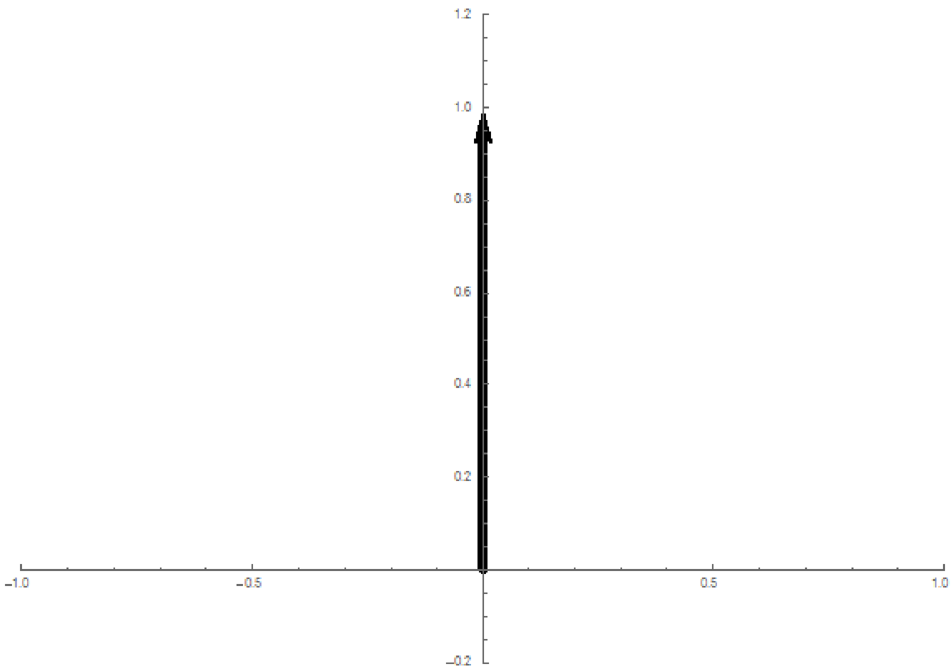
Universidad de Valladolid
Facultad de Ciencias

Trabajo de fin de grado

Grado en Física

Potenciales singulares dependientes del tiempo



Autor: Eduardo Mateos González

Tutor: Luis Miguel Nieto Calzada

Agradecimientos

Quiero agradecer a todos los profesores que he tenido durante el Grado su dedicada labor, y a mi familia y a mis compañeros de clase por su apoyo durante estos cuatro años

En especial me gustaría darles las gracias a José Luis Pura Ruiz, por sus ideas y consejos, a Mariano Santander Navarro, Manuel Gadella Urquiza y Javier Negro Vadillo, por su inestimable ayuda y paciencia, y a Jesús Cítores Ávila y Carlos Alonso Viñas por revisar el trabajo y señalarme las erratas

Este TFG se ha elaborado bajo la supervisión de Luis Miguel Nieto Calzada, director del Departamento de Física Teórica, Atómica y Óptica, que me propuso en 2015 el tema de estudio sobre el que se ha centrado el trabajo. En particular he podido desarrollar la mayoría del estudio del problema gracias al programa *Residencias Estivales* del Parque Científico de la UVa, en el que participé en la edición de 2016, y en especial a la Beca de colaboración del Consejo Social de la UVa, concedida para proseguir la investigación de este potencial durante el curso 2016-2017, y que me he permitido dedicar numerosas horas a este trabajo

Abstract

The goal of this work is to find the general solution of the Schrödinger's equation for a time-dependent potential, and to study both the scattering states and the behaviour of the bound states. We chose the time-dependent Dirac's delta potential because its stationary analogue only bounds one state

En este trabajo se intenta encontrar la solución general a la ecuación de Schrödinger para un potencial que depende explícitamente del tiempo, calculando tanto los estados de *scattering* como el comportamiento de los estados ligados. Se escoge la delta de Dirac por simplificar el problema, ya que tiene un único estado ligado

Índice general

Índice de figuras

Capítulo 1

Planteamiento del problema

1.1. Objetivo del trabajo

El objetivo central de este TFG consiste en encontrar, de manera analítica, una solución exacta para la ecuación de Schrödinger con un potencial que depende del tiempo. El potencial elegido para estudiar los posibles métodos de resolución de estos potenciales fue, esperando facilitar el problema, una delta de Dirac ponderada por una función dependiente del tiempo, $a(t)$, de modo que el potencial para el que vamos a intentar resolver la ecuación de Schrödinger será $V(x,t) = a(t)\delta(x)$

La razón de estudiar un potencial singular de este tipo proviene de que su análogo estacionario (cuando el potencial es una constante negativa, $a(t) = \lambda < 0$) se caracteriza por ligar siempre un único estado, al contrario que muchos otros potenciales sencillos en los que el número de estados ligados depende de la magnitud del potencial u otros que ligan un número infinito de ellos, lo que complicaría el estudio cuando la función $a(t)$ cruce uno de dichos valores en el primer caso y nos obligaría a calcular las interacciones entre varios estados estacionarios en el segundo

El problema no puede ser resuelto con las mismas técnicas utilizadas en el caso del potencial estacionario debido a diversas dificultades que surgen al tener un potencial dependiente del tiempo. La mayoría de estas dificultades aparecen porque la energía no es una constante del movimiento para nuestro Hamiltoniano, definido por $H = -\hbar^2/2m\partial^2/\partial x^2 + V(x,t)$, ya que $\partial H/\partial t \neq 0$

El potencial que estamos considerando, $V(x,t) = a(t)\delta(x)$ depende de dos variables, la x y la t, aunque su dependencia en la variable espacial es especialmente relevante ya que se da a través de un potencial singular, la delta de Dirac. La delta pertenece a lo que se conoce como 'funciones generalizadas', que no son funciones estrictamente hablando sino distribuciones, que tienen propiedades ligeramente distintas. Se puede pensar en la delta como el límite de una serie de funciones, por ejemplo un rectángulo que cada vez se hace más estrecho y más alto o una función gaussiana que también se estrecha hasta convertirse en puntual, pero que en el límite tiene un valor infinito en el punto $x = 0$. Físicamente, la delta de Dirac es solo una idealización que no tiene contraparte realista en el universo, pero en ciertos problemas (cuando las dimensiones del objeto a considerar son mucho menores que el resto de las dimensiones del problema) puede ser una buena aproximación

La ecuación que vamos a resolver por tanto es la de Schrödinger sobre el espacio de las distribuciones. Debido a esto no podremos imponer[1] que la función solución sea de clase $\mathcal{C}^\infty$,

