
3.3. Búsqueda de la fórmula de recurrencia	29
3.3.1. Coeficientes intermedios	32
4. Caso relativista de spin 1/2	37
4.1. Potencial central bidimensional	37
4.1.1. Potencial Coulombiano	40
4.1.2. Potencial $V(r) = A\delta(r - r_0)$	43
5. Scattering no relativista: un <i>anillo</i>	47
5.1. Cálculo de los desfasajes	47
5.2. Efecto Casimir	51

A. Funciones de Bessel	53
A.1. Funciones de Bessel	53
A.1.1. Definiciones	53
A.1.2. Propiedades	53
A.1.3. Relaciones de recurrencia	54
A.1.4. Comportamiento asintótico	55
A.2. Funciones de Bessel modificadas	55
A.2.1. Definiciones	55
A.2.2. Propiedades	55
A.2.3. Relaciones de recurrencia	57
A.2.4. Comportamiento asintótico	57
B. Expresiones para distintos <i>anillos</i>	59
B.1. Determinantes	60
B.2. Coeficientes	61
C. Resultados útiles	63
C.1. General.	63
C.2. Distribuciones.	64

Agradecimientos

En primer lugar agradecer a mis padres todo el esfuerzo dedicado para que hoy pueda estar culminando mi grado en Física con este trabajo. Gracias por hacer que nunca me haya faltado nada de lo que he necesitado para completar mis estudios y por inculcarme esos valores que me han hecho llegar hasta aquí. Mención especial a mi hermano y hermana en los que siempre he encontrado una motivación adicional.

Agradecer a mi tutor, Luis Miguel Nieto, por guiarme en las situaciones adversas al igual que por la cercanía y afecto siempre presentes durante la realización del proyecto. También a José María Muñoz Castañeda por toda la ayuda proporcionada y el interés mostrado en nuestro estudio. No quiero olvidarme del resto de profesores que han completado mi formación y del Ministerio de Educación, Cultura y Deporte por la concesión de la Beca de Colaboración.

Han sido cuatro ilusionantes años por Valladolid donde he forjado vínculos especiales con personas que harán que nunca olvide esta etapa.

Gracias a todos.

Resumen

En este trabajo de investigación se aborda el análisis de un problema mecano-cuántico novedoso con interés en el estudio de materiales bidimensionales con ciertas aplicaciones tecnológicas (grafeno y aislantes topológicos). Matemáticamente también tiene interés, porque se resuelven ecuaciones en derivadas parciales para sistemas de dos dimensiones con una variedad unidimensional.

El núcleo del estudio consiste en resolver las ecuaciones de Schrödinger y Dirac para un potencial singular con simetría radial del tipo

$$V(r) = A \delta(r - r_0).$$

Ha sido resuelto para $A < 0$, hallando los estados ligados relativistas y no relativistas. En el caso no relativista también se han encontrado los estados de scattering y desfasajes, imprescindibles para calcular magnitudes físicas de interés y con aplicaciones adicionales a la teoría cuántica de campos.

Además se ha tratado de generalizar, de manera original, los resultados para los estados ligados del caso no relativista cuando existen n singularidades semejantes.

Por lo tanto este texto presenta un estudio transversal aplicando las técnicas matemáticas del Grado, a un problema de interés en mecánica cuántica, teoría cuántica de campos y física de materiales.

Capítulo 1

Introducción

“God made the bulk; surfaces were invented by the devil.”

W. Pauli.

1.1. Motivación

Durante gran parte del s. XX la teoría cuántica fue desarrollada con el objetivo de explicar la estructura elemental de la materia, así como sus interacciones fundamentales. Este exitoso desarrollo alcanzó su culminación en el 2012 con la medición directa del bosón de Higgs en el Gran Colisionador de Hadrones (LHC). Sin embargo, desde finales de la década de los 90 el gran desarrollo de la física experimental en la nanoescala ha permitido el estudio de sistemas cuyo comportamiento es puramente cuántico, con un tamaño típico de unos cuantos nanómetros. En especial, cabe resaltar el desarrollo experimental que ha permitido el crecimiento de grafeno [1], los aislante topológicos [2], [3] y otros metamateriales planares, así como otros sistemas cuánticos macroscópicos de gran importancia para el desarrollo de la computación cuántica. La viabilidad experimental y tecnológica de estos prometedores sistemas cuánticos requiere de un esfuerzo teórico y matemático para el desarrollo del formalismo cuántico que se adapte a estos.

Desde un punto de vista teórico estos sistemas tan prometedores para el desarrollo tecnológico de las décadas venideras son descritos por la mecánica cuántica y la teoría cuántica de campos confinada a espacios de dimensión baja (2D y 1D) en presencia de bordes y contornos. Es por ello que el desarrollo de la física cuántica definida sobre este tipo de espacios tiene un gran interés científico. Los efectos cuánticos que producen la presencia de bordes, fronteras, y contornos son muchos, pero de todos ellos el efecto puramente cuántico más importante a escala nanométrica es el efecto Casimir (descubierto teóricamente por H. B. G Casimir [4]).

Desde el año 2009 el grupo de *Física matemática* de la Universidad de Valladolid ha realizado un amplio estudio de los sistemas que involucran potenciales singulares en una dimensión para situaciones no relativistas [5], [6]-[8]. De forma natural parece que la forma de continuar con este estudio es trasladar estos potenciales a los sistemas de dos dimensiones, tanto para la mecánica cuántica no relativista como

para la relativista. En este sentido, el presente trabajo es pionero y abre una línea de trabajo que enlaza con las aplicaciones de este tipo de técnicas al estudio de materiales bidimensionales de interés tecnológico, en especial el grafeno y los materiales relacionados.

1.2. Objetivos

Este texto se presenta como una introducción académica y formal al estudio de un tipo concreto de sistemas cuánticos en dos dimensiones. Se pretende hallar los estados ligados y de scattering para sistemas bidimensionales cuando los potenciales son singulares, centrándonos en aquellos que involucren $\delta(r)$ y dejando a un lado la posible generalización en los que también aparece su derivada, $\delta'(r)$, para futuros trabajos. Los estados ligados se buscarán en el marco de la mecánica cuántica no relativista y relativista, habiendo analizado también el scattering en la primera de ellas.

Por último destacar que este trabajo sirve para la familiarización con este tipo de funciones generalizadas que han suscitado cierto interés en los últimos años.

1.3. Esquema de trabajo

En el *Capítulo 2* se aborda el cálculo de los posibles estados ligados para configuraciones con uno y dos *anillos* en posiciones (concéntricas) arbitrarias, es decir:

$$V(r) = A\delta(r - r_0), \quad V(r) = A_1\delta(r - r_1) + A_2\delta(r - r_2).$$

Las soluciones a los valores de la energía vienen en términos de sendas ecuaciones trascendentes que se analizan con detalle. Tras este estudio, en el *Capítulo 3* se plantea una generalización para la ecuación trascendente que nos proporcionaría los valores de energía admisibles en nuestro sistema cuando existen $n \in \mathbb{N}$ singularidades de deltas de Dirac concéntricas, con radios arbitrarios, a lo largo del plano. Los resultados no son del todo satisfactorios ya que este desarrollo presenta cierta complejidad.

La búsqueda de estados ligados en la situación relativista para partículas de spin 1/2 se estudia en el *Capítulo 4*. Este análisis tiene cierta originalidad ya que se dan las expresiones en dos dimensiones para los estados ligados con el potencial Coulombiano y se analiza

$$V(r) = A\delta(r - r_0),$$

potencial del que no han sido encontrados los estados ligados en la bibliografía. De nuevo para éste último nos aparece una ecuación trascendente que se analiza de forma cualitativa.

Para el último capítulo, se estudian los desfasajes y las funciones de onda dispersadas para un potencial similar al primero del *Capítulo 2*. Finalmente se da una pequeña introducción a las posibles aplicaciones de estos resultados en el efecto Casimir.

Los tres apéndices que aparecen al final del trabajo tienen la siguiente utilidad. El *Apéndice A* resume las propiedades más importantes y las más usadas de las funciones de Bessel, tanto las usuales como las modificadas, ya que estas aparecen constantemente a lo largo del texto debido a la simetría radial que presentan nuestros potenciales. En el *Apéndice B* se dan los determinantes y los coeficientes que nos ayudan a encontrar la ecuación trascendente general que se estudia en el *Capítulo 3*. Se colocan así por dos motivos:

- Son expresiones extensas que no conviene mezclar con nuestro análisis.
- El hecho de agruparlas puede ser conveniente para una óptima comparación entre las distintas configuraciones con diferentes *anillos*.

Finalmente el último apéndice incluye ciertas demostraciones que suelen obviarse en los textos pero que pueden ser de cierta utilidad para comprender con más detalle el estudio y sutilezas que presentan estos potenciales.

1.4. Desarrollos futuros

A corto plazo, y vistos los resultados de este estudio, se plantean dos caminos por los que continuar:

1. Proseguir con el análisis de más anillos en el caso relativista para partículas de spin $1/2$, analizando también los estados de scattering.
2. Adentrarnos en la teoría cuántica de campos, QFT, efectuando el cálculo de las fluctuaciones cuánticas de vacío entre dos discos.

A la vista de los resultados que se vayan obteniendo de ambos, se verá cuál puede ser el camino más fructífero para nuestros propósitos.

Capítulo 2

Caso no relativista: uno y dos *anillos*

En este capítulo vamos a presentar la resolución de la ecuación de Schrödinger en el plano para hallar los estados ligados de un sistema físico descrito por potenciales radiales singulares, en un anillo de radio r_0 y en dos anillos de radios r_1 y r_2 .

2.1. Un *anillo*

Veamos de forma detallada cómo podemos encontrar los estados ligados para nuestros potenciales. Supongamos primero que el potencial tiene la siguiente forma:

$$V(r) = A\delta(r - r_0), \quad \text{con} \quad A < 0, \quad r := |\vec{r}|, \quad r_0 > 0. \quad (2.1)$$

Elegimos $A < 0$ para que el potencial sea atractivo en cierta región y poder así tener estados ligados. Si $A > 0$ solo habría estados de scattering. Este potencial está representado de forma esquemática en la *Figura 2.1*, donde vemos que esencialmente tenemos una circunferencia de deltas de Dirac.

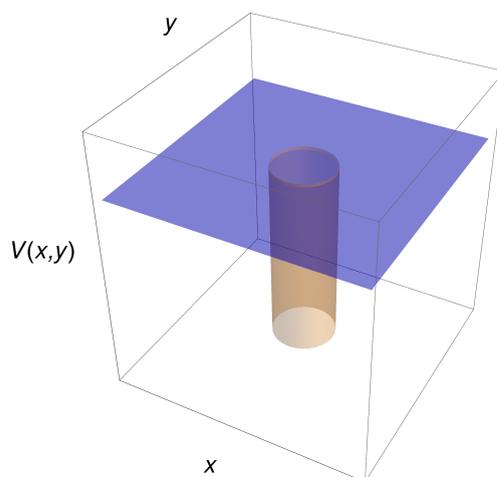


Figura 2.1: Potencial $V(r) = A\delta(r - r_0)$.

Por lo tanto, la ecuación de Schrödinger a resolver es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + A \delta(r - r_0) \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}. \quad (2.2)$$

Debido a la simetría radial que presenta el problema, planteamos el cambio de variable a coordenadas polares, con lo que la ecuación (2.2) adopta la siguiente forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi(\vec{r}, t)}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi(\vec{r}, t)}{\partial \theta^2} \right) + A \delta(r - r_0) \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}. \quad (2.3)$$

2.1.1. Dependencia temporal y angular

Para resolver esta ecuación diferencial usamos el *método de separación de variables*, i.e., suponemos que la función de onda es del tipo

$$\psi(r, \theta, t) = R(r) \Theta(\theta) T(t).$$

Si lo introducimos en (2.3) y multiplicamos a ambos miembros por $1/\psi(r, \theta, t)$ obtenemos:

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r} \frac{1}{R(r)} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{1}{R(r)} \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\theta^2} \right] + A \delta(r - r_0) \\ & = \frac{i\hbar}{T(t)} \frac{dT(t)}{dt}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Teniendo en cuenta la dependencia funcional de cada miembro¹ en la ecuación anterior, aparece la primera constante de separación que coincide con la energía (autovvalor de nuestro hamiltoniano). Por ello:

$$i\hbar \frac{1}{T(t)} \frac{dT(t)}{dt} = E = C_1. \quad (2.5)$$

La parte temporal tiene fácil solución ya que se trata de una ecuación diferencial lineal de primer orden homogénea

$$T(t) = T(t_0) e^{-iE(t-t_0)/\hbar}. \quad (2.6)$$

Podemos hacer lo mismo con la parte angular multiplicando el miembro izquierdo de (2.4) por r^2 . Si agrupamos llegamos a

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2 r^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{1}{R(r)} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{1}{R(r)} \frac{d^2 R(r)}{dr^2} \right) - E r^2 + A r^2 \delta(r - r_0) \\ & = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\theta^2}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

¹En (2.4) tenemos $F(r, \theta) = G(t)$. Si aplicamos ∂_t en ambos miembros obtenemos $G'(t) = 0$, siendo $G(t) = Cte = F(r, \theta)$ la solución a esta ecuación diferencial.

De nuevo con la dependencia funcional en cada miembro de (2.7) obtenemos

$$\frac{d^2\Theta(\theta)}{d\theta^2} - C_2 \frac{2m}{\hbar^2} \Theta(\theta) = 0, \quad (2.8)$$

donde C_2 es la segunda constante de separación. Las soluciones de (2.8) dependen de esta constante y se agrupan en las siguientes situaciones:

$$\Theta(\theta) = \begin{cases} a_1 e^{\ell\theta} + a_2 e^{-\ell\theta}, & \text{si } 2mC_2/\hbar^2 = \ell^2 > 0, \\ a_1\theta + a_2, & \text{si } 2mC_2/\hbar^2 = 0, \\ a_1 e^{i\ell\theta} + a_2 e^{-i\ell\theta}, & \text{si } 2mC_2/\hbar^2 = -\ell^2 < 0, \end{cases} \quad (2.9)$$

con $\ell \in \mathbb{R}$. Además, por periodicidad se debe cumplir

$$\Theta(\theta) = \Theta(\theta + 2\pi). \quad (2.10)$$

Veamos si es posible que se cumpla esta condición en los tres casos planteados en (2.9).

- Al llevar (2.10) a la primera situación de (2.9) se tiene

$$a_1 e^{\ell(\theta+2\pi)} + a_2 e^{-\ell(\theta+2\pi)} = a_1 e^{\ell\theta} + a_2 e^{-\ell\theta}. \quad (2.11)$$

Pasando todo a uno de los miembros y sacando factor común en cada sumando

$$a_1 e^{\ell\theta} (e^{2\pi\ell} - 1) + a_2 e^{-\ell\theta} (e^{-2\pi\ell} - 1) = 0. \quad (2.12)$$

Si ahora usamos la *Proposición C.1.1* del *Apéndice C* llegamos a que:

$$\begin{cases} a_1 (e^{2\pi\ell} - 1) = 0. \\ a_2 (e^{-2\pi\ell} - 1) = 0. \end{cases} \quad (2.13)$$

La única forma de que este sistema tenga solución no trivial² se consigue exigiendo

$$(e^{2\pi\ell} - 1) = (e^{-2\pi\ell} - 1) = 0.$$

Con ambas ecuaciones obtenemos $\ell = 0$, por tanto, concluimos que las condiciones $2mC_2/\hbar^2 = \ell^2 > 0$ y cumplimiento de la periodicidad (2.10) son incompatibles.

- En el segundo caso, $\ell = 0$, la condición de periodicidad se cumple si y solo si $a_1 = 0$, siendo a_2 arbitrario.
- Finalmente, si seguimos el mismo procedimiento para $2mC_2/\hbar^2 = -\ell^2$, tenemos

$$a_1 e^{i\ell(\theta+2\pi)} + a_2 e^{-i\ell(\theta+2\pi)} = a_1 e^{i\ell\theta} + a_2 e^{-i\ell\theta}. \quad (2.14)$$

²La forma *trivial* $a_1 = a_2 = 0$ nos daría una función de onda idénticamente nula, algo que carece de interés físico.

Esto nos lleva a

$$a_1 e^{i\ell\theta} (e^{i2\pi\ell} - 1) + a_2 e^{-i\ell\theta} (e^{-2i\pi\ell} - 1) = 0. \quad (2.15)$$

De nuevo, si hacemos uso de la *Proposición C.1.1*:

$$\begin{cases} a_1 (e^{i2\pi\ell} - 1) = 0. \\ a_2 (e^{-2i\pi\ell} - 1) = 0. \end{cases} \quad (2.16)$$

Ahora esta condición no es incompatible con la periodicidad si $\ell \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$, donde el caso $\ell = 0$ ha sido excluido por haber sido ya analizado.

Así, los casos compatibles con la periodicidad son $\ell \in \mathbb{Z}$, y la parte angular nos queda

$$\Theta(\theta) \propto e^{i\theta\ell}, \quad \text{con } \ell \in \mathbb{Z}. \quad (2.17)$$

Para finalizar, comentamos dos características importantes sobre ℓ . Es conocido que la solución de la parte angular de la ecuación de Schrödinger para un potencial central en un sistema tridimensional, con ejemplo arquetípico el electrón del átomo de hidrógeno sometido al potencial Coulombiano, viene dada por los armónicos esféricos

$$Y_\ell^m(\theta, \varphi) \propto P_\ell^m(\cos(\theta)) e^{im\varphi}, \quad (2.18)$$

donde $P_\ell^m(x)$ son las funciones asociadas de Legendre definidas en la *Sección 11.10* de [9]. Esto no es más que una generalización de nuestro resultado ya que si en (2.18) hacemos $\theta = \pi/2$ para situarnos en el plano *ecuatorial* (ver *Figura 2.2*) la solución nos queda proporcional a $e^{im\varphi}$. Por evitar posibles confusiones aclaramos que los ángulos θ, φ de (2.18) son los habituales de coordenadas esféricas, por tanto φ es el equivalente de θ en las coordenadas polares que estamos manejando nosotros.

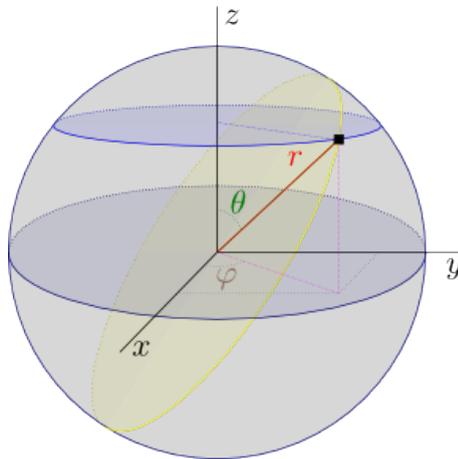


Figura 2.2: Notación usada para los ángulos de coordenadas esféricas.

Por lo tanto, ℓ nos determina el valor del momento angular de nuestra partícula.

A lo largo del desarrollo de este capítulo y en el *Capítulo 4* cuando resolvamos de forma gráfica nuestras ecuaciones trascendentes para la energía, nos vamos a centrar

en los valores del momento angular positivo. Esto está justificado si tenemos en cuenta las relaciones de las funciones de Bessel para índice entero [10]:

$$I_\ell(x) = I_{-\ell}(x), \quad K_\ell(x) = K_{-\ell}(x), \quad \ell \in \mathbb{Z}, \quad (2.19)$$

por lo que un análisis para enteros negativos no es necesario.

2.1.2. Parte radial

Si añadimos la nueva notación para la segunda constante de separación, la función radial descrita por la ecuación (2.7) queda

$$-\frac{\hbar^2 r^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{1}{R(r)} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{1}{R(r)} \frac{d^2 R(r)}{dr^2} \right) - E r^2 + A r^2 \delta(r - r_0) = \frac{-\ell^2 \hbar^2}{2m}. \quad (2.20)$$

Para simplificar vamos a realizar el cambio de variable

$$r = \beta x, \quad \text{con } a := \frac{r_0}{\beta}. \quad (2.21)$$

Así la ecuación (2.20) se convierte en

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{1}{(\beta x)} \frac{dR(r)}{dr} - \left[\frac{2m(-E)}{\hbar^2} + \left(\frac{\ell}{\beta x} \right)^2 + \frac{2m A}{\hbar^2} \delta(\beta x - \beta a) \right] R(r) = 0.$$

Haciendo uso de la regla de la cadena

$$\begin{aligned} \frac{dR(r)}{dr} &= \frac{dx}{dr} \frac{dR(r)}{dx} = \frac{1}{\beta} \frac{dR(r)}{dx}, \\ \frac{d^2 R(r)}{dr^2} &= \frac{d}{dr} \left(\frac{dR(r)}{dr} \right) = \frac{1}{\beta} \frac{d}{dx} \left(\frac{dR(r)}{dr} \right) = \frac{1}{\beta^2} \frac{d^2 R(r)}{dx^2}, \end{aligned}$$

y con la siguiente simplificación³ $R(x) \equiv R(\beta x)$, llegamos a

$$\frac{d^2 R(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dR(x)}{dx} - \left[\frac{2m(-E)\beta^2}{\hbar^2} + \left(\frac{\ell}{x} \right)^2 + \frac{2m A \beta^2}{\hbar^2} \delta(\beta(x - a)) \right] R(x) = 0.$$

Nos centramos en los términos que aparecen en el corchete. Si consultamos el segundo capítulo de [9], dedicado al estudio de las distribuciones, encontramos la siguiente propiedad de la delta de Dirac

$$\delta(\beta(x - a)) = \frac{1}{|\beta|} \delta(x - a). \quad (2.22)$$

Ahora definimos $k^2 := 2m(-E)\beta^2/\hbar^2$ con $k^2 > 0$ ya que estamos admitiendo que la energía de nuestros estados es negativa (estados ligados). Así, tenemos

$$\frac{d^2 R(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dR(x)}{dx} - \left[k^2 + \left(\frac{\ell}{x} \right)^2 + \frac{2m A \beta^2}{\hbar^2 |\beta|} \delta(x - a) \right] R(x) = 0. \quad (2.23)$$

³Este es un pequeño abuso de la notación ya que al hacer el cambio de variable la forma funcional de R en general cambia.

Observamos que (2.23) guarda una estrecha relación con la ecuación modificada de Bessel

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dy(x)}{dx} - \left[1 + \left(\frac{\ell}{x} \right)^2 \right] y(x) = 0. \quad (2.24)$$

Para asemejarlas usamos la *libertad* que nos proporciona el cambio de variable al no haber fijado aún el valor de β . Elegimos éste de forma que $k^2 = 1$, es decir

$$\beta := \frac{\hbar}{\sqrt{2m(-E)}} > 0. \quad (2.25)$$

Nótese que la raíz del denominador está bien definida. Además $\beta > 0$ por lo que $|\beta| = \beta$ y (2.23) se convierte en

$$\frac{d^2 R(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dR(x)}{dx} - \left[1 + \left(\frac{\ell}{x} \right)^2 + \alpha \delta(x - a) \right] R(x) = 0, \quad (2.26)$$

donde hemos definido

$$\alpha := \frac{2m A \beta}{\hbar^2}. \quad (2.27)$$

Con estos cambios, la única diferencia entre (2.24) y (2.26) reside en el término $\alpha \delta(x - a)$ que es nulo excepto para $x = a$. Esto nos hace distinguir las dos regiones

$$x \in I \Leftrightarrow 0 < x < a,$$

$$x \in II \Leftrightarrow a < x,$$

mostradas en la *Figura 2.3* para resolver la ecuación diferencial (2.26). Observemos que en cada una de éstas la ecuación (2.26) se reduce a la ecuación modificada de Bessel (2.24), que será la que tenemos que resolver.