[1] Si el potencial tiene discontinuidades finitas, la derivada segunda también las tendrá, mientras que si estas son infinitas aparecerá una discontinuidad en la derivada primera [8, pág.68]. Se puede encontrar un estudio

como se suele esperar al trabajar sobre un espacio funciones, sino que debido a que la derivada segunda respecto a x o la primera respecto al tiempo deben ser también distribuciones para poder verificar la ecuación diferencial, lo máximo que podremos imponer es que la solución sea $\mathcal{C}^0$, es decir, continua. En particular para nuestra distribución (la delta) se obtiene por integración de la ecuación diferencial respecto de x una condición adicional, un salto finito en la primera derivada en $x = 0$, cuya magnitud viene determinada por el coeficiente que acompaña a la delta

La ecuación diferencial para la que queremos encontrar una solución general es la siguiente

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + a(t)\delta(x)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \tag{1.1}$$

Observemos que esta ecuación no es de variables separadas en todo el espacio, por lo que su resolución aplicando las técnicas usadas para el caso independiente del tiempo no es inmediata

1.2. Adimensionalización del problema

Podemos eliminar las constantes físicas mediante un cambio de variable adecuado, dejando la ecuación a resolver adimensional

Planteamos dos nuevas variables, X y T, relacionadas con las antiguas mediante las fórmulas $x = \alpha X$, $t = \beta T$, con $\alpha, \beta \in \mathbb{R}^+$

Sustituyendo estas variables en la ecuación (1.1) y teniendo en cuenta que $\frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{\alpha}\frac{\partial}{\partial X}$, $\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha^2}\frac{\partial^2}{\partial X^2}$ y $\frac{\partial}{\partial t} = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial T}$, la ecuación diferencial se convierte en

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\alpha^2}\frac{\partial^2\Psi(\alpha X,\beta T)}{\partial X^2} + a(\beta T)\delta(\alpha X)\Psi(\alpha X,\beta T) = i\hbar\frac{1}{\beta}\frac{\partial\Psi(\alpha X,\beta T)}{\partial T} \tag{1.2}$$

Ahora vamos a cambiar la función incógnita, definiendo la nueva como $\Phi(X,T) = \Psi(\alpha X, \beta T)$, y escribiendo también $A(T) = a(\beta T)$

Usando entones la propiedad de la delta que nos dice que $\delta(\alpha X) = \frac{1}{|\alpha|}\delta(X)$ y despejando, obtenemos

$$-\frac{\hbar\beta}{2m\alpha^2}\frac{\partial^2\Phi(X,T)}{\partial X^2} + A(T)\frac{\beta}{\hbar|\alpha|}\delta(X)\Phi(X,T) = i\frac{\partial\Phi(X,T)}{\partial T} \tag{1.3}$$

Igualando las constantes α y β a 1 (y teniendo en cuenta que por ser $\alpha \in \mathbb{R}^+$, $|\alpha| = \alpha$) llegamos a la ecuación adimensional

$$\boxed{-\frac{\partial^2\Phi(X,T)}{\partial X^2} + A(T)\delta(X)\Phi(X,T) = i\frac{\partial\Phi(X,T)}{\partial T}} \tag{1.4}$$

y las condiciones sobre α y β son

$$\alpha = \frac{\hbar^2}{2m} \qquad \beta = \frac{\hbar^3}{2m} \tag{1.5}$$

más detallado de los potenciales singulares en [10, pág.130]

En muchos casos nos será más cómodo trabajar con esta ecuación en vez de con la original, y nos referiremos a ella varias veces a lo largo del texto , especialmente en la parte II

Podemos estudiar en particular el caso estacionario, es decir, si $a(t) = \lambda$ es constante (y, por lo tanto, $A(T) = \lambda$ también lo es). En esta situación, si queremos hacer que λ no intervenga explícitamente en la ecuación podríamos reescribir las constantes como

$$\alpha = \frac{\hbar^2}{2m\lambda} \qquad \beta = \frac{\hbar^3}{2m\lambda^2} \tag{1.6}$$

y la ecuación diferencial quedaría de la siguiente forma

$$-\frac{\partial^2\Phi(X,T)}{\partial X^2} + \delta(X)\Phi(X,T) = i\frac{\partial\Phi(X,T)}{\partial T} \tag{1.7}$$

Además, en este caso la ecuación diferencial es separable y podemos operar con la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \lambda\delta(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{1.8}$$

Como ahora no nos interviene la variable t, solo necesitaremos la constante α, definida de nuevo como $x = \alpha X$. Llamando a la nueva función $\phi(X) = \psi(\alpha X)$, la ecuación adimensional independiente del tiempo será

$$-\frac{\hbar^2}{2m\alpha^2}\frac{d^2\phi(X)}{dX^2} + \frac{\lambda}{|\alpha|}\delta(X)\phi(X) = E\phi(X) \tag{1.9}$$

Si despejamos el coeficiente que acompaña a la derivada segunda dividiendo ambos lados de la ecuación por $\hbar^2/2m\alpha^2$, tendremos

$$-\frac{d^2\phi(X)}{dX^2} + \frac{2m|\alpha|}{\hbar^2}\lambda\delta(X)\phi(X) = \frac{2mE\alpha^2}{\hbar^2}\phi(X) \tag{1.10}$$

Normalizamos ahora el coeficiente que acompaña a la delta, para lo cual hacemos

$$\alpha = \frac{\hbar^2}{2m} \tag{1.11}$$

igual que habíamos elegido para el caso anterior. La ecuación que resulta ahora es

$$\boxed{-\frac{d^2\phi(X)}{dX^2} + \lambda\delta(X)\phi(X) = \epsilon\phi(X)} \tag{1.12}$$

con

$$\epsilon = \frac{\hbar^2}{2m}E \tag{1.13}$$

También podemos escoger de nuevo incluir la altura del potencial delta, λ, dentro de la constante de adimensionalización, para lo cual elegiríamos para α el valor

$$\alpha = \frac{\hbar^2}{2m\lambda} \tag{1.14}$$

En este caso se modifica también la expresión de la nueva energía adimensional, ϵ, que ahora pasa a ser

$$\epsilon = \frac{\hbar^2}{2m\lambda^2}E \tag{1.15}$$

La expresión de la ecuación estacionaria adimensional en la que no aparece explícitamente el coeficiente λ será entonces

$$-\frac{d^2\phi(X)}{dX^2} + \delta(X)\phi(X) = \epsilon\phi(X) \tag{1.16}$$

donde la contribución de la fuerza de la delta va enmascarada dentro de ϵ (es decir, la escala de energías que consideremos vendrá dada por la magnitud del potencial)