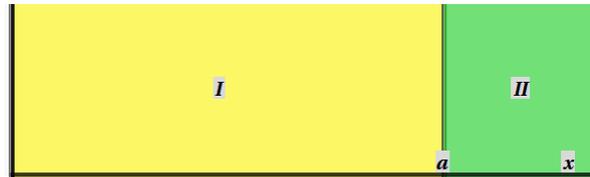


Figura 2.3: Regiones cuando existe un *anillo*.

Algunas propiedades de las llamadas funciones de Bessel modificadas están descritas en el *Apéndice A*, pero por ahora nos interesa que la solución general de la ecuación (2.24) es

$$y_\ell(x) = \lambda_I I_\ell(x) + \lambda_K K_\ell(x),$$

con $I_\ell(x)$ y $K_\ell(x)$ las funciones modificadas de Bessel de primera y segunda especie, respectivamente. Por lo tanto la solución general de (2.26) en las regiones *I* y *II*

$$R_\ell(x) = \begin{cases} c_1^I I_\ell(x) + c_2^I K_\ell(x), & \text{si } x \in I. \\ c_1^{II} I_\ell(x) + c_2^{II} K_\ell(x), & \text{si } x \in II. \end{cases} \quad (2.28)$$

A continuación, pasamos a determinar los coeficientes $\{c_1^I, c_2^I, c_1^{II}, c_2^{II}\}$, buscando la solución más general que sea físicamente aceptable. Esto nos lleva a exigir tres condiciones sobre la función de onda: *finitud*, *continuidad* y *evaluación de la discontinuidad en la derivada*, las cuales vamos a analizar con detalle. Una justificación concisa de estas restricciones a la función de onda se puede encontrar en [11].

Para finalizar comentamos que se podría realizar el cambio de función incógnita $U(x) := \sqrt{x}R(x)$ en (2.26) para eliminar la derivada primera y asemejar más nuestra ecuación a una de Schrödinger *típica* unidimensional, pero esto no será necesario para nuestros propósitos.

Finitud

Un requisito fundamental es que la densidad de probabilidad sea finita

$$\int_{\mathbb{R}^2} dx dy |\psi(\vec{x}, t)|^2 = 1. \quad (2.29)$$

Nuestra ecuación está expresada en función de las coordenadas polares, por ello hacemos uso del teorema de cambio de variable. Si tenemos en cuenta que el *jacobiano*⁴ del cambio de coordenadas cartesianas a polares es r :

$$\int_{\mathbb{R}^2} dr d\theta r |\psi(r, \theta, t)|^2 = 1. \quad (2.30)$$

Como $\psi(r, \theta, t) = R(r)\Theta(\theta)T(t)$, si usamos el teorema de Fubini⁵ para poder separar la integral, (2.30) pasa a

$$|T(t_0)|^2 \int_0^{2\pi} d\theta |\Theta(\theta)|^2 \int_0^\infty dr r |R(r)|^2 = 1. \quad (2.31)$$

La única integral que puede presentar posibles problemas de divergencia es la radial, que con el cambio de variable independiente se transforma en

$$\int_0^\infty dr r |R(r)|^2 \propto \int_0^\infty dx x |R(x)|^2. \quad (2.32)$$

No hemos detallado las constantes multiplicativas que resultan al aplicar de nuevo el teorema de cambio de variable ya que una de las integrales de (2.32) diverge si y solo si lo hace la otra. Debido al comportamiento asintótico de las funciones de Bessel modificadas (ver *Apéndice A*) se puede demostrar que

$$\begin{cases} \int_I dx x |I_\ell(x)|^2 = \infty, & \text{si } \ell \in \mathbb{N} \cup \{0\}, \\ \int_{II} dx x |K_\ell(x)|^2 = \infty, & \text{si } \ell \in \mathbb{N}, \end{cases} \quad (2.33)$$

⁴Dada una aplicación diferenciable - para nuestro caso ésta es la que da el cambio de coordenadas $f(r, \theta) = (r \cos(\theta), r \sin(\theta))$ - el *jacobiano* se define como:

$$Jf(x) = \det(f'(x))$$

⁵Las hipótesis de este teorema se verifican ya que por exigencias físicas nuestra función de onda debe ser continua, por tanto integrable.

donde con \int_I y \int_{II} hemos denotado la integración sobre las regiones I y II . Así las soluciones que cumplen la condición de finitud son

$$R_\ell(x) = \begin{cases} c_1^I I_\ell(x), & \text{si } x \in I. \\ c_2^{II} K_\ell(x), & \text{si } x \in II. \end{cases} \quad (2.34)$$

Continuidad

Veamos por qué **en nuestro caso** la función de onda debe de ser continua y esta condición no debe cumplirse para su derivada. Cuando trabajamos con potenciales singulares como⁶

$$\delta(x - x_0) \text{ y } \delta'(x - x_0),$$

las condiciones *físicas* (ver capítulo 5 de [11]) que exigen la continuidad de la función de onda y su derivada dejan de cumplirse en ciertos puntos. Para ilustrarlo imaginemos que tenemos el siguiente potencial

$$V(x) = \lambda_1 \delta(x - x_1) + \lambda_2 \delta'(x - x_2). \quad (2.35)$$

La ecuación (2.26) pasaría a

$$\frac{d^2 R(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dR(x)}{dx} - \left[1 + \left(\frac{\ell}{x} \right)^2 + \lambda_1 \delta(x - x_1) + \lambda_2 \delta'(x - x_2) \right] R(x) = 0. \quad (2.36)$$

Vamos a probar que $R(x)$ y $R'(x)$ no pueden ser continuas en x_2 y x_1 , respectivamente. Razonaremos por reducción al absurdo, así que supongamos que $R(x)$ es continua en x_2 . Entonces todos los sumandos de (2.36) serían finitos en este punto salvo $\lambda_2 \delta'(x - x_2)$, por lo que esta ecuación no puede estar igualada a cero, que es finito⁷. De manera análoga con $R'(x)$ en x_1 . La única forma de *compensar* $\delta(x - x_1)$ y $\delta'(x - x_2)$ se consigue admitiendo discontinuidades en la función $R(x)$ y/o $R'(x)$

En la *Proposición C.2.1* se prueba como dentro del marco de la teoría de distribuciones la derivada de una función discontinua (salto finito) está definida y, evaluada en el punto de discontinuidad, es proporcional a la delta de Dirac. Así, con una discontinuidad de $R(x)$ en x_2 podemos *compensar* $\delta'(x - x_2)$ ya que $R''(x_2) \propto \delta'(x - x_2)$. Si existe una discontinuidad finita de $R'(x)$ en x_1 compensamos $\delta(x - x_1)$.

Retomando nuestro problema, el coeficiente λ_2 de (2.35) es nulo por lo que $R(x)$ debe de ser continua y $R'(x)$ ha de presentar una discontinuidad en a . La continuidad en en este último punto de $R(x)$ implica

$$c_1^I I_\ell(a) = c_2^{II} K_\ell(a). \quad (2.37)$$

⁶Con $\delta'(x)$ denotamos la derivada, en el sentido de las distribuciones, de la delta de Dirac $\delta(x)$.

⁷Hemos llegado a un *absurdo*, la hipótesis de partida no es válida

Evaluación de la discontinuidad en la derivada

Para evaluar el salto que necesariamente presenta $R'(x)$ en a integramos (2.26) en un entorno de a . Si tenemos en cuenta la linealidad de la integral

$$\int_{a-\eta}^{a+\eta} dx \frac{d^2 R(x)}{dx^2} + \int_{a-\eta}^{a+\eta} dx \frac{1}{x} \frac{dR(x)}{dx} - \int_{a-\eta}^{a+\eta} dx \left[k^2 + \left(\frac{l}{x} \right)^2 + \alpha \delta(x-a) \right] R(x) = 0. \quad (2.38)$$

Analizamos cada término por separado:

- $\int_{a-\eta}^{a+\eta} dx \frac{d^2 R(x)}{dx^2}.$

Sabemos que, si se cumplen las condiciones de integrabilidad, la primitiva de la derivada de una función, $\frac{d}{dx} \frac{dR(x)}{dx}$, es la función sin derivar, por tanto

$$\int_{a-\eta}^{a+\eta} dx \frac{d^2 R(x)}{dx^2} = \frac{dR(a+\eta)}{dx} - \frac{dR(a-\eta)}{dx}. \quad (2.39)$$

Si hacemos η arbitrariamente pequeño

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{dR(a+\eta)}{dx} - \frac{dR(a-\eta)}{dx} = \frac{dR(x)}{dx}(a^+) - \frac{dR(x)}{dx}(a^-), \quad (2.40)$$

siendo el último el salto de la derivada en el punto de discontinuidad a .

- $\int_{a-\eta}^{a+\eta} dx \alpha \delta(x-a).$

Usando las propiedades de la delta de Dirac (ver [9]):

$$- \int_{a-\eta}^{a+\eta} dx \alpha \delta(x-a) R(x) = -\alpha R(a). \quad (2.41)$$

- Resto de términos.

Por último es sencillo comprobar que los sumandos restantes se anulan (las técnicas descritas pueden consultarse en la referencia [12]). Vamos a hacer uso del *Corolario C.1.3*, por lo que buscamos que las funciones a integrar sean continuas. Esto se cumple salvo para

$$\int_{a-\eta}^{a+\eta} dx \frac{1}{x} \frac{dR(x)}{dx}, \quad (2.42)$$

cuyo integrando no es continuo en a . Esto se puede evitar haciendo uso de la *identidad de Chasles*

$$\int_{a-\eta}^{a+\eta} dx \frac{1}{x} \frac{dR(x)}{dx} = \int_{a-\eta}^a dx \frac{1}{x} \frac{dR(x)}{dx} + \int_a^{a+\eta} dx \frac{1}{x} \frac{dR(x)}{dx}. \quad (2.43)$$

Así, ya podemos aplicar⁸ el *Corolario C.1.3* y ver que el resto de términos en (2.38) se anulan al hacer $\eta \rightarrow 0$.

⁸En realidad existe un punto, a , donde la función no es continua. Este es un conjunto de medida nula por lo que el valor de la integral no se ve alterado.

Entonces, el salto viene dado por

$$\frac{dR(x)}{dx}(a^+) - \frac{dR(x)}{dx}(a^-) = \alpha R(a) = \alpha c_1^I I_\ell(a) = \alpha c_2^{II} K_\ell(a). \quad (2.44)$$

2.1.3. Estados ligados

Si agrupamos los resultados (2.34), (2.37), (2.44) y usamos las relaciones de recurrencia para las funciones modificadas de Bessel (A.13) y (A.14) que aparecen en el *Apéndice A*, obtenemos:

$$c_1^I I_\ell(a) - c_2^{II} K_\ell(a) = 0, \quad (2.45)$$

$$-c_2^{II} \frac{K_{\ell-1}(a) + K_{\ell+1}(a)}{2} - c_1^I \frac{I_{\ell-1}(a) + I_{\ell+1}(a)}{2} - \alpha c_1^I I_\ell(a) = 0. \quad (2.46)$$

Estas dos últimas igualdades forman un sistema de ecuaciones lineal y homogéneo cuyas incógnitas son c_1^I y c_2^{II} . En virtud del teorema de Rouché-Frobenius, si queremos evitar la solución trivial (nula) debemos exigir que el determinante de la matriz de coeficientes sea cero.

$$\begin{vmatrix} I_\ell(a) & -K_\ell(a) \\ \frac{I_{\ell-1}(a) + I_{\ell+1}(a)}{2} + \alpha I_\ell(a) & \frac{K_{\ell-1}(a) + K_{\ell+1}(a)}{2} \end{vmatrix} = 0. \quad (2.47)$$

Desarrollando el determinante y usando las relaciones (A.13), (A.14) (A.15) y (A.16), obtenemos la siguiente ecuación trascendente para la energía:

$$I_\ell(a)K_\ell(a) = -\frac{1}{\alpha a}. \quad (2.48)$$

Notemos que el producto αa es independiente de la energía e igual a

$$\alpha a = \frac{2 A m r_0}{\hbar^2} < 0, \quad \text{pues } A < 0. \quad (2.49)$$

El comportamiento del producto de las funciones de Bessel modificadas se muestra en la *Figura 2.4*. La dependencia con la energía surge al expresar a en función de β ($a = r_0/\beta$) cuya dependencia con E viene dada por (2.25). Con esto, el argumento de las funciones de Bessel queda

$$a = C\sqrt{-E},$$

con $C := \sqrt{2mr_0}/\hbar$.

Conteo del número de estados

Para la aplicación de nuestro desarrollo a ciertas situaciones de interés conviene realizar un *conteo* del número de estados admisibles para los posibles valores de ℓ , fijada una configuración⁹. Con este fin enunciamos las siguientes propiedades:

⁹Al establecer una configuración determinamos el valor de $-\frac{1}{\alpha a}$.

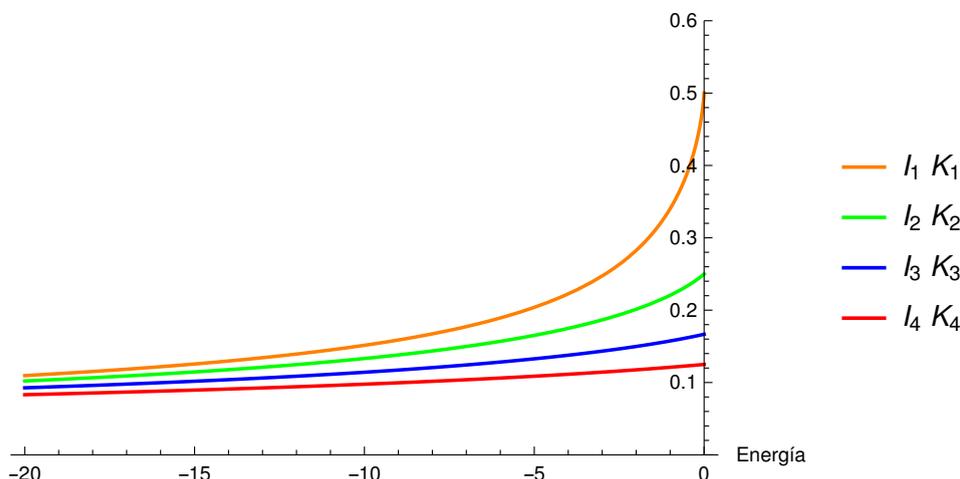


Figura 2.4: $I_\ell(a)K_\ell(a)$ para distintos índices. En este caso $C = 1$.

Propiedad 1. Cuando la energía es próxima a cero, el producto $I_\ell(a)K_\ell(a)$ tiende a $1/2\ell$.

Comprobémoslo. El comportamiento asintótico de $I_\ell(x)$ y $K_\ell(x)$ cuando el argumento se aproxima a cero se muestra en la *Sección A.2.4* del *Apéndice A*. Para los valores de ℓ de nuestro problema

$$I_\ell(x) \sim \left(\frac{x}{2}\right)^\ell \frac{1}{\Gamma(\ell+1)},$$

$$K_\ell(x) \sim \frac{\Gamma(\ell)}{2} \left(\frac{x}{2}\right)^{-\ell}.$$

Si evaluamos el producto, en orden cero obtenemos:

$$I_\ell(x)K_\ell(x) \sim \frac{\Gamma(\ell)}{2\Gamma(\ell+1)}. \quad (2.50)$$

Y si hacemos uso de la relación de recurrencia para la función gamma¹⁰

$$\Gamma(\ell+1) = \ell\Gamma(\ell), \quad (2.51)$$

llegamos al resultado que queríamos probar

$$\lim_{x \rightarrow 0} I_\ell(x)K_\ell(x) = \frac{1}{2\ell}. \quad (2.52)$$

Propiedad 2. Cuando la energía, en valor absoluto, toma valores arbitrariamente altos, el producto $I_\ell(a)K_\ell(a)$ es aproximadamente 0.

Si seguimos un procedimiento similar al de la *Propiedad 1*, pero ahora con (A.20) y (A.21), tenemos:

$$I_\ell(x) \sim \frac{e^x}{\sqrt{2\pi x}},$$

$$K_\ell(x) \sim \frac{\pi}{\sqrt{2x}} e^{-x}.$$

¹⁰Esta relación es intuitiva si se tiene en cuenta que la función gamma *generaliza* el factorial. Para más detalles sobre esta función se puede consultar el *Capítulo 1* de [9].

Con ello, al evaluar el límite:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} I_\ell(x)K_\ell(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\sqrt{\pi}}{2x} = 0. \quad (2.53)$$

Propiedad 3. El producto $I_\ell(a)K_\ell(a)$ es estrictamente creciente si $E \in (-\infty, 0]$. Para ver ésto sería necesario evaluar la derivada y comprobar que

$$\frac{dI_\ell(a)K_\ell(a)}{dE} > 0 \quad \forall E \in (-\infty, 0].$$

Esto requiere un procedimiento matemático más extenso que podría descentrarnos de nuestra problema, por lo que nos conformamos con comprobar que se cumple para los distintos valores de ℓ en el rango de energías representado en la *Figura 2.4*.

Con estas propiedades somos capaces de dar cuenta del número de estados ligados para los distintos valores del momento angular ℓ .

Proposición 2.1.1 *Número de estados.*

Definiendo $B := -1/\alpha a$, el número de estados ligados admisibles viene dado por la siguiente función definida a trozos:

$$N_1(B) = \begin{cases} 0, & \text{si } B > 1/2, \\ \left\lfloor \frac{1}{2B} \right\rfloor, & \text{si } 0 \leq B \leq 1/2, \end{cases} \quad (2.54)$$

donde con $\lfloor y \rfloor$ denotamos la parte entera de y .

Demostración Distinguimos los dos casos:

- $B > 1/2$.

Como hemos dicho, $I_\ell(a)K_\ell(a)$ es una función estrictamente creciente en nuestro intervalo de energías (*Propiedad 3*) y el máximo valor se alcanza en el origen para $\ell = 1$, siendo éste $1/2$. Si $B > 1/2$ tenemos la situación mostrada en la *Figura 2.5*, donde es imposible que el miembro izquierdo de la ecuación (2.48) sea igual al miembro derecho (recta morada), ya que las curvas no se cortan. Así, con esta configuración, el número de estados ligados es cero.

- $0 \leq B \leq 1/2$.

La nueva situación está ilustrada en la *Figura 2.6*. Ahora, la ecuación (2.48) sí tiene solución para distintos valores del momento angular, y haciendo uso de las propiedades enunciadas vemos que el valor $1/2\ell$ es el que determina el número de estados ligados. Básicamente si

$$B > \frac{1}{2\ell'}$$

no pueden existir estados ligados con valor del momento angular ℓ' . El valor máximo vendrá dado cuando se de la igualdad

$$B = \frac{1}{2\ell'_{max}}, \quad (2.55)$$

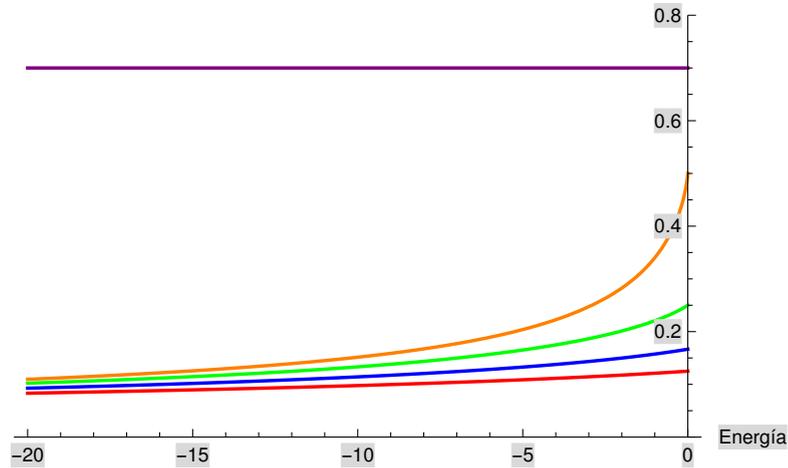


Figura 2.5: Configuración en la que no existen estados ligados por ser $B = 0,7 > 1/2$ (recta horizontal morada). Las otras curvas representan el producto $I_\ell(a)K_\ell(a)$ para diversos valores de ℓ : 1 (naranja), 2 (verde), 3 (azul), 4 (rojo).

que nos lleva a

$$\ell'_{max} = \frac{1}{2B}, \quad (2.56)$$

Pero en nuestro caso $\ell \in \mathbb{Z}$, por lo que tomamos la parte entera

$$\ell_{max} = \left\lfloor \frac{1}{2B} \right\rfloor. \quad (2.57)$$

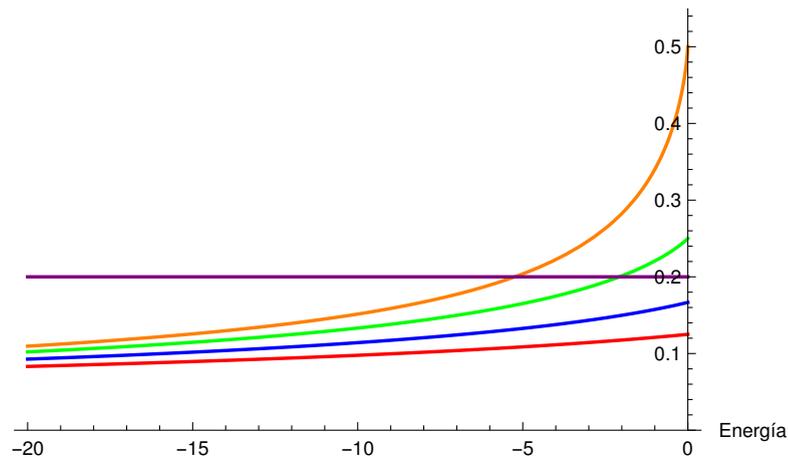


Figura 2.6: Configuración en la que sí existen estados ligados por ser $B = 0,2 < 1/2$ (recta horizontal morada). Las otras curvas representan el producto $I_\ell(a)K_\ell(a)$ para diversos valores de ℓ : 1 (naranja), 2 (verde), 3 (azul), 4 (rojo).

2.1.4. Consecuencias físicas

Ya hemos detallado cómo se obtienen el número de estados ligados, veamos las implicaciones físicas de este resultado. Nuestra configuración queda determinada por

los tres parámetros: m , A , y r_0 . En esta parte de la sección analizaremos cuáles son las modificaciones sobre nuestros estados ligados al variar éstos. Nos centramos en dos características de nuestro espectro de energía:

1. Número de estados ligados para distintos valores de ℓ .
2. Valor de la energía para éstos.

Antes de realizar este análisis enunciamos una de las características más importantes de nuestro potencial:

Dado un valor del momento angular, existe un único estado ligado, si es que existe.

Esto se puede justificar sin más que tener en cuenta que una función estrictamente creciente, $I_\ell(a)K_\ell(a)$, es *inyectiva* y razonando por reducción al absurdo. Supongamos que existen dos estados ligados para distintos valores de la energía E_1 y E_2 . Por sencillez definimos

$$f(E) := I_\ell(a(E))K_\ell(a(E))$$

y teniendo en cuenta (2.48) este hecho se traduce en

$$f(E_1) = f(E_2) = B,$$

con lo que

$$f(E_1) = f(E_2).$$

Pero al ser nuestra función inyectiva

$$E_1 = E_2,$$

hecho que se contradice con nuestra suposición de la existencia de dos estados ligados (absurdo)¹¹. Finalmente, si $B > 1/2\ell$ no pueden existir estados ligados para ese valor del momento angular, como comprobamos en la sección anterior.