Capítulo 2

Búsqueda de soluciones ligadas usando el método de variación de las constantes

Vamos a centrarnos por ahora en el caso en el que nuestro potencial consiste en una delta negativa (ya que solo cuando el potencial es negativo tiene estados ligados, y además sabemos que solo existe para un único valor de la energía[1]), y como condición inicial supondremos que hay una partícula ligada en el potencial

Debido a que la solución del problema dependiente del tiempo debe conducir a la solución encontrada para la delta independiente del tiempo cuando la función $a(t)$ sea constante o varíe muy, muy lentamente con el tiempo (lo que se conoce como solución adiabática), es razonable pensar que puede que la introducción de una dependencia temporal en alguna de las constantes que aparecen en la solución estacionaria puede conducir a la solución de nuestro problema, ya que en el caso independiente del tiempo esta solución llevaría directamente al resultado ya conocido, y en el caso adiabático daría una solución muy parecida a este

Aunque incluso en el caso de que la función que planteemos resulte ser solución de la ecuación difererencial, esta puede ser únicamente una solución parcial el problema y no la solución total del mismo. Sin embargo, el conocimiento de una solución particular sería suficiente para resolverlo completamente ya que mediante una *transformada de Fourier* en la variable x podemos convertir la ecuación diferencial en derivadas parciales de nuestro problema en una ecuación diferencial lineal inhomogénea en la variable t, cuya solución general se obtiene inmediatamente a partir de la solución de la función homogénea asociada[2] (que es trivial de resolver). Por lo tanto, si pudiéramos encontrar una solución cualquiera que satisficiera nuestra ecuación diferencial habríamos resuelto completamente el problema

Veamos sin embargo que las soluciones 'intuitivas' propuestas añadiendo simplemente una dependencia en x o en t a alguna de las constantes no son capaces de verificar la ecuación diferencial excepto en el caso trivial en el que $a(t) = \lambda =$ cte, que recupera la solución estacionaria

La solución completa en el caso estacionario es la función de onda

$$\Psi(x,t) = Ae^{-k|x|}e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \tag{2.1}$$

que depende de tres constantes: A, k y E. Estas son las constantes que tenemos disponibles

[1] En la sección 3.6 se demostrará que este estado es único, y se llegará a la relación (3.56), equivalente a (2.2)

[2] Este resultado se obtendrá más adelante en la sección 7

para aplicar el método de variación de las constantes, aunque no son independientes ya que existen relaciones funcionales entre ellas que deberemos calcular a partir de las condiciones del problema y aplicar correctamente. $\hbar$ es en cambio una constante física, y por tanto no puede cambiar de valor (escribiremos después de los resultados importantes su análogo adimensional obtenido utilizando los resultados de la sección 1.2). La relación entre las tres constantes en un problema independiente del tiempo es, como veremos en el capítulo 3, $A = \sqrt{k}$ y $k^2 = -2mE/\hbar^2$

Estas constantes quedan fijadas en función del valor de λ a partir de la relación

$$k = -\frac{m\lambda}{\hbar^2} \tag{2.2}$$

que, como hemos dicho, es el único valor aceptable para el estado ligado

Si trabajamos con la ecuación diferencial adimensional tendremos que la función de onda es

$$\Psi(X,T) = Ae^{-k|X|}e^{-i\epsilon T} \tag{2.3}$$

siendo la relación entre k y ϵ $k^2 = -\epsilon$, y la relación con λ es

$$k = -2\lambda = 2|\lambda| \tag{2.4}$$

por lo que podemos escribir Ψ como

$$\Psi(X,T) = \sqrt{2\lambda}e^{2\lambda|X|}e^{i4\lambda^2 T} \tag{2.5}$$

2.1. Amplitud global dependiente del tiempo

La modificación más pequeña que se puede hacer a la ecuación original (y que muchas veces da la solución correcta en otros problemas similares), es suponer que la amplitud depende explícitamente del tiempo, $A = A(t)$

Si sustituimos esta función de onda modificada en la ecuación diferencial podemos escribir

$$-\frac{\hbar^2}{2m}A(t)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\frac{\partial^2 e^{-k|x|}}{\partial x^2} + a(t)\delta(x)A(t)e^{-k|x|}e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = i\hbar e^{-k|x|}\frac{\partial A(t)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}{\partial t} \tag{2.6}$$

Calculando ahora las derivadas que aparecen en esta ecuación obtenemos

$$\frac{\partial^2 e^{-k|x|}}{\partial x^2} = e^{-k|x|}[k^2(2H(x)-1)^2 - 2k\delta(x)] = e^{-k|x|}[k^2 - 2k\delta(x)] \tag{2.7}$$

$$\frac{\partial A(t)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}{\partial t} = -i\frac{E}{\hbar}A(t)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} + A'(t)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \tag{2.8}$$

donde $H(x)$ es la función de Heaviside, definida de la siguiente forma

$$H(x) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad x < 0 \\ 1 & \text{si} \quad x > 0 \end{cases} \tag{2.9}$$

Por lo tanto, sustituyendo (2.7) y (2.8) en la ecuación (2.6) tenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi(x,t)[k^2-2k\delta(x)]+a(t)\delta(x)\Psi(x,t)=E\Psi(x,t)+i\frac{\dot{A}(t)}{A(t)}\Psi(x,t) \tag{2.10}$$

Los factores que van multiplicando las deltas se deben cancelar entre sí porque ningún otro término puede compensar una delta (ya que esta se hace infinita en un punto). Por lo tanto necesitamos que

$$\frac{\hbar^2}{2m}2k=-a(t) \tag{2.11}$$

Pero ya que k hemos supuesto que es independiente de t, esta ecuación solo se puede cumplir en el caso en el que $a(t)$ tampoco dependa del tiempo, ($a(t)=\lambda$) en cuyo caso tendremos

$$k=-\frac{m\lambda}{\hbar^2} \tag{2.12}$$

y recuperamos la solución que teníamos para el caso independiente del tiempo, dada en la ecuación (2.2)

Entonces analizando la ecuación (2.10) debemos obligar también a que $\dot{A}(t)=0$, ya que no tenemos ninguna otra función dependiente del tiempo con la que compensarla, y por tanto A es una constante y concluimos que esta solución propuesta no es válida para ninguna función $a(t)$ que varíe con el tiempo

Podemos también obtener un argumento físico que nos permite racionalizar que no exista una solución de esta forma. La conclusión se deriva de dos factores: que el autoestado debe estar normalizado para todo instante t y que solo existe un único autoestado ligado. En otros problemas es válido proponer una solución de este tipo, como se comentaba, porque debido a que en general tenemos varios autoestados y que la solución general del problema es una combinación lineal de estos, una dependencia temporal en cada coeficiente cambia el peso que tiene cada autoestado en el resultado final para cada instante de tiempo t, dando soluciones oscilantes que pueden ser válidas para muchos potenciales dependientes del tiempo. En nuestro caso en cambio solo tenemos una única función, así que en el resultado final solo aparecerá representada ella sin importar el valor de la función peso que le apliquemos (el término $A(t)$ se puede considerar una función peso). Además, debido a la condición de normalización la integral de la función de onda debe ser igual a 1 en todo instante de tiempo, y como la integral del resto de la función de onda es igual a $1/\sqrt{k}$ independientemente del valor de t, entonces necesariamente $|A(t)|=\sqrt{k}$, ya que cualquier otro valor daría un módulo distinto de 1 para la función completa

Que $|A(t)|=\sqrt{k}$ implica $A(t)=\sqrt{k}e^{i\theta t}$, donde θ es un factor de fase. Un factor de fase global en una función de onda cuántica no tiene significado físico y se puede eliminar, por lo que la solución que habíamos porpuesto es físicamente equivalente a la estacionaria, y por lo tanto es imposible que verifique la ecuación de Schrödinger en los casos en los que esta no lo hace (en particular no son válidas para ningún $a(t)$ distinto del estacionario). Esto justifica que al sustituir la nueva función de onda en la ecuación de Schrödinger esta solo se pueda cumplir en el caso estacionario

2.2. Número de ondas variable en el tiempo. Solución instantánea

En este caso, a mayores de permitir que $A(t)$ dependa del tiempo vamos a tomar también $k = k(t)$. Para que la función de onda siga normalizada en todo instante se puede comprobar que es necesario que siga existiendo una relación entre A y k de modo que $A(t) = \sqrt{A(t)}$, de modo que la solución que vamos a proponer será

$$\Psi(x,t) = \sqrt{k(t)}e^{-k(t)|x|}e^{-i\frac{E(t)}{\hbar}t} \tag{2.13}$$

donde la energía vamos a suponer que también depende del tiempo (aunque no asumiremos de momento que su relación con k sea $E = \hbar^2 k^2/2m$). Además supondremos que $E = E^*$, para que siga pudiendo ser autovalor de un observable (ya que los autovalores de los observables deben ser números reales[3]

Esta modificación equivale a proponer una 'solución instantánea' de la solución original, es decir, cambiar el valor constante de a que teníamos en el caso estacionario por la nueva función $a(t)$ del problema en todas las relaciones en las que intervenía esta. El significado físico de esta solución sería que la función de onda iría variando como si en cada instante se pudiera resolver la ecuación independiente del tiempo y obtuviéramos una solución que dependiera únicamente del valor de $a(t)$ en ese instante, sin importar el estado anterior del sistema ni la manera en la que evoluciona $a(t)$

Como $k(t)$ nos da la anchura del pico de la función ligada, el resultado tendrá una anchura distinta en cada instante de tiempo, pero mantendrá la misma forma. En las figuras 2.1 y 2.2 se ven ejemplos

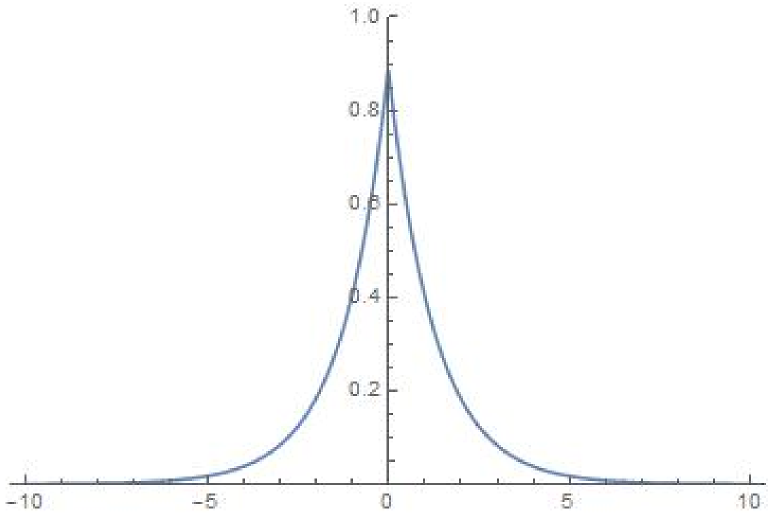


Figura 2.1: Menor energía

Igual que hacíamos en la sección 2.1, vamos a sustituir la función que hemos propuesto como solución en la ecuación de Schrödinger con un cierto potencial $a(t)$, y vamos a ver en qué casos se cumple. La ecuación diferencial en este caso es

[3]Este resultado está asociado a que los observables deben ser operadores hermíticos por definición[8, pág. 215]

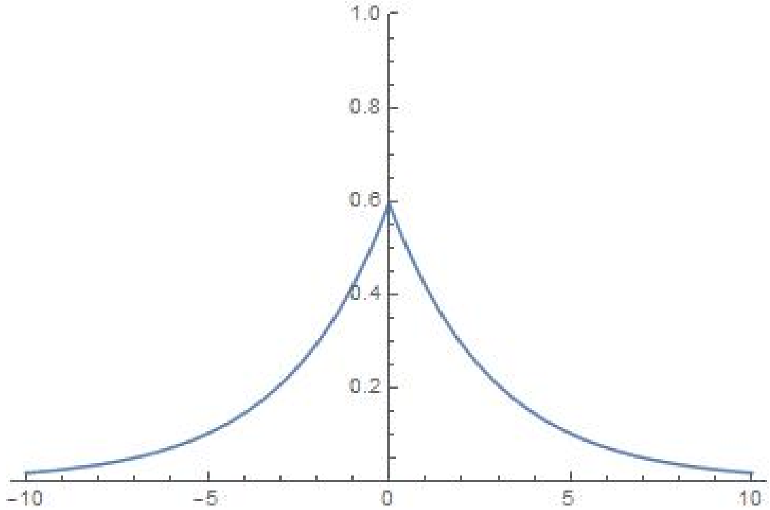


Figura 2.2: Mayor energía

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{k(t)}e^{-i\frac{E(t)}{\hbar}t}\frac{\partial^2 e^{-k(t)|x|}}{\partial x^2}+a(t)\delta(x)\sqrt{k(t)}e^{-k(t)|x|}e^{-i\frac{E(t)}{\hbar}t}=i\hbar\frac{\partial\left(\sqrt{k(t)}e^{-k(t)|x|}e^{-i\frac{k^2\hbar}{2m}t}\right)}{\partial t} \tag{2.14}$$

Usando la derivada de la exponencial del valor absoluto obtenida en (2.7) y simplificando el factor $\Psi(x,t)$ que acompaña todos los términos podemos desarrollar la expresión anterior como