Ahora sí, analicemos como cambian las propiedades de nuestros estados ligados al variar los parámetros. Por simplicidad escogemos un sistema de unidades en el que $\hbar = 1$. Expresamos la dependencia explícita de (2.48) con m , A , y r_0 :

$$I_\ell(\sqrt{2mr_0}\sqrt{-E})K_\ell(\sqrt{2mr_0}\sqrt{-E}) = -\frac{1}{2Amr_0}. \quad (2.58)$$

En primer lugar tenemos en cuenta que la **amplitud** de la delta de Dirac solo aparece en el miembro derecho de (2.58) por lo que no afecta a la *forma* de nuestras curvas. Cuanto menor sea el valor de A (mayor el de $|A|$) más cercano a cero será

$$B = -\frac{1}{2Amr_0},$$

¹¹Se podría argumentar que pueden existir dos estados ligados siendo doblemente degenerados, i.e., $E_1 = E_2$. Para ello la ecuación $I_\ell(a(E))K_\ell(a(E)) - B = 0$ debería presentar raíces dobles, algo que no ocurre.

y si tenemos en cuenta (2.54), aumenta el número de estados ligados. Es decir, al ir aumentando la amplitud de la delta, estados que no eran físicamente aceptables por tener un momento angular demasiado elevado, pasan a serlo.

En segundo lugar veamos que ocurre cuando variamos el valor de la **masa** o del **radio**. Consideramos estos dos a la vez ya que por (2.58) juegan un papel similar, salvo que en el argumento de las funciones aparece \sqrt{m} y no m , como ocurre con el radio. El hecho de aumentar cualquiera de ellos hace también disminuir el valor de B , pero a diferencia del caso anterior también cambian los argumentos de las funciones. Esto puede hacer variar el espectro de energía.

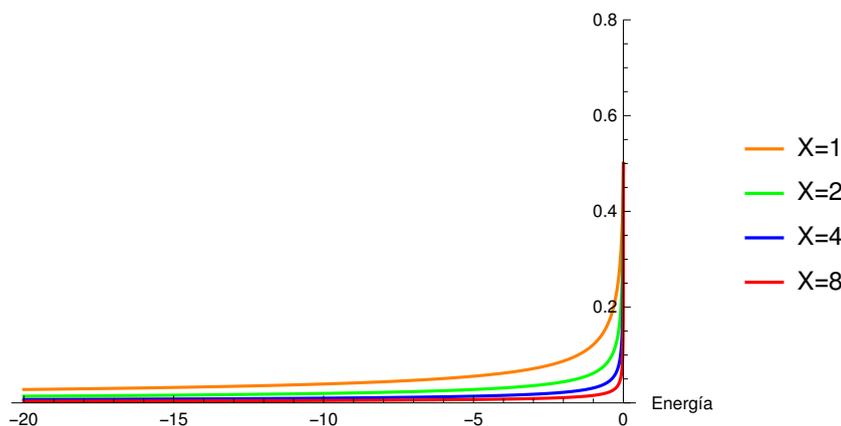


Figura 2.7: $I_1(a)K_1(a)$, donde se ha elegido $\sqrt{m}r_0 = 1$ y $\ell = 1$, representado curvas para distinto X .

Supongamos que tenemos una configuración definida por $\{A_1 m_1 r_{0,1}\}$ y otra por $\{A_2 m_2 r_{0,2}\}$. Ambas están relacionadas por:

$$A_1 = A_2, \quad X\sqrt{m_1}r_{0,1} = \sqrt{m_2}r_{0,2}, \quad (2.59)$$

donde X es un parámetro adimensional.

Vamos a comparar distintas configuraciones¹² en función de X . En la *Figura 2.7* se puede ver como el hecho de ir aumentando el coeficiente $\sqrt{m}r_0$ que multiplica a $\sqrt{2}\sqrt{-E}$ hace que aumente la curvatura de estas funciones.

Así, por el miembro de izquierdo de (2.58) al aumentar la masa o el radio hacemos que los estados tiendan a tener una energía más próxima a cero. Sin embargo, por el miembro derecho disminuye el valor de B lo que provocaría energías más alejadas de cero. Tenemos, por tanto, dos contribuciones que van en *sentidos opuestos*. Realizamos un sencillo cálculo para ver si alguna de ellas predomina.

En la *Figura 2.8* hemos representado, para un valor dado del momento angular, distintas configuraciones variando solo el radio. Y de forma análoga con la masa en la *Figura 2.9*. De ambas sacamos la misma conclusión. El hecho de aumentar cualquiera de estos factores hace que los posibles estados ligados tengan una energía que va siendo cada vez más negativa.

¹²Nótese que $\sqrt{m}r_0$ aparece en el argumento de las funciones de Bessel.

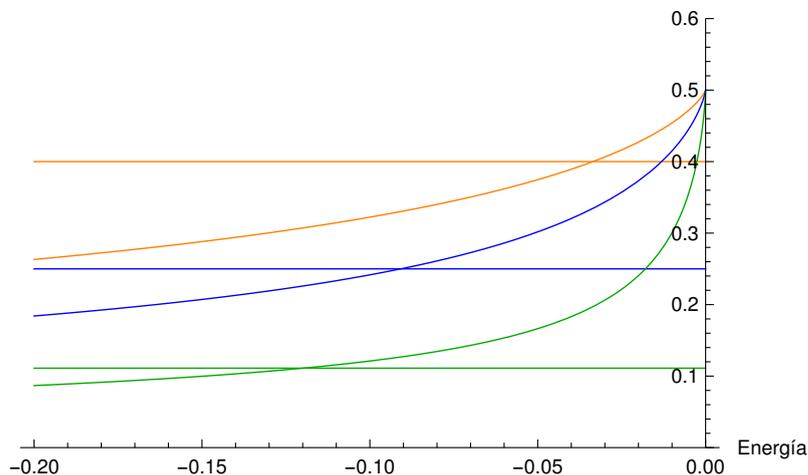


Figura 2.8: $I_1(a)K_1(a)$ y B , donde con el mismo color se representa las configuraciones con el mismo radio. En este caso: $r_{0,1} = 2,5$ (naranja), $r_{0,2} = 4$ (azul), $r_{0,3} = 9$ (verde).

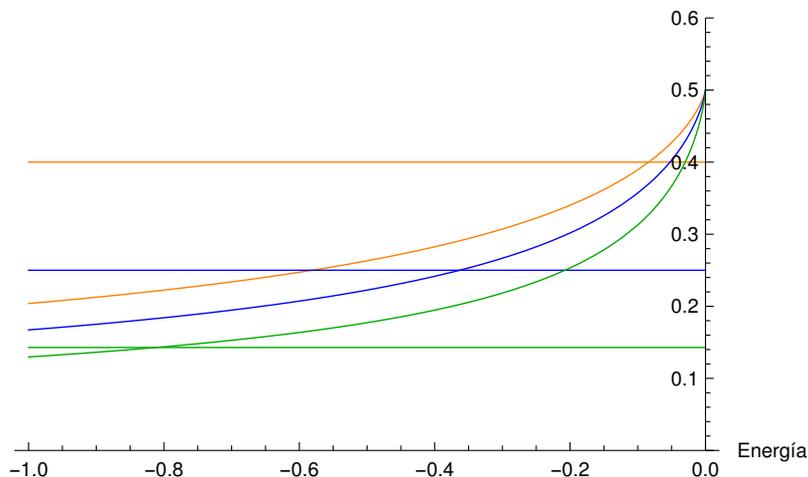


Figura 2.9: $I_1(a)K_1(a)$ y B , donde con un mismo color se representa las configuraciones con de igual masa. En este caso: $m_1 = 2,5$ (naranja), $m_2 = 4$ (naranja), $m_3 = 7$ (naranja).

Para finalizar vamos a comentar brevemente cómo nuestro modelo sigue una ley entrópica similar a la planteada por Hawking [13] para un *agujero negro*. En nuestro caso, hemos obtenido que el número de estados ligados es proporcional a la longitud de la circunferencia en la que se encuentra la singularidad, L , ya que

$$N_1(B) \propto \frac{1}{B} \propto a \propto 2\pi r_0 = L. \quad (2.60)$$

Esta, en dos dimensiones, es el equivalente a la superficie tridimensional, por lo que el anillo dará lugar, en el ámbito de la teoría cuántica de campos [14], a una ley de entropía de superficie proporcional al área, tal y como ocurre en el agujero negro

$$S_A \propto A. \quad (2.61)$$

2.2. Dos anillos

Una vez hemos expuesto de forma detallada cómo obtener los estados ligados con un potencial singular como el de la *Sección 2.1*, podemos analizar una situación más compleja en la que en el potencial existen dos circunferencias singulares de deltas de Dirac para radios diferentes. Gran parte de los resultados del capítulo anterior pueden ser usados para analizar el cambio que produce el segundo *anillo* sobre el espectro de energía.

2.2.1. Ecuación trascendente para la energía

En esta nueva situación el potencial es

$$V(r) = A_1 \delta(r - r_1) + A_2 \delta(r - r_2), \quad (2.62)$$

donde los radios r_1 y r_2 son en principio arbitrarios y, sin pérdida de generalidad, suponemos que $r_1 < r_2$. Para facilitar una visualización del problema se ha representado éste en la *Figura 2.10*.

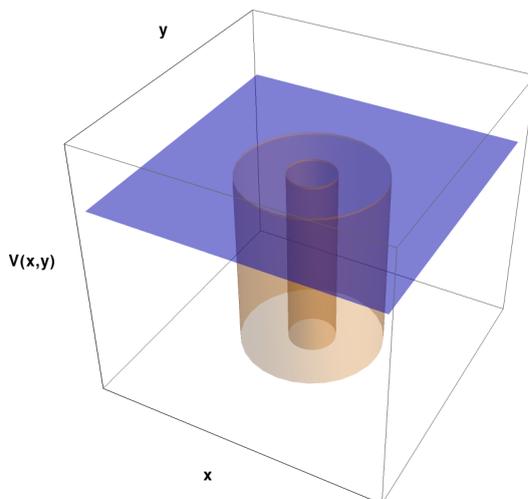


Figura 2.10: Potencial $V(r) = A_1 \delta(r - r_1) + A_2 \delta(r - r_2)$. Aquí $A_1, A_2 < 0$.

Con esto, la ecuación de Schrödinger a resolver es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + (A_1 \delta(r - r_1) + A_2 \delta(r - r_2)) \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}. \quad (2.63)$$

La nueva configuración sigue presentando simetría radial y esto conduce a que la parte angular y temporal sean idénticas a las halladas en la sección anterior. Así, el potencial solo afecta a la parte radial (ver (2.26)) y ahora tenemos

$$\frac{d^2 R(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dR(x)}{dx} - \left[k^2 + \left(\frac{\ell}{x} \right)^2 + \alpha_1 \delta(x - a_1) + \alpha_2 \delta(x - a_2) \right] R(x) = 0, \quad (2.64)$$

con

$$a_i := \frac{r_i}{\beta} \quad \text{y} \quad \alpha_i := A_i \frac{2m\beta}{\hbar^2}, \quad i = 1, 2. \quad (2.65)$$

La solución general de esta ecuación es la misma que para un *anillo*, aunque ahora tenemos distintas condiciones para determinar los coeficientes. En primer lugar en esta situación distinguimos las tres regiones mostradas en la *Figura 2.11*.

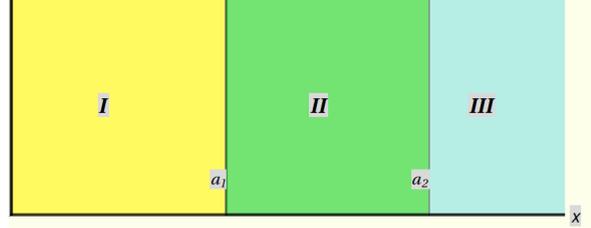


Figura 2.11: Regiones cuando existen dos *anillos*.

Con los mismos razonamientos de finitud que ya manejamos en el caso de un anillo, llegamos a

$$R_\ell(x) = \begin{cases} c_1^I I_\ell(x), & \text{si } x \in I. \\ c_1^{II} I_\ell(x) + c_2^{II} K_\ell(x), & \text{si } x \in II. \\ c_2^{III} K_\ell(x), & \text{si } x \in III. \end{cases} \quad (2.66)$$

Si ahora exigimos continuidad en $x = a_1, a_2$:

$$c_1^I I_\ell(a_1) - c_1^{II} I_\ell(a_1) - c_2^{II} K_\ell(a_1) = 0. \quad (2.67)$$

$$c_1^{II} I_\ell(a_2) + c_2^{II} K_\ell(a_2) - c_2^{III} K_\ell(a_2) = 0. \quad (2.68)$$

La discontinuidad de la derivada debe ser evaluada en a_1 y a_2 . Al integrar (2.64) en el intervalo $(a_1 - \eta, a_1 + \eta)$ y después hacer $\eta \rightarrow 0$:

$$\frac{dR(x)}{dx}(a_1^+) - \frac{dR(x)}{dx}(a_1^-) = \alpha_1 R(a_1) = \alpha_1 c_1^I I_\ell(a_1). \quad (2.69)$$

Repetimos el proceso en el intervalo $(a_2 - \eta, a_2 + \eta)$ y obtenemos

$$\frac{dR(x)}{dx}(a_2^+) - \frac{dR(x)}{dx}(a_2^-) = \alpha_2 R(a_2) = \alpha_2 c_2^{III} K_\ell(a_2). \quad (2.70)$$

Usando las relaciones (A.13) y (A.14) que cumplen las ecuaciones modificadas de Bessel para simplificar (2.69) y (2.70) se obtiene:

$$\begin{aligned} -c_2^{II} \frac{K_{\ell-1}(a_1) + K_{\ell+1}(a_1)}{2} - (c_1^I - c_1^{II}) \frac{I_{\ell-1}(a_1) + I_{\ell+1}(a_1)}{2} - \alpha_1 c_1^I I_\ell(a_1) &= 0. \\ (c_2^{II} - c_2^{III}) \frac{K_{\ell-1}(a_2) + K_{\ell+1}(a_2)}{2} - c_1^{II} \frac{I_{\ell-1}(a_2) + I_{\ell+1}(a_2)}{2} - \alpha_2 c_2^{III} K_\ell(a_2) &= 0. \end{aligned}$$

Añadiendo a éstas dos últimas las condiciones de continuidad (2.67) y (2.68) llegamos de nuevo a un sistema de ecuaciones algebraicas lineal y homogéneo, pero en este

caso con cuatro ecuaciones y cuatro incógnitas, $\{c_1^I, c_1^{II}, c_2^{II}, c_2^{III}\}$:

$$c_1^I I_\ell(a_1) - c_1^{II} I_\ell(a_1) - c_2^{II} K_\ell(a_1) = 0. \quad (2.71)$$

$$c_1^{II} I_\ell(a_2) + c_2^{II} K_\ell(a_2) - c_2^{III} K_\ell(a_2) = 0. \quad (2.72)$$

$$-c_2^{II} \frac{K_{\ell-1}(a_1) + K_{\ell+1}(a_1)}{2} - (c_1^I - c_1^{II}) \frac{I_{\ell-1}(a_1) + I_{\ell+1}(a_1)}{2} - \alpha_1 c_1^I I_\ell(a_1) = 0. \quad (2.73)$$

$$(c_2^{II} - c_2^{III}) \frac{K_{\ell-1}(a_2) + K_{\ell+1}(a_2)}{2} - c_1^{II} \frac{I_{\ell-1}(a_2) + I_{\ell+1}(a_2)}{2} - \alpha_2 c_2^{III} K_\ell(a_2) = 0. \quad (2.74)$$

La ecuación secular se obtiene exigiendo que el determinante de la matriz de coeficientes¹³ sea nulo, usando el mismo argumentario que en la *Sección 2.1*. Realizando diversas simplificaciones en el determinante e igualando a cero obtenemos la siguiente ecuación trascendente para la energía:

$$2\beta m [a_1 A_1 I_\ell(a_1) K_\ell(a_1) (2a_2 A_2 \beta m I_\ell(a_2) K_\ell(a_2) + \hbar^2) + a_2 A_2 \hbar^2 I_\ell(a_2) K_\ell(a_2) - 2a_1 a_2 A_1 A_2 \beta m I_\ell(a_1)^2 K_\ell(a_2)^2] + \hbar^4 = 0 \quad (2.75)$$

Por razones que explicaremos en el siguiente capítulo es conveniente expresar (2.75) como un polinomio en β

$$\hbar^4 + 2m\beta\hbar^2 [a_1 A_1 I_\ell(a_1) K_\ell(a_1) + a_2 A_2 I_\ell(a_2) K_\ell(a_2)] + 4m^2 \beta^2 a_1 a_2 A_1 A_2 I_\ell(a_1) K_\ell(a_2) [I_\ell(a_2) K_\ell(a_1) - I_\ell(a_1) K_\ell(a_2)] = 0. \quad (2.76)$$

2.2.2. Estados ligados

Si comparamos (2.48) y (2.76) vemos que la ecuación que nos proporciona los estados ligados es notablemente más compleja. Para poder realizar un análisis similar al de la *Sección 2.1.4* en primer lugar deshacemos el cambio (2.65) en (2.76)

$$\hbar^4 + 2m\hbar^2 \left[r_1 A_1 I_\ell \left(\frac{r_1}{\beta} \right) K_\ell \left(\frac{r_1}{\beta} \right) + r_2 A_2 I_\ell \left(\frac{r_2}{\beta} \right) K_\ell \left(\frac{r_2}{\beta} \right) \right] + 4m^2 r_1 r_2 A_1 A_2 I_\ell \left(\frac{r_1}{\beta} \right) K_\ell \left(\frac{r_2}{\beta} \right) \left[I_\ell \left(\frac{r_2}{\beta} \right) K_\ell \left(\frac{r_1}{\beta} \right) - I_\ell \left(\frac{r_1}{\beta} \right) K_\ell \left(\frac{r_2}{\beta} \right) \right] = 0. \quad (2.77)$$

De esta última ecuación vemos que, al igual que en el caso de un *anillo*, la energía solo aparece, a través de β (2.25), en los argumentos de las funciones de Bessel. Introducimos los parámetros adimensionales x_r y x_A para tener una ecuación similar a (2.48)

$$r_2 = x_r r_1, \quad A_2 = x_A A_1, \quad x_r > 1, \quad x_A > 0. \quad (2.78)$$

Y llevándolo¹⁴ a (2.77)

$$[I_\ell(a_1) K_\ell(a_1) + x_r x_A I_\ell(a_2) K_\ell(a_2)] + r_1 A_1 \frac{2m}{\hbar^2} x_r x_A [I_\ell(a_1) K_\ell(a_2) [I_\ell(a_2) K_\ell(a_1) - I_\ell(a_1) K_\ell(a_2)]] = \frac{-\hbar^2}{2m r_1 A_1}. \quad (2.79)$$

¹³Ver *Apéndice B*.

¹⁴En (2.77) hemos explicitado la dependencia de los argumentos con la energía, β , ahora volvemos a poner a_1 y a_2 por comodidad.

Nos vuelve a aparecer una expresión en la que el miembro izquierdo depende de la energía (en los argumentos de las funciones de Bessel modificadas) y el otro miembro es una constante que viene determinada por las características de nuestra primera circunferencia de deltas y la masa.

Finalmente, observemos que si en (2.79) imponemos $x_A = 0$, recuperamos (2.48), el resultado hallado para un anillo en la sección precedente. Analicemos ahora la ecuación (2.79) que nos da los estados ligados de este sistema físico.

Comportamiento en el origen

Cuando existe un único *anillo* hemos demostrado que el *conteo* de estados viene determinado, básicamente, por el valor de $I_\ell(a) K_\ell(a)$ cuando la energía es nula. Al añadir otra singularidad vamos a comprobar que no es tan fácil evaluar el número de estados.

Por simplicidad, también elegimos un sistema de unidades en el que $\hbar = 1$. Si resolvemos el límite cuando la energía tiende a cero, i.e. $a_1, a_2 \rightarrow 0$, en (2.79) obtenemos

$$\frac{-A_1 m r_1 x_A x_r^{1-2\ell} + A_1 m r_1 x_A x_r + \ell x_A x_r + \ell}{2\ell^2} \quad (2.80)$$

En primer lugar, si $x_A = 0$ en la ecuación anterior el único sumando del numerador distinto de cero es el último, por lo que volvemos al caso de un anillo ($1/2\ell$). El problema en este nuevo caso reside en que el comportamiento en el origen no solo viene determinada por el valor del momento angular, sino que también depende de la configuración, es decir, de las características de los dos anillos y la masa.

Aparición de más de un estado ligado

Cuando en nuestra configuración solo hay un *anillo* ya demostramos que existe un único estado ligado para un valor concreto del momento angular. Es interesante comprobar como el hecho de incluir un nuevo *anillo* provoca la existencia de más de un estado ligado en ciertas situaciones. Por comodidad, definimos:

$$\begin{aligned} f_2(E, \ell) &:= [I_\ell(a_1) K_\ell(a_1) + x_r x_A I_\ell(a_2) K_\ell(a_2)] \\ &+ r_1 A_1 2m x_r x_A [I_\ell(a_1) K_\ell(a_2) [I_\ell(a_2) K_\ell(a_1) - I_\ell(a_1) K_\ell(a_2)]] \\ B_2 &:= \frac{-1}{2m r_1 A_1} \end{aligned} \quad (2.81)$$

Siendo $f_2(E, \ell) = B_2$ la ecuación (2.76)¹⁵.

Podemos empezar visualizando cómo influye el radio de la segunda circunferencia. En la *Figura 2.12* se ha fijado el valor del radio del primer anillo, las dos amplitudes de las deltas y la masa de la partícula sometida a nuestro potencial. De ésta podemos sacar dos conclusiones fundamentales:

1. Con nuestra configuración, no existe más de un estado ligado para ambos valores del momento angular.

¹⁵Salvo por \hbar , que cambia con el nuevo sistema de unidades que hemos elegido.

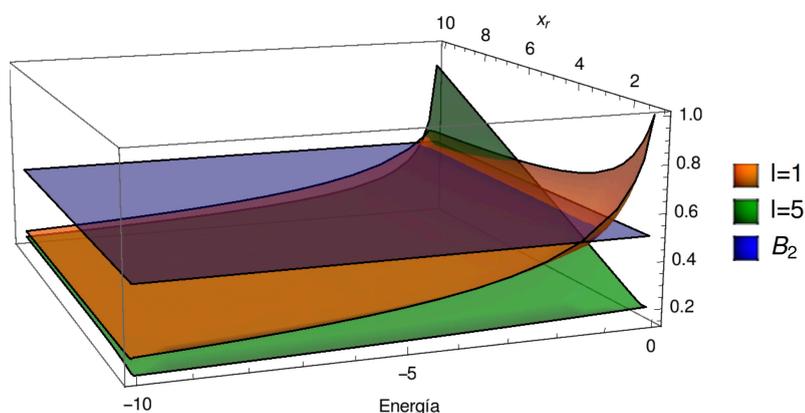


Figura 2.12: $f_2(E, 1)$, $f_2(E, 5)$ y B_2 . Con nuestro sistema de unidades, $m = 1$, $r_1 = 1$, $A_1 = -1$, $x_A = 1$.

- Aunque para $\ell = 1$ existen estados ligados en el rango considerado, no ocurre lo mismo para $\ell = 5$. Para este último hasta que no se alcanza $x_r \sim 4$ no aparecen los estados físicamente aceptables, en cierto modo similar al caso de una circunferencia, ya que los valores de ℓ mayor admitían solución solo cuando lo habían hecho los valores menores.