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[k(t)^2-2k(t)\delta(x)]+a(t)\delta(x)=i\hbar\left[\frac{\dot{k}(t)}{2k(t)}-\dot{k}(t)|x|-i\frac{\hbar k(t)\dot{k}(t)}{m}t-i\frac{k(t)^2\hbar}{2m}\right] \tag{2.15}$$

Para que las deltas se compensen necesitamos que

$$k(t)=-\frac{ma(t)}{\hbar^2}\longrightarrow\dot{k}(t)=-\frac{m\dot{a}(t)}{\hbar^2} \tag{2.16}$$

que es una condición semejante a la estacionaria simplemente incluyendo la dependencia temporal de k y a, como era de esperar para una solución instantánea

Sin embargo vemos que en la ecuación (2.15) tenemos un término proporcional a $|x|$, y ninguno de los otros factores depende explícitamente de x, con lo que la única manera de cancelar esta ecuación para cualquier valor de x es tomar $\dot{k}(t)=0$. Esto nos devuelve una vez más al caso estacionario, por lo que esta solución tampoco nos sirve para ninguna función $a(t)$

2.3. Función alternativa al valor absoluto de x

Vamos a probar ahora una solución que no se obtiene a partir de la ecuación estacionaria simplemente variando las constantes, sino que vamos a modificar una función preexistente de x (el valor absoluto) para intentar llegar a un resultado correcto

La razón de modificar esta función de x es intentar solucionar el problema que encontrábamos en la sección anterior al proponer una solución instantánea: solo uno de los términos de la ecuación era función de x, y por lo tanto no teníamos manera de compensarlo para valores arbitrarios de x. Reescribamos la solución de la sección 2.2 cambiando el valor absoluto de x del exponente de la función de onda por otra función de x, a la que denominaremos $g(x)$, y sobre la que tenemos más libertad

$$\Psi(x,t) = A(t)e^{-k(t)g(x)}e^{-i\frac{E(t)}{\hbar}t} \tag{2.17}$$

En esta función hemos tomado $A(t)$ en vez de $\sqrt{k(t)}$ como hacíamos antes para poder normalizar la función adecuadamente (la integral del resto de la función de onda no es ya inmediata, ya que interviene la función $g(x)$ que no conocemos). Además no asumiremos a priori qué dependencia existe entre $E(t)$ y $k(t)$, permitiendo así otro grado de libertad para el problema, y dejando libres de este modo tres funciones independientes, $k(t)$, $A(t)$ y $E(t)$, además de la función $g(x)$

Es importante resaltar de nuevo que para que la función de onda que propongamos pueda verificar la ecuación diferencial es necesario que aparezca una distribución que compense la delta que tenemos en el término $V(x,t)$. Es decir, al derivar la solución dos veces respecto a la posición o una vez respecto al tiempo debe aparecer un término proporcional a $\delta(x)$, ya que si no habrá manera de que la solución cumpla la ecuación diferencial. Dado que en cuando la función $g(x)$ es $|x|$ esta delta aparece en la derivada segunda de $g(x)$ respecto de x, lo más normal será asumir que la distribución saldrá también en este caso de la derivada espacial

Proponemos por tanto que en la segunda derivada respecto de x de la función $g(x)$ aparezca una delta de Dirac (denotaremos las derivadas espaciales con apóstrofos, para distinguirlas de las derivadas temporales que seguiremos representando por puntos)

$$\frac{\partial^2 g(x)}{\partial x^2} = g''(x) = f''(x) + C\ \delta(x) \tag{2.18}$$

siendo C una constante y $f(x)$ una función de clase $\mathcal{C}^\infty$

La derivada espacial que aparece en la ecuación de Schrödinger es, en términos de las derivadas de la función $g(x)$,

$$\frac{\partial e^{-k(t)g(x)}}{\partial x} = e^{-k(t)g(x)}(-g'(x)k(t)); \quad \frac{\partial^2 e^{-k(t)g(x)}}{\partial x^2} = e^{-k(t)g(x)}(g'(x)^2k(t)^2 - g''(x)k(t)) \tag{2.19}$$

Sustituyendo esta derivada en la ecuación diferencial y sustituyendo $g''(x)$ por (2.18) vemos que el término que se tiene que compensar con la delta es por tanto

$$k(t) = -\frac{2ma(t)}{\hbar^2 C} \tag{2.20}$$

que vemos que concuerda con la expresión 2.2, ya que si $g(x) = |x|$, $g''(x) = 2\delta(x)$, y por lo tanto $C = 2$

La ecuación diferencial, tras dividir a ambos lados entre $\Psi(x,t)$, queda

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[g'(x)^2k(t)^2 - f''(x)k(t)\right] = i\hbar\left[\frac{\dot{A}(t)}{A(t)} - g(x)\dot{k}(t) - i\frac{\dot{E}(t)}{\hbar}t - i\frac{E(t)}{\hbar}\right] \tag{2.21}$$

En particular, si $A(t) = \sqrt{k(t)}$ tendremos $\dfrac{\dot{A}(t)}{A(t)} = \dfrac{\dot{k}(t)}{2k(t)}$, y si $E(t)/\hbar = \hbar k(t)^2/2m$ entonces $\dot{E}(t)/\hbar = \hbar k(t)\dot{k}(t)/m$

Separemos esta ecuación en dos términos: uno que contenga la dependencia en x y otro en el que tengamos los elementos que solo dependen de t

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(-g'(x)^2k(t)^2+f''(x)k(t)+i\frac{2mg(x)\dot{k}(t)}{\hbar}\right)=i\hbar\frac{\dot{A}(t)}{A(t)}+\dot{E}(t)t+E(t) \tag{2.22}$$

Como el término de la derecha no depende de x, podemos expresarlo de momento como una función de t, $F(t)$, y escribir

$$-g'(x)^2k(t)^2+f''(x)k(t)+i\frac{2mg(x)\dot{k}(t)}{\hbar}=F(t) \tag{2.23}$$

con

$$F(t)=\frac{2m}{\hbar^2}\left[i\hbar\frac{\dot{A}(t)}{A(t)}+\dot{E}(t)t+E(t)\right] \tag{2.24}$$

Veamos qué forma han de tener $g(x)$ y $g'(x)$ de acuerdo con la forma de su derivada segunda, dada en la ecuación (2.18)

$$\boxed{g'(x)}=\int g''(x)dx=\int f''(x)dx+C\int\delta(x)dx=\boxed{f'(x)+CH(x)} \tag{2.25}$$

$$\boxed{g(x)}=\int g'(x)dx=\int f'(x)dx+C\int H(x)dx=\boxed{f(x)+Cx\ H(x)} \tag{2.26}$$

donde las posibles constantes de integración van incluidas en la función a determinar $f(x)$

Vamos a comprobar que derivar dos veces $g(x)$ conduce a la expresión buscada para $g''(x)$

$$g'(x)=f'(x)+CH(x)+Cx\delta(x) \tag{2.27}$$

donde $x\delta(x)$ se anula para todo x, ya que la delta es 0 cuando $x\neq 0$ y en el 0 la x cancela el término. Y la derivada segunda da entonces $g''(x)=f''(x)+C\delta(x)$, como debía

Y, sustituyendo ahora los valores de $g(x)$ y $g'(x)$ en (2.23) tendremos

$$\begin{aligned}&-\left[f'(x)^2+C^2H(x)^2+2Cf'(x)H(x)\right]k(t)^2+\\&+f''(x)k(t)+i\frac{2m\dot{k}(t)}{\hbar}\left(f(x)+CxH(x)\right)=F(t)\end{aligned} \tag{2.28}$$

Teniendo en cuenta que $H(x)^2=H(x)$, y agrupando los términos que dependen de la función de Heaviside obtenemos

$$\begin{aligned}&H(x)\left(-C^2k(t)^2-2Cf'(x)k(t)^2+i\frac{2m\dot{k}(t)}{\hbar}Cx\right)\\&+\left(-f'(x)^2k(t)^2+f''(x)k(t)+i\frac{2m\dot{k}(t)}{\hbar}f(x)\right)=F(t)\end{aligned} \tag{2.29}$$

Obtenemos así dos funciones que tienen que ser independientes de x

$$\begin{cases} -f'(x)^2k(t)^2 + f''(x)k(t) + i\dfrac{2m\dot{k}(t)}{\hbar}f(x) = F(t) \qquad \text{si} \quad x < 0 \\ \\ -C^2k(t)^2 - 2Cf'(x)k(t)^2 + i\dfrac{2m\dot{k}(t)}{\hbar}Cx \\ -f'(x)^2k(t)^2 + f''(x)k(t) + i\dfrac{2m\dot{k}(t)}{\hbar}f(x) = F(t) \qquad \text{si} \quad x > 0 \end{cases} \tag{2.30}$$

Veamos a continuación que la condición a la que nos lleva este sistema es equivalente a suponer que $g(x)$ es una función con simetría par respecto a $x = 0$

Procedamos en sentido inverso, suponiendo como hipótesis de partida que $g(x) = g(-x)$

En ese caso, como $g(x) = CxH(x) + f(x)$ (esta es la forma funcional que habíamos hallado en (2.26) integrando la función que propusimos para $g''(x)$), al imponer que $g(x) = g(-x)$ obtenemos que $-CxH(-x) + f(-x) = CxH(x) + f(x)$

Despejando esta identidad tendríamos $f(-x) = Cx(H(x) + H(-x)) + f(x)$. Como $H(x) + H(-x) = 1$, la ecuación que nos da la transformación de x al invertir el signo de x es $f(-x) = Cx + f(x)$

Para las derivadas sucesivas de la función podemos aplicar un proceso análogo, pero teniendo en cuenta que ya que $g(x)$ es una función par entonces la derivada respecto de x, $g'(x) = \frac{dg(x)}{dx}$ será por tanto impar (por ser x impar)

De este modo podemos igualar $g'(-x) = -g'(x)$ y obtener $CH(-x) + f'(-x) = -CH(x) - f'(x)$, y por lo tanto $f'(x) = -C - f'(x)$

Por lo tanto $g''(-x) = g''(x)$, con carácter par de nuevo, y $C\delta(-x) + f''(-x) = C\delta(x) + f''(x) \longrightarrow f''(-x) = f''(x)$ debido al carácter par de la función delta

Con el mismo procedimiento se puede demostrar por inducción que las derivadas sucesivas de $g(x)$, $g^{(n)}(x)$, tendrán carácter par si n es un número par y carácter impar si n es impar. Como la delta es una función con paridad definida (es par), y por lo tanto sus sucesivas derivadas también tendrán paridad definida (impar y par alternadamente), y además coincide que la derivada de la delta será impar cuando $g^{(n)}(x)$ también sea impar, y par cuando esta lo sea. Por lo tanto, por ser $f^{(n)}(x)$ diferencia de dos funciones con el mismo carácter llegamos a la conclusión de que $f^{(n)}$ tiene la misma paridad que $g^{(n)}$ para $n \geq 2$

Operando entonces en (2.30) con

$$f(-x) = Cx + f(x) \qquad f'(-x) = -C - f'(x) \qquad f''(-x) = f''(x) \tag{2.31}$$

podemos calcular como será la primera ecuación del sistema en el caso $x > 0$

$$-f'(-x)^2k(t)^2 + f''(-x)k(t) + i\frac{2m\dot{k}(t)}{\hbar}f(-x) = F(t) \quad \text{si} \quad x > 0 \tag{2.32}$$

Usando las transformaciones (2.31) tendremos

$$-(-C - f'(x))^2k(t)^2 + f''(x)k(t) + i\frac{2m\dot{k}(t)}{\hbar}(Cx + f(x)) = F(t) \quad \text{si} \quad x > 0 \tag{2.33}$$

y desarrollando estos términos vemos que la ecuación que obtenemos es exactamente igual que la que ya teníamos para $x > 0$

Es decir, la función (2.30) se obtiene al suponer que la función $g(x)$ tiene simetría par, tal y como queríamos demostrar

Volvamos ahora a la ecuación (2.29). Como el término de la derecha no depende de x, la derivada del término de la izquierda respecto de esta variable debe anularse. Teniendo en cuenta que la derivada de $H(x)$ es la función delta, $\delta(x)$, obtenemos

$$\delta(x)\left(-C^2k(t)^2 - 2Cf'(x)k(t)^2 + i\frac{2m\dot{k}(t)}{\hbar}Cx\right) + H(x)\left(-2Cf''(x)k(t)^2 + i\frac{2m\dot{k}(t)}{\hbar}C\right) + \left(-2f'(x)f''(x)k(t)^2 + f'''(x)k(t) + i\frac{2m\dot{k}(t)}{\hbar}f'(x)\right) = 0 \tag{2.34}$$

En esta ecuación podemos identificar por un lado el término acompañado de la delta, que deberá anularse idénticamente, y por otro una ecuación igualada a 0 en la que interviene la función de Heaviside