Pero resulta más interesantes analizar las diferencias con el primer caso. El comportamiento en el origen está descrito por (2.80) y ahora admite valores negativos para una configuración adecuada. De forma intuitiva podemos pensar que esto puede provocar cambios en la curvatura de $f_2(E, \ell)$ tal que la función deje de ser estrictamente creciente, como lo era para un *anillo*. Así podría aparecer más de un estado ligado. En la *Figura 2.13* hemos representado $f_2(E, 1)$, con una configuración determinada. Si nos fijamos en los valores que determinan ésta, solo la amplitud A_2 que pasa a ser diez veces más negativa, cambia con respecto al caso anterior (*Figura 2.12*). Para hallar el número de estados¹⁶ primero tenemos en cuenta que en todas

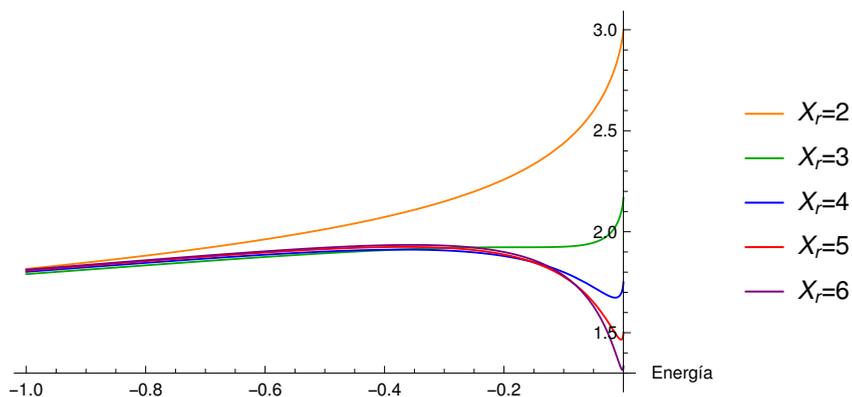


Figura 2.13: $f_2(E, 1)$ para distintos valores de x_r . Con nuestro sistema de unidades, $m = 1$, $r_1 = 1$, $A_1 = -1$, $x_A = 10$

¹⁶A diferencia con el análisis en un anillo, aquí nos centramos en un momento angular y vemos cuántos estados ligados pueden existir.

las situaciones representadas se cumple

$$\lim_{E \rightarrow -\infty} f_2(E, \ell) = 0 \quad (2.82)$$

Viendo la *Figura 2.13* podríamos pensar que existen configuraciones con tres estados ligados (imaginemos que $B_2 = 1,7$ y $r_2 = 4r_1$). Sin embargo, esto no es tan sencillo ya que si fijamos unos ciertos parámetros que determinen nuestra configuración, fijamos el valor de B_2 , y tras un exhaustivo análisis no se han encontrado configuraciones en las que existan, para un cierto x_r , tres estados ligados. Es decir, no se ha encontrado una situación como la que se muestra en la *Figura 2.14* donde se muestran dos de éstos. El tercero necesariamente se encuentra a energías menores por el resultado (2.82). Aun así, sí que podemos encontrar dos estados ligados. Si aumentamos la

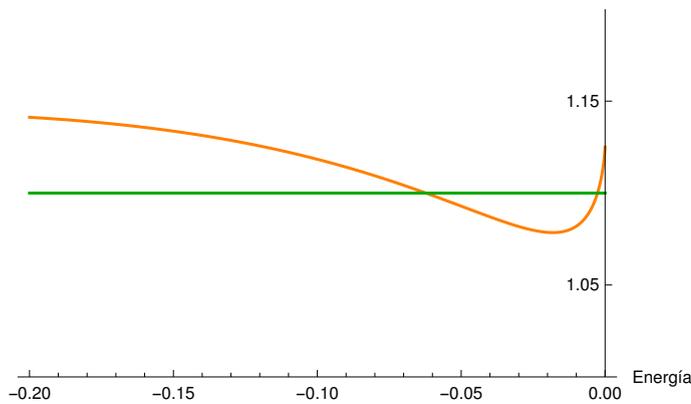


Figura 2.14: $f_2(E, \ell)$ y $B_2 = 1,1$, donde se generarían tres estados ligados.

masa con respecto a situaciones anteriores encontramos un estado en el rango de energías de la *Figura 2.15* y otro para energías menores.

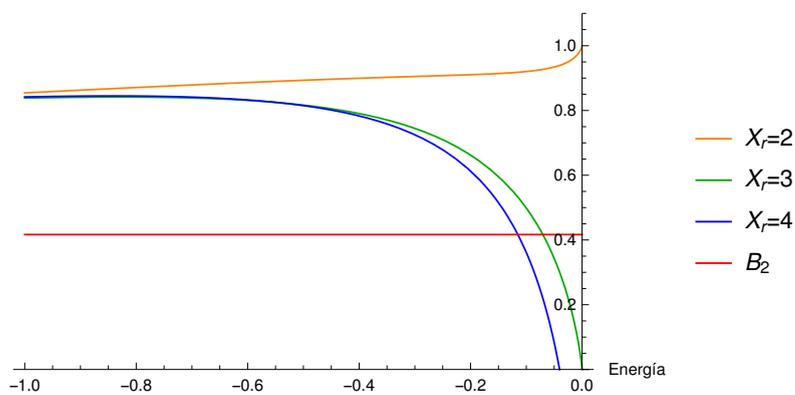


Figura 2.15: $f_2(E, \ell)$ y $B_2 = 0,42$. Las configuraciones con $x_r = 3$ y $x_r = 4$ tienen dos estados ligados. Con nuestro sistema de unidades, $m = 1,2$, $r_1 = 1$, $A_1 = -1$, $x_A = 5$

Las conclusiones que podemos extraer de nuestro análisis son que existen similitudes entre los estados ligados para uno y dos *anillos*, aunque las diferencias son más importantes ya que ya ahora puede aparecer más de un estado ligado.

Capítulo 3

Caso no relativista: n anillos

Este capítulo está dedicado a la búsqueda de la ecuación trascendente para la energía cuando en el potencial existan n circunferencias de deltas de Dirac colocadas de forma arbitraria. Cuando n es suficientemente grande los cálculos para resolver numéricamente la ecuación secular se pueden volver computacionalmente pesados, aun así tiene un interés especial ver el patrón que sigue la ecuación al ir añadiendo *anillos*.

3.1. Condiciones para una región arbitraria

Supongamos que tenemos un potencial del tipo:

$$V(r) = \sum_{i=1}^n A_i \delta(r - r_i), \quad A_i < 0, \quad r_i < r_{i+1}. \quad (3.1)$$

Si seguimos un procedimiento similar al del capítulo anterior nos encontramos con $n + 1$ regiones. Trataremos de encontrar las condiciones de continuidad y del salto finito de la discontinuidad en un punto m -ésimo intermedio, es decir, $m \neq 1, n$. Este punto tiene la peculiaridad de que la parte radial de la función de onda en las regiones a su izquierda y derecha tiene la forma

$$R_\ell(x) = \begin{cases} c_1^M I_\ell(x) + c_2^M K_\ell(x), & \text{si } x \in M, \\ c_1^{M+1} I_\ell(x) + c_2^{M+1} K_\ell(x), & \text{si } x \in M + 1, \end{cases}, \quad (3.2)$$

donde con M hemos denotamos la región m -ésima. En esta situación intermedia las dos regiones vecinas tienen los dos sumandos, ya que ninguno se elimina por finitud, una circunstancia que no había surgido hasta ahora. La condición de continuidad en $a_m = r_m/\beta$ nos da

$$c_1^M I_\ell(a_m) + c_2^M K_\ell(a_m) - c_1^{M+1} I_\ell(a_m) - c_2^{M+1} K_\ell(a_m) = 0. \quad (3.3)$$

Y evaluando el salto finito de la discontinuidad

$$(c_2^M - c_2^{M+1}) \frac{K_{\ell-1}(a_m) + K_{\ell+1}(a_m)}{2} - (c_1^M - c_1^{M+1}) \frac{I_{\ell-1}(a_m) + I_{\ell+1}(a_m)}{2} - \alpha_m (c_1^M I_\ell(a_m) + c_2^M K_\ell(a_m)) = 0. \quad (3.4)$$

Éstas las usaremos de forma general, ya que para una configuración con n anillos tenemos $2n$ ecuaciones y $2n - 4$ vienen así descritas. Hemos descartado el primer punto, a_1 y el último, a_n , que nos dan las 4 restantes, pero éstos no son más que un caso particular de (3.3) y (3.4). En efecto, cuando estamos evaluando el primer punto no tenemos más que hacer $c_2^I = 0$ y $c_1^{N+1} = 0$ en el último¹. Aunque así podríamos continuar, en la última singularidad conviene introducir una pequeña modificación para (3.4). El término final es

$$-\alpha_n(c_1^N I_\ell(a_n) + c_2^N K_\ell(a_n)) = -\alpha_n R_\ell(a_n), \quad (3.5)$$

pero por la exigencia de continuidad tenemos

$$-\alpha_n(c_1^N I_\ell(a_n) + c_2^N K_\ell(a_n)) = c_2^{N+1} K_\ell(a_n). \quad (3.6)$$

El miembro derecho de (3.6) tiene un sumando menos y esto simplificará nuestras expresiones.

3.2. Tres anillos

Para tratar de establecer una recurrencia en la ecuación que nos da los estados ligados para n anillos necesitamos, como mínimo, la expresión para tres circunferencias de deltas de Dirac como se representa en la *Figura 3.1*.

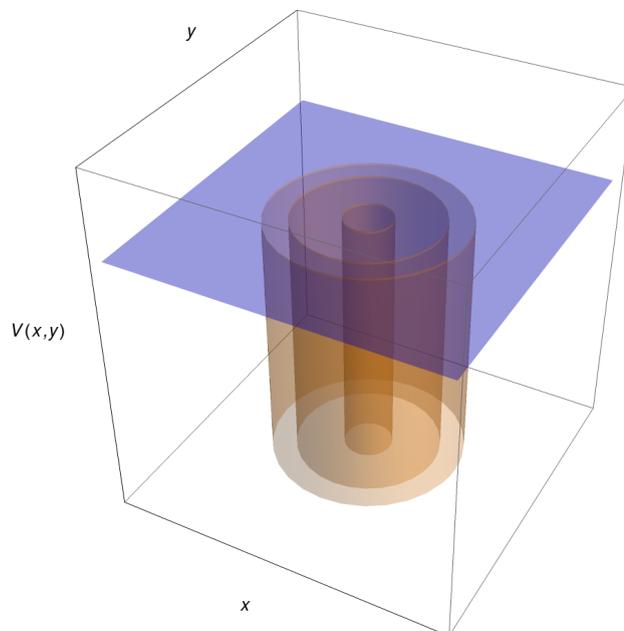


Figura 3.1: Potencial $V(r) = \sum_{i=1}^3 A_i \delta(r - r_i)$ con $A_i < 0$, $i = 1, 2, 3$.

Así, con el potencial

$$V(r) = A_1 \delta(r - r_1) + A_2 \delta(r - r_2) + A_3 \delta(r - r_3), \quad (3.7)$$

¹Con $N + 1$ nos referimos a la región $(n+1)$ -ésima.

y haciendo uso de las ecuaciones (3.3) y (3.4) llegamos a un sistema homogéneo con 6 ecuaciones y 6 incógnitas.

$$\begin{aligned}
& c_1^I I_\ell(a_1) - c_1^{II} I_\ell(a_1) - c_2^{II} K_\ell(a_1) = 0 \\
& -c_2^{II} \frac{K_{\ell-1}(a_1) + K_{\ell+1}(a_1)}{2} - (c_1^I - c_1^{II}) \frac{I_{\ell-1}(a_1) + I_{\ell+1}(a_1)}{2} - \alpha_m c_1^I I_\ell(a_1) = 0 \\
& c_1^{II} I_\ell(a_m) + c_2^{II} K_\ell(a_m) - c_1^{III} I_\ell(a_m) - c_2^{III} K_\ell(a_m) = 0 \\
& (c_2^{II} - c_2^{III}) \frac{K_{\ell-1}(a_m) + K_{\ell+1}(a_m)}{2} - (c_1^{II} - c_1^{III}) \frac{I_{\ell-1}(a_m) + I_{\ell+1}(a_m)}{2} \\
& \quad - \alpha_m (c_1^{II} I_\ell(a_m) + c_2^{II} K_\ell(a_m)) = 0 \\
& c_1^{III} I_\ell(a_m) + c_2^{III} K_\ell(a_m) - c_2^{IV} K_\ell(a_m) = 0 \\
& (c_2^{III} - c_2^{IV}) \frac{K_{\ell-1}(a_m) + K_{\ell+1}(a_m)}{2} - c_1^{III} \frac{I_{\ell-1}(a_m) + I_{\ell+1}(a_m)}{2} - \alpha_m c_2^{IV} K_\ell(a_m) = 0
\end{aligned}$$

El determinante de la matriz de coeficientes de este sistema se puede consultar en la expresión (B.4) del *Apéndice B*. Desarrollando el determinante por la primera columna y simplificando encontramos la siguiente expresión, que mostramos como un polinomio en β , o $2m\beta$, igualado a cero:

$$\begin{aligned}
& -\hbar^6 - (2m\beta) \quad \hbar^4 (a_1 A_1 I_1 K_1 + a_2 A_2 I_2 K_2 + a_3 A_3 I_3 K_3) \\
& \quad + (2m\beta)^2 \quad \hbar^2 [a_1 A_1 I_1^2 (a_2 A_2 K_2^2 + a_3 A_3 K_3^2) - a_1 A_1 I_1 K_1 (a_2 A_2 I_2 K_2 \\
& \quad \quad + a_3 A_3 I_3 K_3) + a_2 a_3 A_2 A_3 I_2 K_3 (I_2 K_3 - I_3 K_2)] \\
& \quad + (2m\beta)^3 \quad a_1 a_2 a_3 A_1 A_2 A_3 I_1 K_3 (I_2 K_1 - I_1 K_2) (I_2 K_3 - I_3 K_2) = 0, \quad (3.8)
\end{aligned}$$

donde se usa la notación

$$I_i := I_\ell(a_i), \quad K_i := K_\ell(a_i), \quad (3.9)$$

igual que en el *Apéndice B*.

3.3. Búsqueda de la fórmula de recurrencia

Viendo que ciertos patrones se repiten en las ecuaciones trascendentes para la energía al ir añadir *anillos* en posiciones arbitrarias, puede ser interesante intentar buscar una relación general que nos dé esta ecuación. Usando la notación de (B.1)

agrupamos lo obtenido hasta ahora:

1 anillo :

$$2m\beta a_1 A_1 I_1 K_1 + \hbar^2 = 0.$$

2 anillos :

$$\hbar^4 + 2m\beta\hbar^2(a_1 A_1 I_1 K_1 + a_2 A_2 I_2 K_2) + (2m\beta)^2 a_1 a_2 A_1 A_2 I_1 K_2 (I_2 K_1 - I_1 K_2) = 0.$$

3 anillos :

$$\begin{aligned} & -\hbar^6 - (2m\beta\hbar^2)(a_1 A_1 I_1 K_1 + a_2 A_2 I_2 K_2 + a_3 A_3 I_3 K_3) \\ & + (2m\beta)^2 \hbar^4 (a_1 A_1 I_1^2 (a_2 A_2 K_2^2 + a_3 A_3 K_3^2) - a_1 A_1 I_1 K_1 (a_2 A_2 I_2 K_2 + a_3 A_3 I_3 K_3) \\ & \quad + a_2 a_3 A_2 A_3 I_2 K_3 (I_2 K_3 - I_3 K_2)) \\ & + (2m\beta)^3 a_1 a_2 a_3 A_1 A_2 A_3 I_1 K_3 (I_2 K_1 - I_1 K_2) (I_2 K_3 - I_3 K_2) = 0. \end{aligned}$$

En primer lugar, el hecho de que las expresiones estén igualadas a cero presenta cierta ambigüedad. Por ejemplo, si multiplicamos la expresión de 3 *anillos* por -1 todos los coeficientes se ven alterados por el signo menos, pero las soluciones quedan intactas. Esto puede complicar de manera innecesaria la búsqueda de la fórmula, por ello adoptamos el siguiente convenio.

Convenio: Sabemos que la expresión del determinante cuando existen n anillos se pueden expresar como un polinomio en β de la forma:

$$Q_n(\beta) = \sum_{i=0}^n \lambda_{i,n} \beta^i. \quad (3.10)$$

Como vemos el número de anillos determina el grado del polinomio. La expresión que fija los valores de los estados ligados es

$$Q_n(\beta) = 0. \quad (3.11)$$

El hecho de multiplicar ambos miembros por² $1/\lambda_{0,n}$ no afecta a estos valores, así que *elegimos* como expresión para la energía

$$\frac{1}{\lambda_{0,n}} Q_n(\beta) = \sum_{i=0}^n \frac{\lambda_{i,n}}{\lambda_{0,n}} \beta^i = 1 + \sum_{i=1}^n c_{i,n} \beta^i = 0. \quad (3.12)$$

²Vamos a ver que $\lambda_{0,n} \propto \hbar^{2n}$, por lo tanto distinto de cero.

Adaptamos las expresiones anteriores a este nuevo convenio

$$\begin{aligned} & \underline{1 \text{ anillo}} : \\ & 1 + \frac{2m\beta}{\hbar^2} a_1 A_1 I_1 K_1 = 0. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \underline{2 \text{ anillos}} : \\ & 1 + \frac{2m\beta}{\hbar^2} (a_1 A_1 I_1 K_1 + a_2 A_2 I_2 K_2) - \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^2 a_1 a_2 A_1 A_2 I_1 K_2 (I_1 K_2 - I_2 K_1) = 0. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \underline{3 \text{ anillos}} : \\ & 1 + \frac{2m\beta}{\hbar^2} (a_1 A_1 I_1 K_1 + a_2 A_2 I_2 K_2 + a_3 A_3 I_3 K_3) \\ & - \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^2 (a_1 A_1 I_1^2 (a_2 A_2 K_2^2 + a_3 A_3 K_3^2) - a_1 A_1 I_1 K_1 (a_2 A_2 I_2 K_2 + a_3 A_3 I_3 K_3) \\ & \quad + a_2 a_3 A_2 A_3 I_2 K_3 (I_2 K_3 - I_3 K_2)) \\ & - \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^3 a_1 a_2 a_3 A_1 A_2 A_3 I_1 K_3 (I_2 K_1 - I_1 K_2) (I_2 K_3 - I_3 K_2) = 0. \end{aligned}$$

Con este cambio vemos que realmente podemos poner estas expresiones como un polinomio en z , siendo $z := 2m\beta/\hbar^2$. Con tan solo tres anillos se pueden intuir las relaciones de recurrencia para algún coeficiente.

Proposición 3.3.1 *Primer y último coeficiente.*

Sea $P_n(z) = 1 + \sum_{i=1}^n c_{i,n} z^i$ el polinomio que, igualado a cero, determina el espectro de estados ligados cuando existen n anillos con radios arbitrarios. Entonces,

$$c_{1,n} = \sum_{i=1}^n a_i A_i I_i K_i. \quad (3.13)$$

$$c_{n,n} = (-1)^{n+1} \prod_{i=1}^n a_i A_i I_i K_n \prod_{j=1}^{n-1} (I_j K_{j+1} - I_{j+1} K_j). \quad (3.14)$$

Demostración En primer lugar comprobamos que las relaciones anteriores se cumplen para uno, dos y tres *anillos*. La idea para demostrar (3.13) y (3.14) es la misma y nos vamos a centrar en la segunda. En busca de la máxima simplicidad vamos a realizar la *prueba* para dos *anillos* y no para n . Esto está justificado ya que con dos se ve de forma concisa la base de la demostración y con n usaríamos esa misma base, pero la notación y el formalismo podrían camuflarla.

Partimos de (B.3) y tenemos en cuenta que estamos buscando el coeficiente $c_{2,2}$. Es decir, vamos a descartar aquellos sumandos en los que sea imposible que aparezca β^2 .

$$\left| \begin{array}{cccc} I_1 & -I_1 & -K_1 & 0 \\ \frac{-I_1^- - I_1^+}{2} - \frac{2m\beta A_1 I_1}{\hbar^2} & \frac{I_1^- + I_1^+}{2} & -\frac{K_1^- + K_1^+}{2} & 0 \\ 0 & I_2 & K_2 & -K_2 \\ 0 & \frac{-I_2^- - I_2^+}{2} & \frac{K_2^- + K_2^+}{2} & \frac{-K_2^- - K_2^+}{2} - \frac{2m\beta A_2 K_2}{\hbar^2} \end{array} \right|.$$

Las técnicas y la notación usadas para esta demostración están detalladas y convenientemente demostradas en el capítulo dedicado a determinantes de [15]. Desarrollamos el determinante por la primera columna ya que junto con la última es la que contiene la mayor cantidad de ceros. Si denotamos por $|M_{ij}|$ el menor complementario ij de la matriz de coeficientes

$$P_2(\beta) = I_1|M_{11}| - \left(\frac{1}{2}(-I_1^- - I_1^+) - \frac{2m\beta A_1 I_1}{\hbar^2} \right) |M_{21}|. \quad (3.15)$$

Para nuestro determinante $|M_{11}|$ no puede depender de β^2 al igual que $|M_{21}|$, y dependen como máximo de β . Por ello el único término que puede presentar la dependencia con β^2 es

$$\frac{2m\beta A_1 I_1}{\hbar} |M_{21}|. \quad (3.16)$$

Continuamos con el menor

$$|M_{21}| = \begin{vmatrix} -I_1 & -K_1 & 0 \\ I_2 & K_2 & -K_2 \\ \frac{1}{2}(-I_2^- - I_2^+) & \frac{1}{2}(K_2^- + K_2^+) & \frac{1}{2}(-K_2^- - K_2^+) - \frac{2m\beta A_2 K_2}{\hbar^2} \end{vmatrix}. \quad (3.17)$$

Éste lo desarrollamos por la última columna, teniendo en cuenta que ahora solo los términos que contengan β van a ser relevantes. Así, el único sumando que contribuye es

$$-\frac{2m\beta A_2 K_2}{\hbar^2} \begin{vmatrix} -I_1 & -K_1 \\ I_2 & K_2 \end{vmatrix} = \frac{2m\beta A_2 K_2}{\hbar^2} \begin{vmatrix} I_1 & K_1 \\ I_2 & K_2 \end{vmatrix} = \frac{2m\beta A_2 K_2}{\hbar^2} (I_1 K_2 - I_2 K_1).$$

El hecho de que el determinante sea una aplicación multilineal para las columnas conduce a la primera igualdad. Llevando este resultado a (3.16)

$$\left(\frac{2m\beta A_1 I_1}{\hbar^2} \right) \frac{2m\beta A_2 K_2}{\hbar^2} (I_1 K_2 - I_2 K_1) = \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^2 A_1 A_2 I_1 K_2 (I_1 K_2 - I_2 K_1). \quad (3.18)$$

Esta última expresión coincide con (3.14) salvo por el factor $-a_1 a_2$. Éste aparece cuando se multiplica a toda la ecuación para *normalizarla*, i.e., que el término independiente sea uno. Para la prueba del primer coeficiente se procede de manera similar, aunque en este caso se excluyen aquellos términos que puedan contener potencias mayores que uno.

3.3.1. Coeficientes intermedios

Si queremos hallar la ecuación trascendente para la energía ya conocemos cómo son el término independiente, primer y último coeficiente. Veamos qué relación cumplen el resto de coeficientes. Con las configuraciones expuestas hasta ahora el único coeficiente desconocido es

$$c_{2,3} = -a_1 A_1 I_1^2 (a_2 A_2 K_2^2 + a_3 A_3 K_3^2) + a_1 A_1 I_1 K_1 (a_2 A_2 I_2 K_2 + a_3 A_3 I_3 K_3) - a_2 a_3 A_2 A_3 I_2 K_3 (I_2 K_3 - I_3 K_2), \quad (3.19)$$

que con nuestra notación corresponde al segundo coeficiente del caso en el que existen tres anillos. Inspeccionando éste podemos intuir la siguiente estructura:

$$c_{2,3} = a_1 A_1 I_1^2 \left(- \sum_{i=2}^3 a_i A_i K_i^2 \right) + a_1 A_1 I_1 K_1 (c'_{1,2}) + c'_{2,2}, \quad (3.20)$$

con $c'_{1,2}$ denotamos el primer coeficiente de una configuración en la que existen dos *anillos*, aunque ahora el primero en r_2 y el segundo en r_3 . De alguna manera al estar este coeficiente multiplicado por $a_1 A_1 I_1 K_1$ ya se tiene en cuenta la contribución de la primera singularidad y $c'_{1,2}$ engloba las dos últimas. Igual con $c'_{2,2}$, este es el último coeficiente para una configuración con dos anillos, situados ahora en r_2 y r_3 .

Vamos a plantear la estructura más natural que vislumbramos con este coeficiente y después veremos si nuestras predicciones se cumplen cuando tenemos cuatro *anillos*. Ésta es

$$c_{2,n} = a_1 A_1 I_1^2 \left(- \sum_{i=2}^n a_i A_i K_i^2 \right) + a_1 A_1 I_1 K_1 (c'_{1,n-1}) + c'_{2,n-1}. \quad (3.21)$$

Para hallar los coeficientes de los cuatro anillos usamos las ecuaciones (3.3) y (3.4), teniendo en cuenta las modificaciones para el primer y último anillo. La matriz del determinante a resolver en este caso es 8×8 por lo que el número de sumandos que van apareciendo crece de manera considerable. Aún así, usando (A.13), (A.14) (A.15) y (A.16) obtenemos las expresiones para $c_{1,4}$, $c_{2,4}$, $c_{3,4}$, $c_{4,4}$ que aparecen en la *Sección B.2 del Apéndice B*.

En primer lugar observamos que $c_{1,4}$ y $c_{4,4}$ cumplen la Proposición 3.3.1. Veamos si debemos introducir alguna corrección en (3.21) para que $c_{2,4}$ también la cumpla

$$\begin{aligned} c_{2,4} = & a_1 A_1 I_1^2 \left(- \sum_{i=2}^4 a_i A_i K_i^2 \right) + a_1 A_1 I_1 K_1 (a_2 A_2 I_2 K_2 + a_3 A_3 I_3 K_3 + a_4 A_4 I_4 K_4) \\ & - a_3 a_4 A_3 A_4 I_3 K_4 (I_3 K_4 - I_4 K_3) + a_2 A_2 I_2 K_2 (a_3 A_3 I_3 K_3 + a_4 A_4 I_4 K_4) \\ & - a_2 A_2 I_2^2 (a_3 A_3 K_3^2 + a_4 A_4 K_4^2), \end{aligned} \quad (3.22)$$

que podemos expresar

$$c_{2,4} = a_1 A_1 I_1^2 \left(- \sum_{i=2}^4 a_i A_i K_i^2 \right) + a_1 A_1 I_1 K_1 (c'_{1,3}) - c'_{2,3}. \quad (3.23)$$

Debemos modificar (3.21) ya que en el último sumando hay un signo menos que no coincide. Proponemos

$$c_{2,n} = a_1 A_1 I_1^2 \left(- \sum_{i=2}^n a_i A_i K_i^2 \right) + a_1 A_1 I_1 K_1 (c'_{1,n-1}) + (-1)^{n+1} c'_{2,n-1}. \quad (3.24)$$

Esta nueva configuración nos brinda la oportunidad de analizar un nuevo tipo de coeficiente, $c_{3,4}$. Comprobemos si éste tiene una estructura similar a la de los coefi-

cientes $c_{2,n}$. Haciendo uso del listado de coeficientes del *Apéndice B*

$$\begin{aligned}
c_{3,4} = & a_1 A_1 I_1^2 [-a_4 A_4 I_4 K_4 (a_2 A_2 K_2^2 + a_3 A_3 K_3^2) + a_3 A_3 I_3 K_3 (a_4 A_4 K_4^2 - a_2 A_2 K_2^2) \\
& + a_2 A_2 I_2 K_2 (a_3 A_3 K_3^2 + a_4 A_4 K_4^2)] \\
& + a_1 A_1 I_1 K_1 [-a_2 A_2 I_2^2 (a_3 A_3 K_3^2 + a_4 A_4 K_4^2) \\
& + a_2 A_2 I_2 K_2 (a_3 A_3 I_3 K_3 + a_4 A_4 I_4 K_4) + a_3 a_4 A_3 A_4 I_3 K_4 (I_4 K_3 - I_3 K_4)] \\
& + a_2 a_3 a_4 A_2 A_3 A_4 I_2 K_4 (I_2 K_3 - I_3 K_2) (I_3 K_4 - I_4 K_3). \tag{3.25}
\end{aligned}$$

Salvo ciertos matices la estructura se repite y se puede poner como

$$c_{3,4} = a_1 A_1 I_1^2 [\dots] - a_1 A_1 I_1 K_1 (c'_{2,3}) + (c'_{3,3}). \tag{3.26}$$

Los matices están encerrados en el término que multiplica a $a_1 A_1 I_1^2$:

$$\begin{aligned}
& -a_4 A_4 I_4 K_4 (a_2 A_2 K_2^2 + a_3 A_3 K_3^2) + a_3 A_3 I_3 K_3 (a_4 A_4 K_4^2 - a_2 A_2 K_2^2) \\
& + a_2 A_2 I_2 K_2 (a_3 A_3 K_3^2 + a_4 A_4 K_4^2).
\end{aligned}$$

De forma más compacta

$$\sum_{i=2}^4 a_i A_i I_i K_i \left(\sum_{j=2, j \neq i}^4 \frac{j-i}{|j-i|} a_j A_j K_j^2 \right). \tag{3.27}$$

Con las cuatro configuraciones analizadas hemos conseguido determinar de forma total algunos coeficientes e intuir la estructura del resto. Aun así, parece que carecemos de la información necesaria que nos permitiría determinar de forma unívoca el polinomio $P_n(\beta)$. Añadimos un *anillo* más a la situación anterior y usando las mismas relaciones de recurrencia obtenemos los coeficientes listados en el *Apéndice B*.

Los resultados de la *Proposición 3.3.1* se siguen cumpliendo por lo que nos fijamos en $c_{2,5}$. Simplificando la expresión que aparece en el *Apéndice B*

$$\begin{aligned}
c_{2,5} = & a_1 A_1 I_1^2 \left(- \sum_{i=2}^n a_i A_i K_i^2 \right) + a_1 A_1 I_1 K_1 (c'_{1,4}) + \\
& a_2 A_2 I_2^2 \left(- \sum_{i=3}^n a_i A_i K_i^2 \right) + a_2 A_2 I_2 K_2 (c'_{1,3}) - a_5 A_5 K_5^2 (a_3 A_3 I_3^2 + a_4 A_4 I_4^2) \\
& + a_3 a_4 A_3 A_4 I_3 K_4 (I_4 K_3 - I_3 K_4) + a_5 A_5 I_5 K_5 (a_3 A_3 I_3 K_3 + a_4 A_4 I_4 K_4). \tag{3.28}
\end{aligned}$$

Antes de continuar aclaramos, por si pudiera crear confusión, qué entendemos por $c'_{1,3}$. Imaginemos que estamos analizando el coeficiente $c_{i,n}$ con $i \leq n$. Si al desarrollarlo nos aparece $c'_{j,m}$ con m necesariamente menor que n , este hará referencia al coeficiente de m *anillos* con radios $r_{n-m+1}, r_{n-m+1}, \dots, r_n$. En nuestro caso $c'_{1,3}$ apareciendo en la expresión de $c_{2,5}$ es el mismo coeficiente que $c_{1,3}$ pero ahora los radios pasan de r_1, r_2, r_3 a r_3, r_4, r_5 .

Nos faltan de identificar los tres últimos sumandos de (3.28). Teniendo en cuenta los resultados anteriores podríamos esperar que estos tres sumandos fueran, tras cambiar los tres últimos radios, del tipo $c_{2,5-2}$. Sin embargo, parece que ahora hay que realizar algún cambio adicional. Comparamos la estructura de ambos, agrupando los sumandos que guardan cierta relación:

$$\begin{aligned} a_1 A_1 I_1^2 (a_2 A_2 K_2^2 + a_3 A_3 K_3^2) & \dots - a_5 A_5 K_5^2 (a_3 A_3 I_3^2 + a_4 A_4 I_4^2), \\ -a_1 A_1 I_1 K_1 (a_2 A_2 I_2 K_2 + a_3 A_3 I_3 K_3) & \dots a_5 A_5 I_5 K_5 (a_3 A_3 I_3 K_3 + a_4 A_4 I_4 K_4), \\ +a_2 a_3 A_2 A_3 I_2 K_3 (I_2 K_3 - I_3 K_2) & \dots - a_3 a_4 A_3 A_4 I_3 K_4 (I_3 K_4 - I_4 K_3). \end{aligned}$$

Inspeccionando vemos que para pasar de la izquierda a la derecha debemos realizar el cambio

$$1 \rightarrow 5, \quad 2 \rightarrow 4, \quad I \rightarrow K \quad \text{y} \quad K \rightarrow I,$$

con un cambio de signo en toda la expresión. Nos aparece por tanto una situación nueva que no se asemeja a las estructura que surgía hasta ahora, aunque podemos argumentar de forma intuitiva cómo aparece este término.

Fijémonos en los determinantes de la *Sección B.1*, estos presentan cierta simetría entre el lado izquierdo, donde predominan las funciones de Bessel de primera especie y el derecho donde lo hacen las de segunda. Podría ser que este término surja de la parte derecha de la matriz, donde un cambio entre el papel de I por K parece razonable, al igual que un cambio en el número de las columnas, de la primera a la última, de la segunda a la penúltima, etc.

Pasamos a $c_{3,5}$. Vamos a comprobar como este se rige de forma análoga a como lo hacía $c_{3,4}$. En efecto, comparando las expresiones de los determinantes obtenemos:

$$c_{3,5} = a_1 A_1 I_1^2 \left[\sum_{i=2}^5 a_i A_i I_i K_i \left(\sum_{j=2, j \neq i}^4 \frac{j-i}{|j-i|} a_j A_j K_j^2 \right) \right] + a_1 A_1 I_1 K_1 (c'_{2,4}) + (c'_{3,4}).$$

Salvo por el signo menos que multiplicaba a $a_1 A_1 I_1 K_1$ en $c_{3,4}$, la estructura es la misma, por lo que podríamos proponer

$$\begin{aligned} c_{3,n} = a_1 A_1 I_1^2 \left[\sum_{i=2}^n a_i A_i I_i K_i \left(\sum_{j=2, j \neq i}^{n-1} \frac{j-i}{|j-i|} a_j A_j K_j^2 \right) \right] \\ + (-1)^{n+1} a_1 A_1 I_1 K_1 (c'_{2,n-1}) + (c'_{3,n-1}) \end{aligned} \quad (3.29)$$

Si comparamos con la estructura para $c_{2,n}$

$$c_{2,n} = a_1 A_1 I_1^2 \left(- \sum_{i=2}^n a_i A_i K_i^2 \right) + a_1 A_1 I_1 K_1 (c'_{1,n-1}) + (-1)^{n+1} c'_{2,n-1},$$

vemos que se repite un cierto formato

$$c_{j,n} = a_1 A_1 I_1^2 [\dots] \pm a_1 A_1 I_1 K_1 (c'_{j-1,n-1}) + (c'_{j,n-1}), \quad (3.30)$$

con $j < n$. Para finalizar mencionamos que se han realizado los cálculos para seis *anillos* obteniéndose los siguientes resultados:

- Se sigue verificando la *Proposición 3.3.1*.
- La estructura (3.30) se cumple.

Aunque la estructura se mantiene, los detalles finos cambian. Para proseguir deberíamos analizar alguna situación con más *anillos* pero ésto no es sencillo. Recordemos la definición de determinante [15]

$$\det(M) = \sum_{\sigma \in S_n} i(\sigma) a_{1\sigma(1)} a_{2\sigma(2)} \dots a_{n\sigma(n)}, \quad (3.31)$$

siendo a_{ij} el elemento ij de matriz cuadrada $M \in \mathcal{M}_{n \times n}(\mathbb{R})$, $i(\sigma)$ el índice de la permutación y S_n el grupo de permutaciones de n elementos. Este grupo contiene $n!$ componentes³ por lo que nos aparecerán $n!$ términos al calcular el determinante. El crecimiento con n es considerable, como se muestra en la *Figura 3.2*.

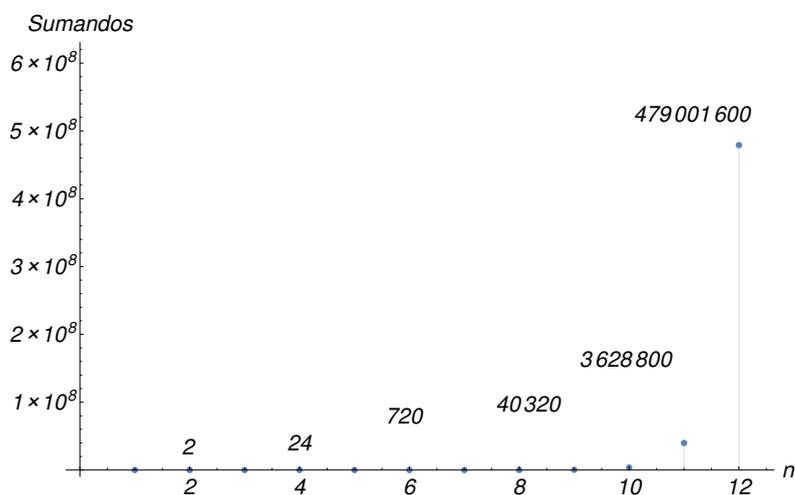


Figura 3.2: Número de sumandos para el determinante de una matriz cuadrada.

Por tanto la posibilidad de analizar más situaciones resulta ciertamente complicada. Además para una situación con n *anillos* la matriz es de orden $2n$ y el hecho de que existan ceros en gran parte de las columnas (ver *Apéndice B*) no simplifica suficiente éstos como para que el programa de cálculo *Mathematica* pueda llevar a cabo las simplificaciones oportunas.

³El número de posibles configuraciones distintas cambiando el orden.

Capítulo 4

Caso relativista de spin 1/2

En este capítulo nos centramos en buscar los estados ligados para dos potenciales centrales dentro del marco de la mecánica cuántica relativista: Coulomb y $V(r) = A\delta(r - r_0)$, este último habiendo sido ya analizado en el contexto no relativista. La motivación para analizar éstos es doble.

En primer lugar, aunque el potencial de Coulomb está profundamente estudiado [16], las expresiones que suelen aparecer en la literatura son para el caso tridimensional. Como ya se ha indicado nos interesan las aplicaciones en el estudio de materiales bidimensionales, por lo que conviene dar las expresiones en este caso. Por otro lado, no se ha encontrado resuelto el segundo potencial para partículas *relativistas* de spin 1/2, descritas por la ecuación de Dirac, así que es interesante dar un primer análisis en el que se podrá profundizar en trabajos posteriores.

4.1. Resolución ecuación de Dirac para un potencial central en dos dimensiones

En primer lugar vamos a plantear la ecuación de Dirac para un potencial genérico con las restricciones a que el potencial escalar sea **central** y el **potencial vector nulo**, en otras palabras, no consideramos la presencia de campos magnéticos. La ecuación de Dirac independiente del tiempo, teniendo en cuenta que trabajamos en dos dimensiones y que, por comodidad, elegimos el sistema de unidades tal que $\hbar = 1$ y $c = 1$, es

$$[eV(r) + \beta m + \alpha_1 P_x + \alpha_2 P_y]\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x}), \quad (4.1)$$

donde $\alpha_1, \alpha_2, \beta$ son las matrices de Dirac que cumplen las relaciones de anticonmutación:

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{i,j}, \quad \{\alpha_i, \beta\} = 0, \quad \beta^2 = 1. \quad (4.2)$$

Un conjunto de matrices que cumplen estas relaciones son:

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

donde σ_i son las matrices de Pauli:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

Introduciendo éstas en (4.1) obtenemos:

$$\begin{pmatrix} (P_x - iP_y)\psi_3 + \psi_0(m + eV(r)) \\ (P_x + iP_y)\psi_2 + \psi_1(m + eV(r)) \\ (P_x - iP_y)\psi_1 + \psi_2(eV(r) - m) \\ (P_x + iP_y)\psi_0 + \psi_3(eV(r) - m) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Para resolver esta ecuación diferencial proponemos la siguiente solución¹

$$\psi_0(r, \theta) := g(r)e^{in_0\theta}, \quad \psi_1(r, \theta) := g(r)e^{in_1\theta}, \quad (4.6)$$

$$\psi_2(r, \theta) := f(r)e^{in_2\theta}, \quad \psi_3(r, \theta) := f(r)e^{in_3\theta}. \quad (4.7)$$

Sabemos que en mecánica cuántica relativista el momento se puede expresar de manera análoga a como lo hacemos en mecánica cuántica ordinaria, por ello

$$\vec{P} = -i\vec{\nabla},$$

es decir

$$P_x = -i\partial_x \quad \text{y} \quad P_y = -i\partial_y.$$

Tenemos un potencial central por lo que en la situación relativista también conviene realizar un cambio de variable para expresar el operador momento en función de las coordenadas polares. Sabemos que este cambio está dado por

$$x(r, \theta) = r \cos \theta, \quad (4.8)$$

$$y(r, \theta) = r \sin \theta, \quad (4.9)$$

y a modo de ejemplo vamos a ver cómo cambia ∂_x . Los resultados a los que vamos a recurrir para este fin, básicamente la regla de la cadena en varias variables, se pueden consultar en [17]. La función que vamos a derivar con respecto a x es

$$\psi(r(x, y), \theta(x, y))$$

Si tenemos en cuenta la regla de la cadena

$$\partial_x \psi(r(x, y), \theta(x, y)) = \partial_x r \partial_r \psi(r, \theta) + \partial_x \theta \partial_\theta \psi(r, \theta) \quad (4.10)$$

Haciendo uso de (4.8)

$$\partial_x r = \cos \theta, \quad \partial_x \theta = -\frac{\sin \theta}{r}.$$

Por tanto

$$P_x = -i \left(\cos \theta \partial_r - \frac{\sin \theta}{r} \partial_\theta \right), \quad (4.11)$$

y si se repite el mismo procedimiento para P_y

$$P_y = -i \left(\sin \theta \partial_r + \frac{\cos \theta}{r} \partial_\theta \right). \quad (4.12)$$

¹Esta propuesta es compatible con el método de separación de variables.

Así (4.5) pasa a:

$$\begin{pmatrix} -e^{in_0\theta}g(r)(E - m - eV(r)) - \frac{ie^{i(n_3-1)\theta}(n_3f(r) + rf'(r))}{r} \\ \frac{ie^{i(n_2+1)\theta}(n_2f(r) - rf'(r))}{r} - e^{in_1\theta}g(r)(E - m - eV(r)) \\ -e^{in_2\theta}f(r)(E + m - eV(r)) - \frac{+e^{i(n_1-1)\theta}(n_1g(r) + rg'(r))}{r} \\ \frac{ie^{i(n_0+1)\theta}(n_0g(r) - rg'(r))}{r} - e^{in_3\theta}f(r)(E + m - eV(r)) \end{pmatrix} = \vec{0} \quad (4.13)$$

Si queremos que el método de separación de variables sea aplicable se debe cumplir,

$$n_3 = n_0 + 1, \quad n_2 = n_1 - 1, \quad (4.14)$$

ya que así podemos sacar factor común a las exponenciales en cada elemento de la matriz y separar la parte angular de la radial. Como cada ecuación de (4.13) está multiplicada por una exponencial compleja, e igualada a cero, podemos simplificar éstas, obteniendo

$$\begin{pmatrix} r(g(r)(-E + m + eV(r)) - if'(r)) - i(n_0 + 1)f(r) \\ i(n_1 - 1)f(r) + r(g(r)(-E + m + eV(r)) - if'(r)) \\ rf(r)(E + m - eV(r)) + i(n_1g(r) + rg'(r)) \\ i(n_0g(r) - rg'(r)) - rf(r)(E + m - eV(r)) \end{pmatrix} = \vec{0}. \quad (4.15)$$

Analizamos este sistema de ecuaciones. Si a la primera ecuación le restamos la segunda obtenemos:

$$- \frac{if(r)(n_0 + n_1)}{r} = 0 \Leftrightarrow \ell := n_0 = -n_1, \quad (4.16)$$

ya que $f(r)$ no puede ser la función idénticamente nula. Además, si exigimos la condición de periodicidad²

$$\psi(r, \theta) = \psi(r, \theta + 2\pi),$$

obtenemos $\ell \in \mathbb{Z}$. Con esto, nuestro sistema pasa a

$$\begin{pmatrix} r(g(r)(-E + m + eV(r)) - if'(r)) - i(\ell + 1)f(r) \\ i(-\ell - 1)f(r) + r(g(r)(-E + m + eV(r)) - if'(r)) \\ -rf(r)(E + m - eV(r)) - i(rg'(r) - \ell g(r)) \\ i(\ell g(r) - rg'(r)) - rf(r)(E + m - eV(r)) \end{pmatrix} = \vec{0}. \quad (4.17)$$

Vemos que la primera ecuación es igual a la segunda y lo mismo ocurre con la tercera y la cuarta. Por ello, nuestro sistema se reduce al siguiente par de ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$\begin{pmatrix} r(g(r)(-E + m + eV(r)) - if'(r)) - i(\ell + 1)f(r) \\ i(\ell g(r) - rg'(r)) - rf(r)(E + m - eV(r)) \end{pmatrix} = \vec{0}. \quad (4.18)$$

²Igual que en el caso no relativista.

Éstas son dos ecuaciones diferenciales lineales de primer orden³. Para resolverlas introducimos los siguientes cambios de funciones incógnita:

$$f_\ell(r) := i\sqrt{r} f(r), \quad g_\ell(r) := \sqrt{r} g(r), \quad (4.19)$$

con lo que

$$\begin{pmatrix} -(2\ell + 1)f_\ell(r) - 2r(g_\ell(r)(-\alpha_2 - eV(r)) + f'_\ell(r)) \\ (2\ell + 1)g_\ell(r) + 2r(f_\ell(r)(\alpha_1 - eV(r)) - g'_\ell(r)) \end{pmatrix} = \vec{0}, \quad (4.20)$$

donde hemos definido $\alpha_1 := m + E$ y $\alpha_2 := m - E$. El tratamiento general concluye aquí ya que para poder avanzar necesitamos dar una forma explícita al potencial. Empezaremos con el potencial Coulombiano, finalizando con el mismo potencial singular de la *Sección 2.1*.