Tras quitar el término con la delta, el resto de (2.34) se puede traducir de nuevo en una condición para $x < 0$ y otra para $x > 0$

$$\begin{cases} -2f'(x)f''(x)k(t)^2 + f'''(x)k(t) + i\dfrac{2m\dot{k}(t)}{\hbar}f'(x) = 0 & \text{si} \quad x < 0 \\ -2Cf''(x)k(t)^2 + i\dfrac{2m\dot{k}(t)}{\hbar}C & \\ -2f'(x)f''(x)k(t)^2 + f'''(x)k(t) + i\dfrac{2m\dot{k}(t)}{\hbar}f'(x) = 0 & \text{si} \quad x > 0 \end{cases} \tag{2.35}$$

que otra vez podemos transformar usando las condiciones de paridad de $f(x)$ dadas en (2.31) y de este modo vemos que la primera ecuación del sistema queda exactamente igual que la segunda pero con un cambio de signo, que al estar igualada la expresión a 0 no juega ningún papel

Estas igualdades nos dan unas ecuaciones diferenciales equivalentes a (2.30), pero con derivadas de orden superior. Podemos usar cualquiera de las dos expresiones indistintamente, pero en general suele ser más conveniente utilizar el orden más bajo

Estudiemos ahora el otro factor de (2.34). El término proporcional a la delta debe anularse en $x = 0$, ya que $A(x)\delta(x) = A(0)\delta(x)$ y no tenemos otra manera de compensar esta distribución si $A(x)$ es una función de clase $\mathcal{C}^\infty$ (como lo es nuestra expresión, que depende de $f(x)$, y esta es una función $\mathcal{C}^\infty$ por hipótesis). La condición de anulación en el cero nos da entonces la identidad

$$-C^2k(t)^2 - 2Cf'(0)k(t)^2 + i\cancelto{0}{\frac{2m\dot{k}(t)}{\hbar}Cx} = 0 \tag{2.36}$$

Esto nos lleva a una condición sobre la derivada primera de $f(x)$ evaluada en $x = 0$

$$\boxed{f'(0) = -\frac{C}{2}} \tag{2.37}$$

Por ser $f(x)$ una función suficientemente regular (todas sus derivadas existen en toda la recta real por ser de clase $\mathcal{C}^\infty$) podremos desarrollarla en serie de potencias en torno al cero, de modo que

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n x^n \tag{2.38}$$

y de este modo la condición (2.37) implica que $C_1 = -C/2$

Esto en definitiva es un remanente de la condición de paridad de la función $g(x) = CxH(x)+f(x)$, ya que ahora para el término lineal en x tendremos $-C/2x+CxH(x) = C/2|x|$, pues precisamente la definición del valor absoluto en términos de la función de Heaviside es $|a| = -a + 2aH(x)$

Además, el carácter par de $g(x)$ implica que todos los términos con potencias impares (exceptuando el término lineal en x, que aparece dentro de un valor absoluto y por lo tanto es también par) deben anularse, por lo que

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_{2n} x^{2n} - \frac{C}{2} x \tag{2.39}$$

La forma de $g(x)$ debe ser por lo tanto una función expresable como

$$\boxed{g(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_{2n} x^{2n} + \frac{C}{2}|x|} \tag{2.40}$$

que en el caso particular de un potencial estacionario tendríamos como condiciones $C = 2$, $C_{2n} = 0$ para el resto

Si ahora nos fijamos de nuevo en (2.30) y sustituimos nuestra forma funcional de $f(x)$ allí, vemos que en la primera ecuación tenemos un término cuadrático en la derivada respecto de x, $f'(x)^2$. Como $f(x)$ solo incluye términos con potencias pares (y el término lineal en x), su derivada solo tendrá términos con potencias impares (y una constante). Vamos a ver que todos los términos de orden mayor que 2 deben ser cero

La derivada del término de orden 4 nos lleva a un término de orden 3, y al elevar $f'(x)$ al cuadrado mantenemos este término de orden 3 multiplicado por la constante. Como no aparece ningún otro término de orden 3 en la ecuación (2.30), y el miembro de la derecha de la ecuación no puede depender de x, este coeficiente debe estar igualado a 0, y por lo tanto el término de orden 4 tiene que anularse

Si ahora vamos al término de orden 6 podemos repetir el mismo argumento: ya que el término de orden 4 es ahora cero, al derivar y elevar al cuadrado nos volverá a quedar un término de orden 5 compuesto únicamente por el coeficiente del término de orden 6 multiplicado por constantes, y por lo tanto para anularlo debemos igualar a cero el término de sexto orden. Por inducción llegamos de este modo a que

$$f(x) = C_0 - \frac{C}{2} x + C_2 x^2 \tag{2.41}$$

y por lo tanto

$$\boxed{g(x) = C_0 + \frac{C}{2}|x| + C_2 x^2} \tag{2.42}$$

Sustituyamos $f(x)$ en (2.30) para ver qué condiciones adicionales nos aparecen

$$-\left(-\frac{C}{2}+2C_2x\right)^2 k(t)^2+(2C_2)k(t)+i\frac{2m\dot{k}(t)}{\hbar}\left(C_0-\frac{C}{2}x+C_2x^2\right)=F(t) \tag{2.43}$$

Como esta ecuación se tiene que verificar para cualquier posible valor de x, de aquí nos salen tres condiciones independientes: una para los términos que no dependen de x, otra para los lineales y una tercera para los cuadráticos (ya que cada uno se debe anular por separado)

$$\begin{cases} -4C_2^2k(t)^2+i\dfrac{2m\dot{k}(t)}{\hbar}C_2=0 \\ 2C\,C_2k(t)^2-i\dfrac{2m\dot{k}(t)}{\hbar}\dfrac{C}{2}=0 \\ -\dfrac{C^2}{4}k(t)^2+2C_2k(t)+i\dfrac{2m\dot{k}(t)}{\hbar}C_0=F(t) \end{cases} \tag{2.44}$$

La primera y la segunda ecuación son iguales tras simplificar, y nos llevan a la ecuación diferencial

$$\dot{k}(t)=-i\frac{2\hbar C_2}{m}k(t)^2 \longrightarrow k(t)=\frac{1}{i\dfrac{2\hbar C_2}{m}t+\alpha}; \qquad \alpha=\text{Cte} \tag{2.45}$$

Nuestra solución con una función alternativa al valor absoluto de x en el exponente obliga por tanto a que $k(t)$ sea de la forma

$$\boxed{k(t)=\frac{m}{i2\hbar C_2t+m\alpha}} \tag{2.46}$$

Y, como sabemos que entre $k(t)$ y $a(t)$ debe verificarse la relación (2.20), esto nos lleva a que esta solución solo sea válida para potenciales de la forma

$$\boxed{a(t)=-C\frac{\hbar^2}{i4\hbar C_2t+2m\alpha}} \tag{2.47}$$

Es decir, será solución de los potenciales que dependan inversamente con el tiempo. Debemos imponer también la condición de que $a(t)$ sea una función real para que el hamiltoniano del sistema sea hermítico y mantenga las propiedades esperadas de conservación de la normalización de las funciones de onda y de describir un observable. Para ello necesitamos que tanto iC_2/C como α/C sean constantes reales y positivas

$$\boxed{i\frac{C_2}{C}=\gamma_1} \qquad \boxed{\frac{\alpha}{C}=\gamma_2} \qquad \gamma_1,\gamma_2\in\mathbb{R}^+ \tag{2.48}$$