4.1.1. Potencial Coulombiano

Supongamos un potencial del tipo:

$$V(r) = -\frac{\gamma}{er}, \quad \text{con } \gamma > 0. \quad (4.21)$$

Si llevamos éste a (4.20) y realizamos el cambio de variable $x := \sqrt{\alpha_1\alpha_2} r$ obtenemos:

$$\begin{pmatrix} F'(x) + \frac{kF(x)}{x} - G(x) \left(\sqrt{\frac{\alpha_2}{\alpha_1}} - \frac{\gamma}{x} \right) \\ G'(x) - \frac{kG(x)}{x} - F(x) \left(\sqrt{\frac{\alpha_1}{\alpha_2}} + \frac{\gamma}{x} \right) \end{pmatrix} = \vec{0}, \quad (4.22)$$

donde hemos usado la siguiente notación:

$$F(x) := f_\ell(r), \quad G(x) := g_\ell(r) \quad \text{y} \quad k := \ell + \frac{1}{2}. \quad (4.23)$$

Para resolver este sistema de forma sencilla analizamos el comportamiento asintótico de las soluciones.

- $x \rightsquigarrow \infty$: Descartando los términos que para x suficientemente grande no contribuyen y definiendo⁴ $F_\infty(x)$ como la solución $F(x)$ de (4.22) para valores arbitrariamente altos de x , nuestro sistema a resolver es:

$$\begin{pmatrix} F'_\infty(x) - \sqrt{\frac{\alpha_2}{\alpha_1}} G_\infty(x) \\ G'_\infty(x) - \sqrt{\frac{\alpha_1}{\alpha_2}} F_\infty(x) \end{pmatrix} = \vec{0}. \quad (4.24)$$

Si de la primera ecuación de (4.24) despejamos $G_\infty(x)$ y lo introducimos en la segunda llegamos a una ecuación analíticamente resoluble para $F_\infty(x)$:

$$F''_\infty(x) - F_\infty(x) = 0. \quad (4.25)$$

Cuya solución, tras exigir finitud, es proporcional a e^{-x} . Si usamos este resultado en la primera ecuación de (4.24) obtenemos que también $G_\infty(x) \propto e^{-x}$.

³Nótese la diferencia con el *Sección 2.1* donde nos aparecía una única ecuación diferencial lineal de segundo orden.

⁴De forma análoga para $G_\infty(x)$.

- $x \rightsquigarrow 0$: Ahora debemos resolver

$$\begin{pmatrix} F_0'(x) + \frac{k F_0(x)}{x} + \frac{\gamma}{x} G_0(x) \\ G_0'(x) - \frac{k G_0(x)}{x} - \frac{\gamma}{x} F_0(x) \end{pmatrix} = \vec{0}. \quad (4.26)$$

Si seguimos el mismo procedimiento que en el caso $x \rightsquigarrow \infty$ obtenemos una ecuación de *Euler* para $F_0(x)$:

$$x^2 F_0''(x) + x F_0'(x) + F_0(x) (\gamma^2 - k^2) = 0. \quad (4.27)$$

Realizando el cambio de variable $x = e^z$ y descartando las soluciones divergentes de esta ecuación, encontramos

$$F_0(x), G_0(x) \propto x^s, \quad (4.28)$$

con $s := \sqrt{k^2 - \gamma^2}$.

Por lo tanto como solución a (4.22) proponemos la siguiente serie de potencias:

$$F(x) = e^{-x} x^s \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i, \quad G(x) = e^{-x} x^s \sum_{i=0}^{\infty} b_i x^i, \quad (4.29)$$

donde se ha tenido en cuenta los términos dominantes para $x \rightsquigarrow 0$ y $x \rightsquigarrow \infty$. La serie determinará el comportamiento intermedio. Si introducimos (4.29) en la primera ecuación de (4.22),

$$a_0(k+s) + b_0\gamma + \sum_{j=1}^{\infty} x^j \left(a_j(k+s) - a_{j-1} + j a_j + \gamma b_j - \sqrt{\frac{\alpha_2}{\alpha_1}} b_{j-1} \right) = 0. \quad (4.30)$$

Tenemos una serie de potencias igualada a la serie idénticamente nula, si hacemos uso del principio de identidad cada coeficiente de la serie debe ser nulo, por lo tanto:

$$b_0 = -\frac{k+s}{\gamma} a_0, \quad a_j(k+j+s) - a_{j-1} - \sqrt{\frac{\alpha_2}{\alpha_1}} b_{j-1} + \gamma b_j = 0. \quad (4.31)$$

Podríamos repetir este proceso introduciendo (4.29) en la segunda ecuación de (4.22) pero es más sencillo darse cuenta de que estas ecuaciones son estructuralmente idénticas salvo por los siguientes cambios:

$$\gamma \rightarrow -\gamma, \quad k \rightarrow -k, \quad \sqrt{\frac{\alpha_2}{\alpha_1}} \rightarrow \sqrt{\frac{\alpha_1}{\alpha_2}}, \quad a_i \rightarrow b_i, \quad b_i \rightarrow a_i.$$

Así, llevando este cambio a (4.31):

$$a_0 = \frac{-k+s}{\gamma} b_0, \quad b_j(-k+j+s) - b_{j-1} - \sqrt{\frac{\alpha_1}{\alpha_2}} a_{j-1} - \gamma a_j = 0. \quad (4.32)$$

El problema de (4.31) y (4.32) es que las relaciones de recurrencia están acopladas, es decir, los coeficientes a_j aparecen en la relación de b_j y viceversa. Para desacoplarlas

multiplicamos la segunda ecuación de (4.31) por $\sqrt{\frac{\alpha_1}{\alpha_2}}$ y al resultado le restamos la segunda de (4.32), obteniendo:

$$b_j = -\frac{a_j \left(\gamma + \sqrt{\frac{\alpha_1}{\alpha_2}}(k + j + s) \right)}{\gamma \sqrt{\frac{\alpha_1}{\alpha_2}} + k - j - s}. \quad (4.33)$$

Finalmente llevando (4.33) a (4.31) llegamos a la siguiente relación de recurrencia para los coeficientes de la serie de $F(x)$,

$$\frac{a_j}{a_{j-1}} = -\frac{\frac{\sqrt{\frac{\alpha_2}{\alpha_1}} \left(\gamma + \sqrt{\frac{\alpha_1}{\alpha_2}}(k + j + s - 1) \right)}{\gamma \sqrt{\frac{\alpha_1}{\alpha_2}} + k - j - s + 1} - 1}{-\frac{\gamma \left(\gamma + \sqrt{\frac{\alpha_1}{\alpha_2}}(k + j + s) \right)}{\gamma \sqrt{\frac{\alpha_1}{\alpha_2}} + k - j - s} + k + j + s}. \quad (4.34)$$

Teniendo en cuenta los sumandos dominantes cuando j es suficientemente grande en (4.34) vemos que el cociente tiende a $2/j$. Así, a_j resultará ser

$$a_j = \frac{2a_{j-1}}{j} = \frac{2^2 a_{j-2}}{j(j-1)} \propto \frac{2^j}{j!}. \quad (4.35)$$

Conviene recordar que el desarrollo en serie de Taylor en torno a cero de la exponencial es

$$e^x = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{x^j}{j!},$$

con lo que $F(x)$ se comportaría como $e^{-x} x^s e^{2x} = x^s e^x$. Esto no es físicamente aceptable por la finitud de la densidad de probabilidad. Para eliminar esta divergencia debemos *truncar* la serie, es decir, eliminar todos los sumandos por encima de un cierto j . Supongamos que existe un número natural n_0 tal que $a_{n_0} = 0$, que teniendo en cuenta (4.34) implica

$$\frac{\sqrt{\frac{\alpha_2}{\alpha_1}} \left(\gamma + \sqrt{\frac{\alpha_1}{\alpha_2}}(k + n_0 + s - 1) \right)}{\gamma \sqrt{\frac{\alpha_1}{\alpha_2}} + k - n_0 - s + 1} = 1. \quad (4.36)$$

Como $\alpha_1 = m + E$ y $\alpha_2 = m - E$, podemos despejar la energía de esta última ecuación

$$E = \frac{m}{\sqrt{\frac{\gamma^2}{(-n_0 - s + 1)^2} + 1}}. \quad (4.37)$$

Al contrario que en los casos analizados hasta ahora, obtenemos una expresión analítica⁵ para la energía. También existe una solución con energía negativa para (4.36) que corresponde a antimateria.

⁵Nos referimos a que no es una ecuación trascendente.

4.1.2. Potencial $V(r) = A \delta(r - r_0)$

Pasamos a determinar los estados ligados para un potencial singular similar al empleado en el caso de Schrödinger. Teniendo en cuenta (4.18) debemos resolver el siguiente sistema:

$$\begin{pmatrix} -(2\ell + 1)f_\ell(r) - 2r(g_\ell(r)(-\alpha_2 - eA\delta(r - r_0)) + f'_\ell(r)) \\ (2\ell + 1)g_\ell(r) + 2r(f_\ell(r)(\alpha_1 - eA\delta(r - r_0)) - g'_\ell(r)) \end{pmatrix} = \vec{0}. \quad (4.38)$$

Al igual que en el caso no relativista nos surgen dos regiones. Supongamos que $r \neq r_0$ entonces (4.38) pasa a

$$\begin{pmatrix} -(2\ell + 1)f_\ell(r) - 2r(-g_\ell(r)\alpha_2 + f'_\ell(r)) \\ (2\ell + 1)g_\ell(r) + 2r(f_\ell(r)\alpha_1 - g'_\ell(r)) \end{pmatrix} = \vec{0}. \quad (4.39)$$

Despejando $g_\ell(r)$ de la primera e introduciéndolo en la segunda llegamos a

$$f''_\ell(r) - f_\ell(r) \left(\alpha_1 \alpha_2 + \frac{k(k+1)}{r^2} \right) = 0. \quad (4.40)$$

Haciendo el siguiente cambio de variable y de función incógnita:

$$f_\ell(r) = \sqrt{r} F_\ell(x), \quad r = \frac{1}{\sqrt{\alpha_1 \alpha_2}} x, \quad (4.41)$$

obtenemos la ecuación de Bessel modificada

$$F''_\ell(x) + \frac{F'_\ell(x)}{x} - F_\ell(x) \left(\frac{(\frac{\ell+2}{2})^2}{x^2} + 1 \right) = 0. \quad (4.42)$$

Ya sabemos que la solución general a esta ecuación es

$$F(x) = \lambda_1 I_\ell(x) + \lambda_2 K_\ell(x), \quad (4.43)$$

donde $I_\ell(x), K_\ell(x)$ son las funciones de Bessel modificadas de primera y segunda especie. Tras exigir finitud, al igual que en la *Sección 2.1*, obtenemos como solución

$$f_\ell(r) = \begin{cases} \lambda_1 \sqrt{r} I_{\frac{\ell+2}{2}}(\sqrt{\alpha_1 \alpha_2} r), & \text{si } r < r_0, \\ \lambda_2 \sqrt{r} K_{\frac{\ell+2}{2}}(\sqrt{\alpha_1 \alpha_2} r), & \text{si } r > r_0. \end{cases} \quad (4.44)$$

Para obtener $g_\ell(r)$ no tenemos que resolver la ecuación diferencial de nuevo. Si llevamos (4.44) a la primera ecuación de (4.26) y usamos las relaciones (A.13) y (A.14):

$$g_\ell(r) = \begin{cases} \lambda_1 \frac{2r\sqrt{\alpha_1 \alpha_2} I_{\frac{\ell}{2}}(\sqrt{\alpha_1 \alpha_2} r)}{2\alpha_2 \sqrt{r}}, & \text{si } r < r_0, \\ \lambda_2 \frac{-2r\sqrt{\alpha_1 \alpha_2} K_{\frac{\ell}{2}}(\sqrt{\alpha_1 \alpha_2} r)}{2\alpha_2 \sqrt{r}}, & \text{si } r > r_0. \end{cases} \quad (4.45)$$

Como vemos este problema es similar al de la *Sección 2.1* aunque con matices. Ahora tenemos una ecuación diferencial del primer orden en lugar de una de segundo, por lo que la discontinuidad debe aparecer en la función y no en la derivada. La forma de evaluarla es la misma que se ha usado anteriormente; integramos en el intervalo $(r_0 - \varepsilon, r_0 + \varepsilon)$ las dos ecuaciones de (4.38). Al hacer $\varepsilon \rightarrow 0$ tenemos

$$f_\ell(r_0^+) - f_\ell(r_0^-) - A e \frac{g_\ell(r_0^+) + g_\ell(r_0^-)}{2} = 0, \quad (4.46)$$

$$g_\ell(r_0^+) - g_\ell(r_0^-) + A e \frac{f_\ell(r_0^+) + f_\ell(r_0^-)}{2} = 0. \quad (4.47)$$

Aquí nos aparece una situación nueva con respecto a la evaluación de la discontinuidad en el caso no relativista. Tenemos

$$\int_{r_0-\varepsilon}^{r_0+\varepsilon} \delta(r - r_0) y(r),$$

con $y(r) = f_\ell(r)$, $g_\ell(r)$ y el problema reside en que $y(r)$ es una función discontinua. Ante esta disyuntiva usaremos el procedimiento usual, el que siguen los autores de [18] y [5]:

$$\delta(r - r_0) y(r) := \frac{y_\ell(r_0^+) + y_\ell(r_0^-)}{2} \delta(r - r_0). \quad (4.48)$$

Notamos que para puntos donde la función es continua recuperamos el comportamiento habitual de la delta de Dirac. Si introducimos (4.44) y (4.45) en (4.46) y (4.47) obtenemos un sistema lineal y homogéneo en λ_1 y λ_2 :

$$\begin{aligned} & \lambda_1 \left[-\sqrt{r_0} I_{\frac{\ell+2}{2}}(\sqrt{\alpha_1 \alpha_2} r_0) - \frac{A e \sqrt{r_0} \sqrt{\alpha_1 \alpha_2} I_{\frac{\ell}{2}}(\sqrt{\alpha_1 \alpha_2} r_0)}{2\alpha_2} \right] \\ & + \lambda_2 \left[\sqrt{r_0} K_{\frac{\ell+2}{2}}(\sqrt{\alpha_1 \alpha_2} r_0) + \frac{A e \sqrt{r_0} \sqrt{\alpha_1 \alpha_2} K_{\frac{\ell}{2}}(\sqrt{\alpha_1 \alpha_2} r_0)}{2\alpha_2} \right] = 0, \\ & \lambda_1 \left[\frac{1}{2} A e \sqrt{r_0} I_{\frac{\ell+2}{2}}(\sqrt{\alpha_1 \alpha_2} r_0) - \frac{\sqrt{r_0} \sqrt{\alpha_1 \alpha_2} I_{\frac{\ell}{2}}(\sqrt{\alpha_1 \alpha_2} r_0)}{\alpha_2} \right] \\ & + \lambda_2 \left[\frac{1}{2} A e \sqrt{r_0} K_{\frac{\ell+2}{2}}(\sqrt{\alpha_1 \alpha_2} r_0) - \frac{\sqrt{r_0} \sqrt{\alpha_1 \alpha_2} K_{\frac{\ell}{2}}(\sqrt{\alpha_1 \alpha_2} r_0)}{\alpha_2} \right] = 0. \end{aligned}$$

Para que la solución no sea trivial de nuevo debemos exigir que el determinante de la matriz de coeficientes de este sistema sea nulo. Esto nos lleva a la siguiente ecuación trascendente para la energía:

$$-A^2 e^2 + 4 + 4A e r_0 \left(\alpha_1 I_{\frac{n}{2}}(x_E) K_{\frac{n}{2}}(x_E) - \alpha_2 I_{\frac{n+2}{2}}(x_E) K_{\frac{n+2}{2}}(x_E) \right) = 0, \quad (4.49)$$

donde $x_E = \sqrt{\alpha_1 \alpha_2} r_0$. Al incluir potenciales singulares dejamos de tener ecuaciones analíticamente resolubles⁶ por ello si queremos hallar las soluciones de esta ecuación

⁶Como sí tenemos con el potencial coulombiano.

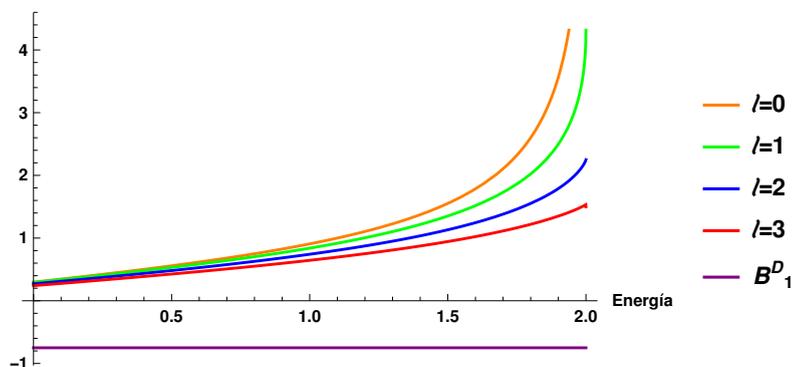


Figura 4.1: $f_1^D(E, \ell)$ para distintos valores de ℓ . Con nuestro sistema de unidades, $m = 2$, $r_0 = 1$, $e = -1$, $A = -1$.

debemos recurrir a métodos gráficos y/o numéricos. Para usar estos métodos de forma adecuada definimos:

$$f_1^D(E, \ell) := \alpha_1 I_{\frac{\ell}{2}}(x_E) K_{\frac{\ell}{2}}(x_E) - \alpha_2 I_{\frac{\ell+2}{2}}(x_E) K_{\frac{\ell+2}{2}}(x_E), \quad B_1^D = \frac{A^2 e^2 - 4}{4A e r_0},$$

con lo que (4.49) es equivalente a $f_1^D(E, \ell) = B_1^D$. Como en el resto de casos, nos aparece una función que depende de la energía, como una combinación de funciones de Bessel modificadas de primera y segunda especie, igualada a un parámetro independiente de la energía, que queda determinado por la configuración. Sin embargo, ahora la energía no solo aparece dentro de los argumentos de las funciones de Bessel como en el caso no relativista.

Resolución gráfica

Seguimos el procedimiento habitual, representamos $f_1^D(E, \ell)$ en distintas configuraciones y analizamos cómo los parámetros modifican el espectro. Para la primera situación (Figura 4.1) no tenemos estados ligados ya que B_1^D no corta a $f_1^D(E, \ell)$ para ningún valor de ℓ . Por razonamientos físicos podríamos pensar que aumentado la intensidad de la delta (pozo) conseguiríamos estados ligados. En la Figura 4.2 he-

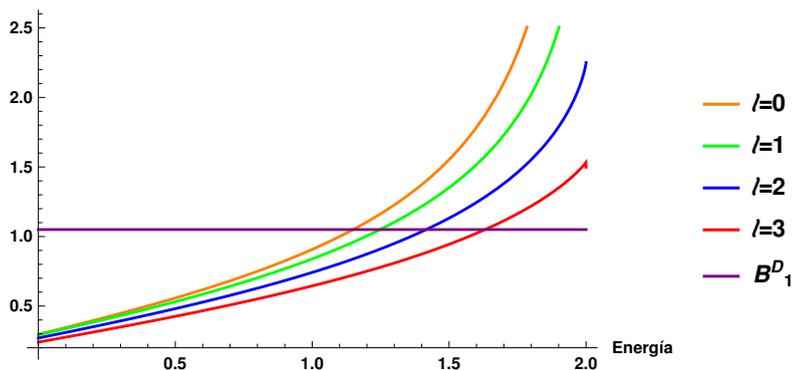


Figura 4.2: $f_1^D(E, \ell)$ para distintos valores de ℓ . Con nuestro sistema de unidades, $m = 2$, $r_0 = 1$, $e = -1$, $A = -5$.

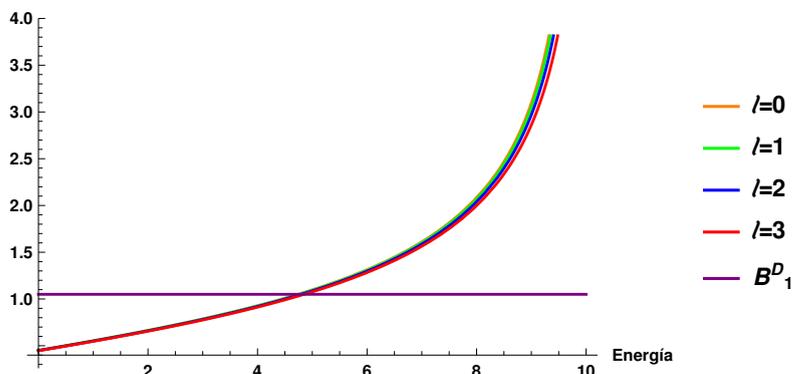


Figura 4.3: $f_1^D(E, \ell)$ para distintos valores de ℓ . Con nuestro sistema de unidades, $m = 10$, $r_0 = 1$, $e = -1$, $A = -5$.

mos multiplicado por cinco la amplitud viendo que ya aparecen estados para ciertos valores del momento angular.

De forma matemática es fácil ver por qué al aumentar la **amplitud** de la delta nos han aparecido estados ligados. Sabemos que $B_1^D = \frac{A^2 e^2 - 4}{4Ae r_0}$, pero $f_1^D(E, \ell)$ con nuestros parámetros es positivo por lo que como mínimo

$$A^2 e^2 > 4 \Leftrightarrow A < -\frac{4}{|e|},$$

siendo $A < -4$ en nuestro caso. Es importante notar que $f_1^D(E, \ell)$ no depende de A . La **masa** m de la partícula no aparece en el miembro derecho de (4.49) pero sí en el izquierdo. Si aumentamos la masa de forma considerable en la situación en la que existen estados ligados notamos (*Figura 4.4*) que el valor de la energía del estado ligado tiende a concentrarse en un punto para los distintos valores del momento angular, es decir, el aumento de la masa provoca una *degeneración en energía*.

Finalmente analizamos como es la dependencia con el **radio**. Se ha aumentado cinco veces el valor de éste (*Figura 4.3*) y, al igual que en caso relativista, se observa que los efectos que provocan la masa y el radio son, cualitativamente, los mismos.

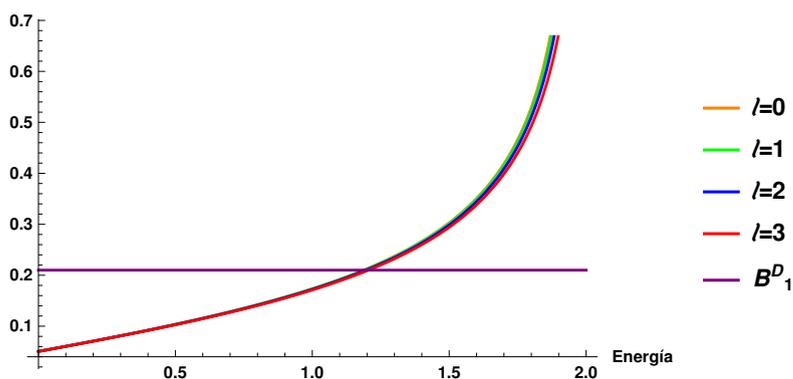


Figura 4.4: $f_1^D(E, \ell)$ para distintos valores de ℓ . Con nuestro sistema de unidades, $m = 2$, $r_0 = 5$, $e = -1$, $A = -5$.

Capítulo 5

Scattering no relativista: un *anillo*

Finalizamos nuestro trabajo con un capítulo dedicado a la dispersión por un potencial singular. En primer lugar se detalla el cálculo explícito de los desfasajes creados por el potencial singular con $A > 0$ y después se explica como éstos pueden servir para calcular la energía de vacío, efecto Casimir, entre dos discos. De nuevo, estos cálculos no se han encontrado en otras referencias, de ahí que se iniciara este estudio, aún por concluir.

5.1. Cálculo de los desfasajes

Podemos resolver el mismo problema que en el primer capítulo pero ahora centrándonos en los estados que descartamos allí, aquellos de energía positiva. Al buscar estados de scattering nuestro potencial (*Figura 5.1*) debe ser

$$V(r) = A\delta(r - r_0), \quad \text{con} \quad A > 0, \quad r := |\vec{r}|, \quad r_0 > 0. \quad (5.1)$$

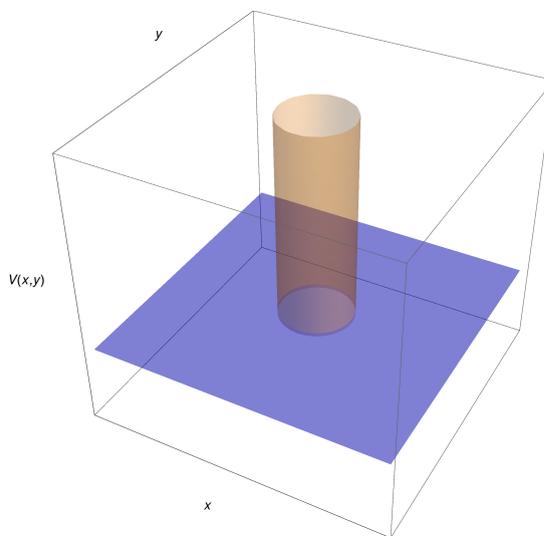


Figura 5.1: Potencial $V(r) = A\delta(r - r_0)$.

Por tanto la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + A \delta(r - r_0) \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}. \quad (5.2)$$

Teniendo en cuenta el procedimiento seguido en la *Sección 2.1* la condición de $E > 0$ se impone al resolver la parte radial, por ello la parte angular y temporal quedan invariantes¹. La ecuación (2.23) con $E > 0$ se puede expresar como

$$\frac{d^2 R(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dR(x)}{dx} + \left[\frac{2m\beta^2 E}{\hbar^2} - \left(\frac{\ell}{x}\right)^2 + \frac{2mA\beta^2}{\hbar^2|\beta|} \delta(x-a) \right] R(x) = 0. \quad (5.3)$$

De nuevo elegimos β tal que la ecuación diferencial pase a ser una de la que conocemos las soluciones. La ecuación de Bessel para índice ℓ es

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dy(x)}{dx} + \left[1 - \left(\frac{\ell}{x}\right)^2 \right] y(x) = 0. \quad (5.4)$$

En [9] se demuestra, haciendo uso del método de Frobenius, que la solución general de esta ecuación diferencial lineal de segundo orden se puede poner como una combinación lineal de las funciones de Bessel de primera y segunda especie (o de Neumann)

$$y_\ell(x) = \lambda_J J_\ell(x) + \lambda_Y Y_\ell(x). \quad (5.5)$$

Si elegimos

$$\beta := \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}} > 0, \quad (5.6)$$

la ecuación (5.3) pasa a

$$\frac{d^2 R(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dR(x)}{dx} + \left[1 - \left(\frac{\ell}{x}\right)^2 + \alpha \delta(x-a) \right] R(x) = 0. \quad (5.7)$$

con $\alpha := 2mA\beta/\hbar^2$. La situación es completamente análoga a la de un *anillo*, donde llegamos a la ecuación (2.26). La única diferencia está en que la ecuación diferencial pasa de ser una modificada de Bessel a una *usual* de Bessel. Si distinguimos entre las dos regiones mostradas en la *Figura 2.3* la solución general se puede expresar como

$$R_\ell(x) = \begin{cases} c_1^I J_\ell(x) + c_2^I Y_\ell(x), & \text{si } x \in I, \\ c_1^{II} J_\ell(x) + c_2^{II} Y_\ell(x), & \text{si } x \in II. \end{cases} \quad (5.8)$$

El comportamiento de la función de Bessel de segunda especie diverge en el origen (ver *Sección A.1*) por lo que la solución que cumple las condiciones de finitud es

$$R_\ell(x) = \begin{cases} c_1^I J_\ell(x), & \text{si } x \in I, \\ c_1^{II} J_\ell(x) + c_2^{II} Y_\ell(x), & \text{si } x \in II. \end{cases} \quad (5.9)$$

¹Siguen siendo la particularización de los armónicos esféricos para el caso bidimensional.

Para mayor simplicidad en los cálculos venideros escribimos esta ecuación como

$$R_\ell(x) = \frac{1}{N} \begin{cases} J_\ell(x), & \text{si } x \in I, \\ AJ_\ell(x) + BY_\ell(x) & \text{si } x \in II, \end{cases} \quad (5.10)$$

siendo N una constante de normalización. Como nuestro potencial singular es el mismo que en el *Capítulo 2* la parte radial de la función debe de ser continua y presentar una discontinuidad de salto finito en a . La condición de continuidad en este punto se traduce en

$$J_\ell(a) = AJ_\ell(a) + BY_\ell(a). \quad (5.11)$$

Y siguiendo el mismo procedimiento para evaluar el salto finito de la discontinuidad

$$\frac{dR(x)}{dx}(a^+) - \frac{dR(x)}{dx}(a^-) = \alpha R(a), \quad (5.12)$$

que teniendo en cuenta (5.10):

$$A \left(J_{\ell-1}(a) - \frac{lJ_\ell(a)}{a} \right) + B \left(Y_{\ell-1}(a) - \frac{lY_\ell(a)}{a} \right) = -\frac{(l-a\alpha)J_\ell(a)}{a} + J_{\ell-1}(a) \quad (5.13)$$

Por tanto tenemos un sistema algebraico de dos ecuaciones lineales cuyas incógnitas son A y B . Este sistema es no homogéneo por lo que no será necesario que se anule el determinante de la matriz de coeficientes. Si recordamos los resultados anteriores, esta condición nos restringía los valores de la energía a un cierto espectro discreto. En forma matricial el sistema es

$$\begin{pmatrix} J_{\ell-1}(a) - \frac{lJ_\ell(a)}{a} & Y_{\ell-1}(a) - \frac{lY_\ell(a)}{a} \\ J_\ell(a) & Y_\ell(a) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_{\ell-1}(a) - \frac{(l-a\alpha)J_\ell(a)}{a} \\ J_\ell(a) \end{pmatrix}. \quad (5.14)$$

Cuando buscábamos estados ligados no nos interesaba resolver el sistema. Sin embargo, aquí la información relevante, por ejemplo el cálculo del *phase shift*, se halla con ayuda de estos coeficientes. En primer lugar nos aseguramos de que la matriz cuadrada 2×2

$$\begin{pmatrix} J_{\ell-1}(a) - \frac{lJ_\ell(a)}{a} & Y_{\ell-1}(a) - \frac{lY_\ell(a)}{a} \\ J_\ell(a) & Y_\ell(a) \end{pmatrix} \quad (5.15)$$

es invertible. Resolvemos el determinante haciendo uso de las relaciones de recurrencia para las funciones de Bessel (*Sección A.1 del Apéndice A*) y obtenemos

$$\begin{vmatrix} J_{\ell-1}(a) - \frac{lJ_\ell(a)}{a} & Y_{\ell-1}(a) - \frac{lY_\ell(a)}{a} \\ J_\ell(a) & Y_\ell(a) \end{vmatrix} = -\frac{2}{\pi a} \neq 0. \quad (5.16)$$

Por lo que se cumple la condición necesaria y suficiente [15] para que la matriz sea invertible. Así, (5.14) se puede expresar de la forma

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_{\ell-1}(a) - \frac{lJ_\ell(a)}{a} & Y_{\ell-1}(a) - \frac{lY_\ell(a)}{a} \\ J_\ell(a) & Y_\ell(a) \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} J_{\ell-1}(a) - \frac{(l-a\alpha)J_\ell(a)}{a} \\ J_\ell(a) \end{pmatrix},$$

que tras un poco de álgebra se reduce a

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{a\pi\alpha J_\ell(a)Y_\ell(a)}{2} \\ \frac{a\pi\alpha J_\ell(a)^2}{2} \end{pmatrix}. \quad (5.17)$$

Antes de seguir vamos a explicar la idea básica del método de las *ondas parciales* (*partial waves*). Para más detalles se puede consultar el *Capítulo 8* de [19]. Debido a la simetría radial que presenta nuestro potencial se cumple

$$[H, \vec{L}] = 0, \quad (5.18)$$

es decir, las funciones de onda se pueden caracterizar de forma simultánea por su valor del momento angular y la energía. Implícitamente esto lo hemos comprobado con nuestro desarrollo al aplicar el método de separación de variables, donde ℓ surge con la parte angular, y nuestra función de onda solución puede ser escrita como

$$\psi_{E,\ell}(r, \theta, t). \quad (5.19)$$

La energía y el momento angular son *buenos números cuánticos*². Esto nos permite proponer como solución a nuestro sistema una superposición de ondas con estos números cuánticos bien definidos (*spherical waves*) y se demuestra que para r suficientemente grande la diferencia de fase entre la onda saliente -tras atravesar el potencial- y la entrante sufre un desplazamiento adicional cuando existe un potencial $V(r)$. Es decir, este *phase shift* causado por el potencial radial es la única modificación que debemos tener en cuenta en el comportamiento asintótico de las funciones de onda con respecto a la situación libre.

En [20] encontramos que para el scattering bidimensional basta con evaluar el cociente B/A ya que

$$\tan \delta_\ell = -B/A. \quad (5.20)$$

Con los coeficientes A y B de (5.17), obtenemos que el potencial singular $V(r) = A\delta(r - r_0)$ crea el siguiente desplazamiento de fase:

$$\tan \delta_\ell = \frac{\pi a \alpha J_\ell(a)^2}{\pi a \alpha J_\ell(a) Y_\ell(a) - 2}. \quad (5.21)$$

De la ecuación anterior destacamos que el denominador puede anularse. Se puede probar que el producto $J_\ell(a)Y_\ell(a)$ está acotado superiormente, por lo que para determinados sistemas físicos éste se anulará. En la *Figura 5.2* no se observan estas divergencias pero sí en la situación física que representa la *Figura 5.3*.

²Formalmente, existen funciones de onda que son autovectores del hamiltoniano y del operador L_z .

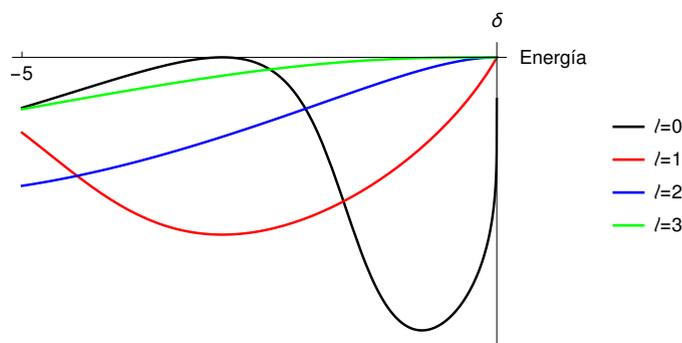


Figura 5.2: Representamos δ_ℓ en un sistema de unidades en el que $\hbar = 1$, además: $m = 1$, $r_0 = 1$, $A = 1$.

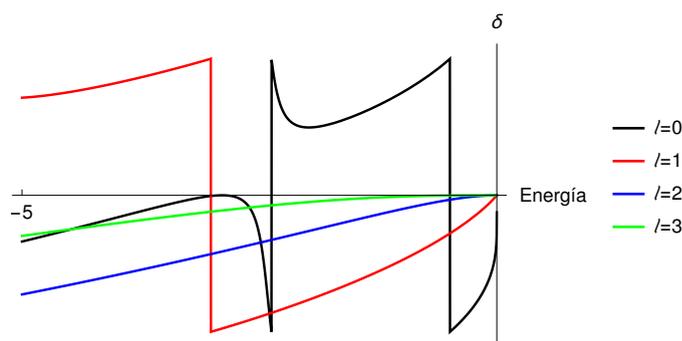


Figura 5.3: Representamos δ_ℓ en un sistema de unidades en el que $\hbar = 1$, además: $m = 1$, $r_0 = 1$, $A = 10$.

5.2. Efecto Casimir

Desde el descubrimiento teórico del efecto Casimir y su posterior comprobación experimental se han desarrollado una enorme cantidad de trabajos teóricos y experimentales [21]. En particular, la referencia [22] muestra cómo la fuerza de Casimir entre dos objetos de forma arbitraria puede ser descrita mediante la teoría de scattering de la mecánica cuántica no relativista, y las referencias [23]-[25] muestran cómo objetos de diversos materiales y propiedades pueden ser descritos con potenciales singulares (o también extensiones autoadjuntas). Es por ello que una de las aplicaciones inmediatas del trabajo desarrollado en esta memoria es el estudio de la fuerza de Casimir entre dos discos representados por potenciales delta como modelo simplificado de la fuerza de van der Waals entre impurezas en láminas de materiales bidimensionales.

Por tanto, una vez realizado el cálculo de la sección anterior, el procedimiento a seguir para realizar un estudio detallado de las fluctuaciones de vacío entre estos dos materiales es el siguiente:

- Para calcular la energía de Casimir entre los dos discos tenemos en cuenta la fórmula $TGTG$ [26]

$$E_C \propto \int d\omega \ln \det(1 - T_A G_0 T_B G_0), \quad (5.22)$$

donde T_A y T_B son los operadores de Lippmann-Schwinger para el disco A y B y G_0 la función de Green.

- Para llevar a cabo esta integral es conveniente usar una base adecuada (ver *Capítulo 10* de [21]), aquí es donde usamos las funciones de onda de scattering calculadas en la *Sección 5.1*.
- Finalmente, para hallar la fuerza de Casimir [21] basta con evaluar la derivada con respecto a la distancia entre los dos objetos de (5.22) ya que

$$F_C = -\frac{dE_C}{da}. \quad (5.23)$$

Como se ha comentado anteriormente, este texto presenta una introducción a la investigación en diversos aspectos y este último, dentro del marco de la teoría cuántica de campos (*QFT*), es uno de los que puede proporcionar resultados más interesantes.

Apéndice A

Propiedades fundamentales de las funciones de Bessel

Para más detalles sobre las funciones de Bessel de las que se dan en este apéndice se pueden consultar tanto [9] como [10].

A.1. Funciones de Bessel

A.1.1. Definiciones

Definición A.1.1 *Funciones de Bessel de primera especie $J_\ell(x)$.*

$$J_\ell(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^\ell \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \Gamma(k + \ell + 1)} \left(\frac{x^2}{4}\right)^k, \quad (\text{A.1})$$

donde $\Gamma(z)$ es la función gamma.

A partir de $J_\ell(x)$ podemos definir la función de Bessel segunda especie.

Definición A.1.2 *Funciones de Bessel de segunda especie. $Y_\ell(x)$.*

$$Y_\ell(x) = \frac{\cos \ell\pi J_\ell(x) - J_{-\ell}(x)}{\sin(\ell\pi)}. \quad (\text{A.2})$$

Nótese que para $\ell \in \mathbb{Z}$ el denominador se anula. En estos casos la función se calcula como el límite tendiendo a tal entero.

A.1.2. Propiedades

- Éstas son dos soluciones linealmente independientes de la ecuación diferencial lineal de segundo orden conocida como ecuación de Bessel

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dy(x)}{dx} + \left(1 - \frac{\ell^2}{x^2}\right) y(x) = 0, \quad (\text{A.3})$$

con $\ell \in \mathbb{R}$.

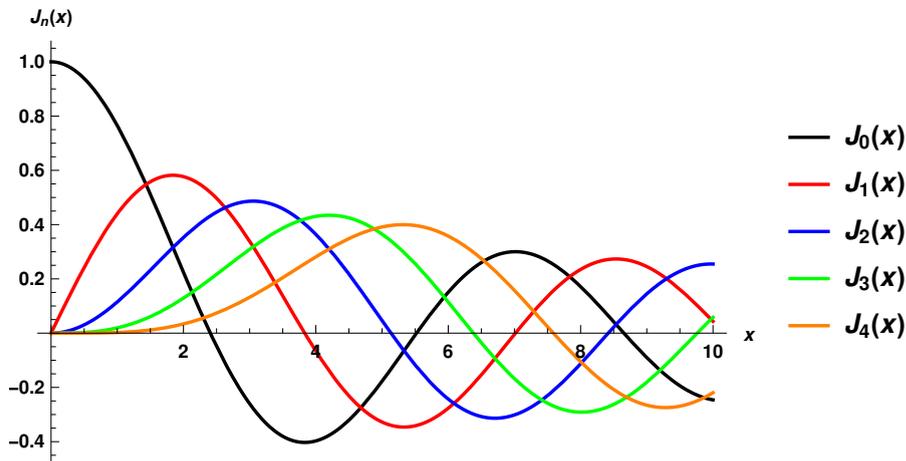


Figura A.1: Funciones de Bessel modificadas de primera especie.

- El comportamiento de $J_\ell(x)$ para distintos índices se muestra en la *Figura A.3*.
- El comportamiento de $Y_\ell(x)$ para distintos índices se muestra en la *Figura A.4*

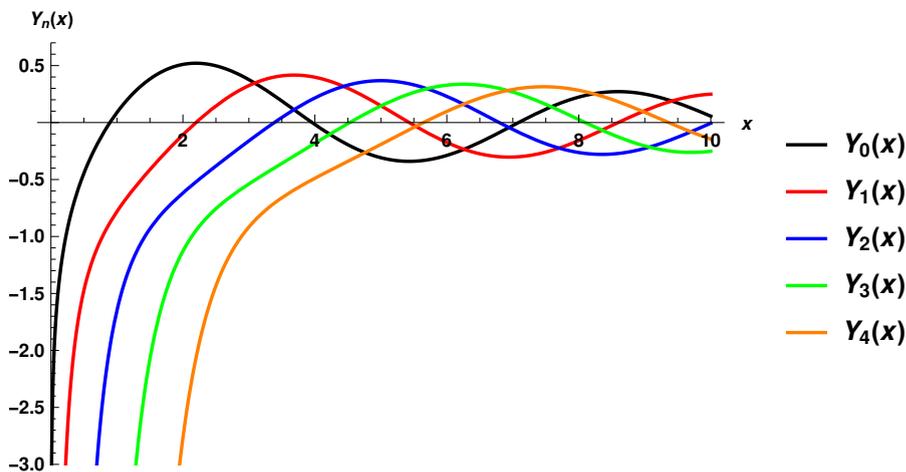


Figura A.2: Funciones de Bessel modificadas de segunda especie.

A.1.3. Relaciones de recurrencia

Las relaciones entre la derivada de las funciones de Bessel y las propias funciones con distinto índice son

$$\frac{dJ_\ell(x)}{dx} = \frac{J_{\ell-1}(x) - J_{\ell+1}(x)}{2}, \quad (\text{A.4})$$

$$\frac{dY_\ell(x)}{dx} = \frac{Y_{\ell-1}(x) - Y_{\ell+1}(x)}{2}. \quad (\text{A.5})$$

Y las de la función con sus dos índices vecinos:

$$J_\ell(x) = \frac{x(J_{\ell-1}(x) + J_{\ell+1}(x))}{2\ell}, \quad (\text{A.6})$$

$$Y_\ell(x) = \frac{x(Y_{\ell+1}(x) + Y_{\ell-1}(x))}{2\ell}. \quad (\text{A.7})$$

A.1.4. Comportamiento asintótico

Para descartar ciertas soluciones por finitud se puede ver en [10] que, para nuestros valores del índice, en el origen:

$$Y_\ell(x) \sim -\frac{2^\ell \Gamma(\ell)}{\pi} x^{-\ell} \quad \ell > 0 \quad (\text{A.8})$$

$$Y_\ell(x) \sim -\frac{2^\ell \cos \ell\pi \Gamma(\ell)}{\pi} x^{-\ell} \quad \ell < 0 \quad (\text{A.9})$$

En la *Sección 10.3.4* de [9] se muestra el comportamiento en el infinito y tanto $J_\ell(x)$ como $Y_\ell(x)$ presentan un carácter oscilante y decrecimiento con $\frac{1}{\sqrt{x}}$.

A.2. Funciones de Bessel modificadas

A.2.1. Definiciones

Definición A.2.1 *Funciones de Bessel modificadas de primera especie $I_\ell(x)$.*

$$I_\ell(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^\ell \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{x^2}{4}\right)^k}{k! \Gamma(k + \ell + 1)}, \quad (\text{A.10})$$

donde $\Gamma(z)$ es la función gamma.

A partir de $I_\ell(x)$ podemos definir la función modificada de Bessel de segunda especie.

Definición A.2.2 *Funciones de Bessel modificadas de segunda especie. $K_\ell(x)$.*

$$K_\ell(x) = \frac{\pi I_{-\ell}(x) - I_\ell(x)}{2 \sin(\ell\pi)}. \quad (\text{A.11})$$

Nótese que para $\ell \in \mathbb{Z}$ el denominador se anula. En estos caso la función se calcula como el límite tendiendo a tal entero.

A.2.2. Propiedades

Enunciamos algunas de las propiedades más relevantes para nuestro estudio de las funciones $I_\ell(x)$ y $K_\ell(x)$.

- Éstas son dos soluciones linealmente independientes de la ecuación diferencial lineal de segundo orden conocida como ecuación modificada de Bessel

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dy(x)}{dx} - \left(1 + \frac{\ell^2}{x^2}\right) y(x) = 0, \quad (\text{A.12})$$

con $\ell \in \mathbb{R}$.

- El comportamiento de $I_\ell(x)$ para distintos índices se muestra en la *Figura A.3*.

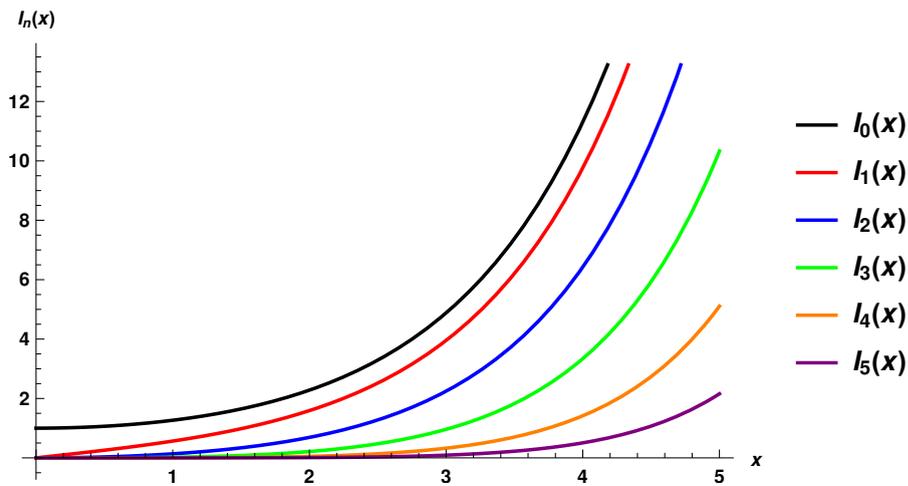


Figura A.3: Funciones de Bessel modificadas de primera especie.

- El comportamiento de $K_\ell(x)$ para distintos índices se muestra en la *Figura A.4*

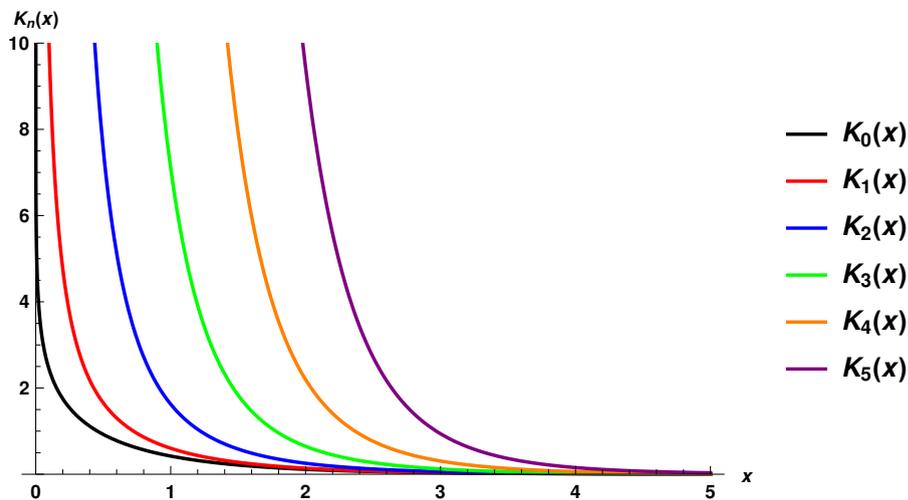


Figura A.4: Funciones de Bessel modificadas de segunda especie.

A.2.3. Relaciones de recurrencia

Las relaciones entre la derivada de las funciones de Bessel modificadas y las propias funciones con distinto índice son

$$\frac{dI_\ell(x)}{dx} = \frac{I_{\ell-1}(x) + I_{\ell+1}(x)}{2}, \quad (\text{A.13})$$

$$\frac{dK_\ell(x)}{dx} = -\frac{K_{\ell-1}(x) + K_{\ell+1}(x)}{2}. \quad (\text{A.14})$$

Y las de la función con sus dos índices vecinos:

$$I_\ell(x) = \frac{x(I_{\ell-1}(x) - I_{\ell+1}(x))}{2\ell}, \quad (\text{A.15})$$

$$K_\ell(x) = \frac{x(K_{\ell+1}(x) - K_{\ell-1}(x))}{2\ell}. \quad (\text{A.16})$$

A.2.4. Comportamiento asintótico

Para calcular el número de estados ligados que aparecen en las distintas configuraciones nos va a ser de gran utilidad el comportamiento asintótico de las funciones modificadas de Bessel en el origen y en el infinito que presentamos a continuación. Para detalles adicionales se puede consultar la *Sección 10.30* de [10].

- $x \rightarrow 0$

$$I_\ell(x) \sim \left(\frac{x}{2}\right)^\ell \frac{1}{\Gamma(\ell+1)} \quad \text{con } \ell \neq -1, -2, -3\dots \quad (\text{A.17})$$

$$K_\ell(x) \sim \frac{\Gamma(\ell)}{2} \left(\frac{x}{2}\right)^{-\ell} \quad \text{con } \ell > 0 \quad (\text{A.18})$$

$$K_0(x) \sim -\ln(x) \quad (\text{A.19})$$

- $x \rightarrow \infty$

$$I_\ell(x) \sim \frac{e^x}{\sqrt{2\pi x}} \quad (\text{A.20})$$

$$K_\ell(x) \sim \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x} \quad (\text{A.21})$$

Nótese que para el comportamiento en el infinito es el mismo para cualquier valor del índice.

Apéndice B

Expresiones para distintos *anillos*

En este apéndice agruparemos todos los resultados para diferentes configuraciones de *anillos* con tal de simplificar la comparación entre los distintos casos y así poder encontrar la relación de recurrencia deseada.

Las expresiones que aparecen son en general bastante extensas por ello conviene usar una notación que elimine ciertas redundancias y economice al máximo el espacio.

NOTACIÓN:

$$\begin{aligned} I_i &:= I_\ell(a_i), & K_i &:= K_\ell(a_i) \\ I_i^+ &:= I_{\ell+1}(a_i), & K_i^+ &:= I_{\ell+1}(a_i) \\ I_i^- &:= I_{\ell-1}(a_i), & K_i^- &:= I_{\ell-1}(a_i) \end{aligned} \tag{B.1}$$

Para no tener que separar los determinantes algunas de las siguientes páginas aparecerán en formato *apaisado*. En primer lugar mostramos los determinantes para situaciones con 1, 2 y 3 *anillos*.

B.1. Determinantes

DETERMINANTE: 1 *anillo*.

$$\begin{vmatrix} I_1 & -K_1 \\ \frac{1}{2}(I_1^- + I_1^+) + \frac{2m\beta A_1}{\hbar^2} I_1 & \frac{1}{2}(K_1^- + K_1^+) \end{vmatrix}. \quad (\text{B.2})$$

DETERMINANTE: 2 *anillos*.

$$\begin{vmatrix} I_1 & -I_1 & -K_1 & 0 \\ \frac{1}{2}(-I_1^- - I_1^+) - \frac{2m\beta A_1 I_1}{\hbar^2} & \frac{1}{2}(I_1^- + I_1^+) & -\frac{1}{2}(K_1^- + K_1^+) & 0 \\ 0 & I_2 & K_2 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}(-I_2^- - I_2^+) & \frac{1}{2}(K_2^- + K_2^+) & \frac{1}{2}(-K_2^- - K_2^+) - \frac{2m\beta A_2 K_2}{\hbar^2} \end{vmatrix}. \quad (\text{B.3})$$

DETERMINANTE: 3 *anillos*.

$$\begin{vmatrix} I_1 & -I_1 & -K_1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}(-I_1^- - I_1^+) - \frac{2m\beta A_1 I_1}{\hbar^2} & \frac{1}{2}(I_1^- + I_1^+) & -\frac{1}{2}(K_1^- + K_1^+) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & I_2 & K_2 & -I_2 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}(-I_2^- - I_2^+) - \frac{2m\beta A_2 I_2}{\hbar^2} & \frac{1}{2}(K_2^- + K_2^+) - \frac{2m\beta A_2 K_2}{\hbar^2} & \frac{1}{2}(I_2^- + I_2^+) & \frac{1}{2}(-K_2^- - K_2^+) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & I_3 & K_3 & -K_3 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(-I_3^- - I_3^+) & \frac{1}{2}(K_3^- + K_3^+) & \frac{1}{2}(-K_3^- - K_3^+) - \frac{2m\beta A_3 K_3}{\hbar^2} \end{vmatrix}. \quad (\text{B.4})$$

B.2. Coeficientes

Agrupamos todos los coeficientes de los polinomios de la ecuación secular. Recordamos la notación usada en el capítulo 3 para éstos

$$P_n(z) = 1 + \sum_{i=1}^n c_{i,n} z^i$$

Para las 4 primeras configuraciones:

$$c_{1,1} = a_1 A_1 I_1 K_1$$

$$c_{1,2} = a_1 A_1 I_1 K_1 + a_2 A_2 I_2 K_2$$

$$c_{1,3} = a_1 A_1 I_1 K_1 + a_2 A_2 I_2 K_2 + a_3 A_3 I_3 K_3$$

$$c_{1,4} = a_1 A_1 I_1 K_1 + a_2 A_2 I_2 K_2 + a_3 A_3 I_3 K_3 + a_4 A_4 I_4 K_4$$

$$c_{2,2} = -a_1 a_2 A_1 A_2 I_1 K_2 (I_1 K_2 - I_2 K_1)$$

$$c_{2,3} = a_1 A_1 I_1^2 (a_2 A_2 K_2^2 + a_3 A_3 K_3^2) - a_1 A_1 I_1 K_1 (a_2 A_2 I_2 K_2 + a_3 A_3 I_3 K_3) + a_2 a_3 A_2 A_3 I_2 K_3 (I_2 K_3 - I_3 K_2)$$

$$c_{2,4} = -a_1 A_1 I_1^2 (a_2 A_2 K_2^2 + a_3 A_3 K_3^2 + a_4 A_4 K_4^2) + a_1 A_1 I_1 K_1 (a_2 A_2 I_2 K_2 + a_3 A_3 I_3 K_3 + a_4 A_4 I_4 K_4) - a_3 a_4 A_3 A_4 I_3 K_4 (I_3 K_4 - I_4 K_3) + a_2 A_2 I_2 K_2 (a_3 A_3 I_3 K_3 + a_4 A_4 I_4 K_4) - a_2 A_2 I_2^2 (a_3 A_3 K_3^2 + a_4 A_4 K_4^2)$$

$$c_{3,3} = a_1 a_2 a_3 A_1 A_2 A_3 I_1 K_3 (I_1 K_2 - I_2 K_1) (I_2 K_3 - I_3 K_2)$$

$$c_{3,4} = a_1 A_1 I_1^2 [-a_4 A_4 I_4 K_4 (a_2 A_2 K_2^2 + a_3 A_3 K_3^2) + a_3 A_3 I_3 K_3 (a_4 A_4 K_4^2 - a_2 A_2 K_2^2) + a_2 A_2 I_2 K_2 (a_3 A_3 K_3^2 + a_4 A_4 K_4^2)] + a_1 A_1 I_1 K_1 [-a_2 A_2 I_2^2 (a_3 A_3 K_3^2 + a_4 A_4 K_4^2) + a_2 A_2 I_2 K_2 (a_3 A_3 I_3 K_3 + a_4 A_4 I_4 K_4) + a_3 a_4 A_3 A_4 I_3 K_4 (I_4 K_3 - I_3 K_4)] + a_2 a_3 a_4 A_2 A_3 A_4 I_2 K_4 (I_2 K_3 - I_3 K_2) (I_3 K_4 - I_4 K_3)$$

$$c_{4,4} = -a_1 a_2 a_3 a_4 A_1 A_2 A_3 A_4 I_1 K_4 (I_1 K_2 - I_2 K_1) (I_2 K_3 - I_3 K_2) (I_3 K_4 - I_4 K_3)$$

Y para las configuraciones con 5 y 6 anillos

$$\begin{aligned}
c_{1,5} &= a_1 A_1 I_1 K_1 + a_2 A_2 I_2 K_2 + a_3 A_3 I_3 K_3 + a_4 A_4 I_4 K_4 + a_5 A_5 I_5 K_5 \\
c_{2,5} &= -a_1 A_1 I_1^2 (a_2 A_2 K_2^2 + a_3 A_3 K_3^2 + a_4 A_4 K_4^2 + a_5 A_5 K_5^2) + a_1 A_1 I_1 K_1 (a_2 A_2 I_2 K_2 + a_3 A_3 I_3 K_3 + a_4 A_4 I_4 K_4 + a_5 A_5 I_5 K_5) - a_5 A_5 K_5^2 (a_3 A_3 I_3^2 + a_4 A_4 I_4^2) + \\
&\quad a_3 a_4 A_3 A_4 I_3 K_4 (I_4 K_3 - I_3 K_4) + a_5 A_5 I_5 K_5 (a_3 A_3 I_3 K_3 + a_4 A_4 I_4 K_4) + a_2 A_2 I_2 K_2 (a_3 A_3 I_3 K_3 + a_4 A_4 I_4 K_4 + a_5 A_5 I_5 K_5) - a_2 A_2 I_2^2 (a_3 A_3 K_3^2 + a_4 A_4 K_4^2 + a_5 A_5 K_5^2) \\
c_{3,5} &= a_1 A_1 I_1^2 (a_4 A_4 I_4 K_4 K_5^2 - a_5 A_5 I_5 K_5 (a_2 A_2 K_2^2 + a_3 A_3 K_3^2 + a_4 A_4 K_4^2) - a_4 A_4 I_4 K_4 (a_2 A_2 K_2^2 + a_3 A_3 K_3^2) + a_3 A_3 I_3 K_3 (-a_2 A_2 K_2^2 + a_4 A_4 K_4^2 + a_5 A_5 K_5^2) \\
&\quad + a_2 A_2 I_2 K_2 (a_3 A_3 K_3^2 + a_4 A_4 K_4^2 + a_5 A_5 K_5^2)) + a_1 A_1 I_1 K_1 (-a_2 A_2 I_2^2 (a_3 A_3 K_3^2 + a_4 A_4 K_4^2 + a_5 A_5 K_5^2) + a_2 A_2 I_2 K_2 (a_3 A_3 I_3 K_3 + a_4 A_4 I_4 K_4 + a_5 A_5 I_5 K_5) \\
&\quad + a_3 A_3 I_3 K_3 (a_4 A_4 I_4 K_4 + a_5 A_5 I_5 K_5) + a_4 a_5 A_4 A_5 I_4 K_5 (I_5 K_4 - I_4 K_5) - a_3 A_3 I_3^2 (a_4 A_4 K_4^2 + a_5 A_5 K_5^2)) + a_3 a_4 a_5 A_3 A_4 A_5 I_3 K_5 (I_3 K_4 - I_4 K_3) (I_4 K_5 - I_5 K_4) \\
&\quad + a_2 A_2 I_2^2 (-a_5 A_5 I_5 K_5 (a_3 A_3 K_3^2 + a_4 A_4 K_4^2) + a_4 A_4 I_4 K_4 (a_5 A_5 K_5^2 - a_3 A_3 K_3^2) + a_3 A_3 I_3 K_3 (a_4 A_4 K_4^2 + a_5 A_5 K_5^2)) + a_2 A_2 I_2 K_2 (-a_3 A_3 I_3^2 (a_4 A_4 K_4^2 + a_5 A_5 K_5^2) \\
&\quad + a_3 A_3 I_3 K_3 (a_4 A_4 I_4 K_4 + a_5 A_5 I_5 K_5) + a_4 a_5 A_4 A_5 I_4 K_5 (I_5 K_4 - I_4 K_5)) \\
c_{1,6} &= a_1 A_1 I_1 K_1 + a_2 A_2 I_2 K_2 + a_3 A_3 I_3 K_3 + a_4 A_4 I_4 K_4 + a_5 A_5 I_5 K_5 + a_6 A_6 I_6 K_6 \\
c_{2,6} &= a_1 A_1 I_1^2 (a_2 A_2 K_2^2 + a_3 A_3 K_3^2 + a_4 A_4 K_4^2 + a_5 A_5 K_5^2 + a_6 A_6 K_6^2) - a_1 A_1 I_1 K_1 (a_2 A_2 I_2 K_2 + a_3 A_3 I_3 K_3 + a_4 A_4 I_4 K_4 + a_5 A_5 I_5 K_5 + a_6 A_6 I_6 K_6) + a_5 a_6 A_5 A_6 I_5^2 K_6^2 \\
&\quad - a_5 a_6 A_5 A_6 I_6 K_5 K_6 - a_4 A_4 I_4 K_4 (a_5 A_5 I_5 K_5 + a_6 A_6 I_6 K_6) - a_3 A_3 I_3 K_3 (a_4 A_4 I_4 K_4 + a_5 A_5 I_5 K_5 + a_6 A_6 I_6 K_6) \\
&\quad - a_2 A_2 I_2 K_2 (a_3 A_3 I_3 K_3 + a_4 A_4 I_4 K_4 + a_5 A_5 I_5 K_5 + a_6 A_6 I_6 K_6) \\
&\quad + a_4 A_4 I_4^2 (a_5 A_5 K_5^2 + a_6 A_6 K_6^2) + a_3 A_3 I_3^2 (a_4 A_4 K_4^2 + a_5 A_5 K_5^2 + a_6 A_6 K_6^2) + a_2 A_2 I_2^2 (a_3 A_3 K_3^2 + a_4 A_4 K_4^2 + a_5 A_5 K_5^2 + a_6 A_6 K_6^2) \\
c_{6,6} &= A_1 A_2 A_3 A_4 A_5 A_6 I_1 K_6 (I_1 K_2 - I_2 K_1) (I_2 K_3 - I_3 K_2) (I_3 K_4 - I_4 K_3) (I_4 K_5 - I_5 K_4) (I_5 K_6 - I_6 K_5)
\end{aligned}$$

Apéndice C

Resultados útiles

C.1. General.

Proposición C.1.1 Sea $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$. Entonces las dos funciones de variable real

$$\{e^{\lambda x}, e^{-\lambda x}\}$$

son linealmente independientes.

Demostración Dada la definición de independencia lineal planteamos la siguiente combinación lineal igualada a cero

$$\mu_1 e^{\lambda x} + \mu_2 e^{-\lambda x} = 0. \quad (\text{C.1})$$

Si multiplicamos a ambos miembros por $e^{\lambda x}$

$$\mu_1 e^{2\lambda x} + \mu_2 = 0, \quad (\text{C.2})$$

y seguidamente derivamos con respecto a x

$$2\lambda \mu_1 e^{2\lambda x} = 0. \quad (\text{C.3})$$

Debido a las propiedades de la exponencial y que $\lambda \neq 0$, necesariamente se debe cumplir

$$\mu_1 = 0, \quad (\text{C.4})$$

y llevándolo a (C.2) concluimos

$$\mu_1 = \mu_2 = 0. \quad (\text{C.5})$$

Así, la independencia lineal queda probada.

Teorema C.1.2 Teorema de la media.

Sean $f, g : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ con f continua, g integrable tal que $g(x) \geq 0 \quad \forall x \in [a, b]$. Entonces existe $c \in [a, b]$ con

$$\int_a^b dx f(x) g(x) = f(c) \int_a^b dx g(x). \quad (\text{C.6})$$

Corolario C.1.3 *Sea f una función continua, entonces:*

$$\lim_{a \rightarrow b} \int_a^b dx f(x) = 0. \quad (\text{C.7})$$

Demostración Vamos a aplicar el *Teorema C.1.2*. En este caso $g(x) = 1 \geq 0$, por consiguiente

$$\int_a^b dx f(x) = f(c) \int_a^b dx = f(c)(b - a). \quad (\text{C.8})$$

Si evaluamos el límite

$$\lim_{a \rightarrow b} \int_a^b dx f(x) = \lim_{a \rightarrow b} f(c)(b - a) = 0. \quad (\text{C.9})$$

C.2. Distribuciones.

Esta proposición puede ser ilustrativa para ver cómo la teoría de distribuciones nos permite generalizar el concepto de derivada y evitar problemas de definición de funciones.

Proposición C.2.1 *Sea $f(x)$ una función que presenta una discontinuidad de salto finito en x_0*

$$f(x) = \begin{cases} f_1(x) & \text{si } x \leq x_0 \\ f_2(x) & \text{si } x > x_0 \end{cases} \quad (\text{C.10})$$

La derivada, en el sentido de las distribuciones, es

$$f'(x) = [f_2(x_0) - f_1(x_0)]\delta(x - x_0) + f_1'(x)H(-x + x_0) + f_2'(x)H(x - x_0)$$

siendo $H(x)$ la función de Heaviside definida como

$$H(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \geq 0, \\ 0 & \text{si } x < 0. \end{cases} \quad (\text{C.11})$$

Demostración En primer lugar veamos que esta función no admite derivada en el punto x_0 en el sentido usual.

$$\lim_{h \rightarrow 0^-} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = \lim_{h \rightarrow 0^-} \frac{f_1(x_0 + h) - f_1(x_0)}{h} = \frac{df_1}{dx}(x_0^-) \quad (\text{C.12})$$

Pero al evaluar la derivada por la derecha

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{f_2(x_0) - f_1(x_0)}{h}, \quad (\text{C.13})$$

ésta diverge ya que $f_2(x_0) - f_1(x_0)$ es el salto que presenta la función en ese punto, finito y distinto de cero. Por tanto al no coincidir ambos límites laterales la derivada no existe.

En el sentido de las distribuciones esta derivada sí existe y para demostrarlo tenemos en cuenta el siguiente resultado

$$\frac{dH(x - x_0)}{dx} = \delta(x - x_0). \quad (\text{C.14})$$

Si expresamos $f(x)$ como¹

$$f(x) = f_1(x)H(-(x - x_0)) + f_2(x)H(x - x_0) \quad (\text{C.15})$$

Si ahora derivamos y tenemos en cuenta que $g(x)\delta(x - x_0) = g(x_0)\delta(x - x_0)$:

$$\begin{aligned} f'(x) &= f_1'(x)H(-x + x_0) + f_1(x)H'(-x + x_0) + f_2'(x)H(x - x_0) + f_2(x)H'(x - x_0) \\ &= [f_2(x_0) - f_1(x_0)]\delta(x - x_0) + f_1'(x)H(-x + x_0) + f_2'(x)H(x - x_0). \end{aligned}$$

¹Esta función coincide con la función de partida salvo en un punto, x_0 . La diferencia entre ambas es un conjunto de medida nula por lo que son formalmente idénticas.

Bibliografía

- [1] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009)
- [2] J. Cayssol, *Comptes Rendus Physique* **14** (2013) 760
- [3] E. Witten, *Riv. Nuovo Cim.* **39** (2016) no.7, 1
- [4] H. B. G. Casimir, *Indag. Math.* **10** (1948) 261
- [5] M. Gadella, J. Mateos-Guilarte, J. M. Muñoz-Castaneda and L. M. Nieto, *J. Phys. A* **49** (2016) no.1, 015204
- [6] M. Gadella, J. Negro and L.M. Nieto. *Phys. Lett. A* **373**, 1310-1313 (2009).
- [7] J.J Álvarez-Sánchez, M. Gadella, F.J.H. Heras, and L.M. Nieto. *Phys. Lett. A* **373**, 4022-4027 (2009)
- [8] M. Gadella, F.J.H Heras, J. Negro and L.M. Nieto. *J. Phys. A: Math. Theor.* **42**, 465207 (11pp) (2009)
- [9] M. Gadella and L.M. Nieto. *Métodos matemáticos avanzados para ciencias e ingenierías*. Universidad de Valladolid: Secretariado de publicaciones (2000)
- [10] F. W. J. Olver, et al. *NIST Handbook of Mathematical Functions*. Cambridge University Press (2010)
- [11] R. Eisberg and R. Resnick *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles*. John Wiley & Sons Inc; Edition: Revised, 1985. 155-156.
- [12] F. Galindo Soto. *Guía práctica de cálculo infinitesimal en una variable real*. Ediciones Paraninfo (2003)
- [13] S. W. Hawking, *Commun. Math. Phys.* **43** (1975) 199
- [14] R.M. Wald. *Quantum Field Theory in Curved Spacetime and Black Hole Thermodynamics*. The University of Chicago Press, 1994.
- [15] J. M. Aroca Hernández-Ros, M.J. Fernández Bermejo. *Álgebra lineal y Geometría*. Universidad de Valladolid: Secretariado de publicaciones (1988)
- [16] Greiner, W. *Relativistic Quantum Mechanics. Wave Equations*. Springer (2000)

- [17] F. Galindo Soto. *Guía práctica de cálculo infinitesimal en varias variables*. Ediciones Paraninfo (2003)
- [18] D. J. Fernandez C, M. Gadella and L. M. Nieto, SIGMA **7** (2011) 029
- [19] C. Cohen-Tannoudji. *Quantum Mechanics*. Wiley-VCH, 1977.
- [20] I. R. Lapidus, Am. J. Phys. **50** (1982) 45. doi:10.1119/1.13004
- [21] M. Bordag, G. L. Klimchitskaya, U. Mohideen and V. M. Mostepanenko, Int. Ser. Monogr. Phys. **145** (2009) 1.
- [22] O. Kenneth and I. Klich, Phys. Rev. B **78** (2008) 014103
- [23] M. Bordag and J. M. Muñoz-Castañeda, Phys. Rev. D **91** (2015) no.6, 065027.
- [24] J. M. Muñoz-Castañeda and J. Mateos Guilarte, Phys. Rev. D **91** (2015) no.2, 025028
- [25] J. M. Muñoz-Castaneda, J. Mateos Guilarte and A. M. Mosquera, Phys. Rev. D **87** (2013) no.10, 105020
- [26] I. Klich¹ and O. Kenneth. Journal of Physics Conference Series 161 (2009) 012020.