La positividad es necesaria para que $a(t)$ sea negativa para todo $t>0$ y, por lo tanto, exista un estado ligado

$$a(t) = -\frac{\hbar^2}{4\hbar\gamma_1 t + 2m\gamma_2} \tag{2.49}$$

y las constantes γ_1 y γ_2 quedan totalmente determinadas al elegir el potencial $a(t)$

Podemos escribir $k(t)$ en función de una única variable compleja, C, como

$$k(t) = \frac{1}{C}\frac{m}{2\hbar\gamma_1 t + m\gamma_2} \tag{2.50}$$

De momento vamos a dejar la tercera condición de (2.44) para más adelante, y comprobaremos primero qué condición nos aparece al imponer que la función de onda definida por

$$\Psi(x,t) = A(t)\exp\left(-\left[C_2x^2 + \frac{C}{2}|x| + C_0\right]\frac{1}{C}\frac{m}{2\hbar\gamma_1 t + m\gamma_2}\right)\exp\left(-i\frac{E(t)}{\hbar}t\right) \tag{2.51}$$

esté normalizada a 1 al integrar a todo el espacio

Calculamos primero el módulo de la función de onda, multiplicando (2.51) por su conjugado

$$|\Psi(x,t)|^2 = \left(A(t)e^{-k(t)g(x)}e^{-iE(t)t}\right)\left(A^*(t)e^{-k^*(t)g^*(x)}e^{iE^*(t)t}\right) = |A(t)|^2e^{-[k(t)g(x)+k^*(t)g^*(x)]} \tag{2.52}$$

ya que la energía debe ser real para ser un observable, y por lo tanto $-iE(t)t + iE^*(t)t = 0$

Ahora podemos calcular el término que nos sale en el exponente a partir de las expresiones de $k(t)$ y $g(x)$ que hemos hallado ya (dejándolo en función de las constantes correspondientes)

De este modo tenemos

$$\begin{aligned} k(t)g(x) + k^*(t)g^*(x) &= \frac{m}{2\hbar\gamma_1 t + m\gamma_2}\left(\frac{C_2x^2 + \frac{C}{2}|x| + C_0}{C} + \frac{C_2^*x^2 + \frac{C^*}{2}|x| + C_0^*}{C^*}\right) = \\ &= \frac{m}{2\hbar\gamma_1 t + m\gamma_2}\left(\left(\frac{C_2}{C} + \frac{C_2^*}{C^*}\right)x^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{C}{C} + \frac{C^*}{C^*}\right)|x| + \left(\frac{C_0}{C} + \frac{C_0^*}{C^*}\right)\right) = \\ &= \frac{m}{2\hbar\gamma_1 t + m\gamma_2}\left[(\cancel{-i\gamma_1} + \cancel{i\gamma_1})x^2 + |x| + \frac{C_0C^* + C_0^*C}{|C|^2}\right] \end{aligned} \tag{2.53}$$

donde hemos usado la definición de γ_1 dada en (2.48). Vamos a llamar al factor real que multiplica todos los términos $Z = \frac{m}{2\hbar\gamma_1 t + m\gamma_2}$ para simplificar la expresión

A partir del módulo podemos calcular la integral extendida a todo el espacio, que se corresponde con la probabilidad de encontrar la partícula en algún punto del mismo y, por lo tanto, debe ser igual a la unidad

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty}|\Psi(x,t)|^2dx = 1 \longrightarrow |A(t)|^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-Z\left[|x| + \frac{C_0C^* + C_0^*C}{|C|^2}\right]}dx = \\ = |A(t)|^2e^{-Z\frac{C_0C^* + C_0^*C}{|C|^2}}\left[\int_{-\infty}^{\infty}e^{-Z|x|}dx\right] = 1 \end{aligned} \tag{2.54}$$

Esta integral se puede resolver automáticamente integrando por separado a cada lado del cero

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-Z|x|}dx = \int_{0}^{\infty} e^{-Zx}dx + \int_{-\infty}^{0} e^{Zx}dx = \left.\frac{e^{-Zx}}{-Z}\right|_{0}^{\infty} + \left.\frac{e^{Zx}}{Z}\right|_{-\infty}^{0} = \frac{2}{Z} \tag{2.55}$$

Ahora ya podemos escribir el módulo de $A(t)$ a partir de (2.54) como

$$|A(t)| = \sqrt{\frac{Z}{2}}e^{\frac{Z}{2}\frac{C_0C^*+C_0^*C}{|C|^2}} \tag{2.56}$$

o, sustituyendo la expresión de Z

$$\boxed{|A(t)| = \sqrt{\frac{m}{4\hbar\gamma_1 t + 2m\gamma_2}}e^{\frac{m}{4\hbar\gamma_1 t+2m\gamma_2}\frac{C_0C^*+C_0^*C}{|C|^2}}} \tag{2.57}$$

donde $C_0C^* + C_0^*C$ debe ser un número real para que el módulo de A sea real. Obtenemos entonces la condición

$$\boxed{C_0C^* + C_0^*C = \gamma_3} \qquad \gamma_3 \in \mathbb{R} \tag{2.58}$$

Podemos escribir $A(t)$ como

$$A(t) = |A(t)|e^{i\theta(t)} \tag{2.59}$$

donde $\theta(t)$ es una función del tiempo a determinar y que da cuenta de la relación entre las partes real e imaginaria de $A(t)$

Volvamos ahora a la tercera ecuación de (2.44). Vemos que es igual que (2.22), que relaciona $A(t)$ y $E(t)$. La podemos escribir en términos de esta segunda expresión como

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(-g'(x)^2k(t)^2 + f''(x)k(t) + i\frac{2mg(x)\dot{k}(t)}{\hbar}\right) = i\hbar\frac{\dot{A}(t)}{A(t)} + \dot{E}(t)t + E(t) \tag{2.60}$$

Como ya sabemos que $k(t) = m/C\,[1/(2\hbar\gamma_1 t + m\gamma_2)]$ y que $g(x) = C_2x^2 + C/2|x| + C_0$ y $f''(x) = 2C_2$, podemos calcular $\dot{k}(t) = m/C\,[(-2\hbar\gamma_1)/(2\hbar\gamma_1 t{+}m\gamma_2)^2]$, $g'(x) = 2C_2x{+}CH(x){-}C/2$ y a partir de esta segunda función, $g'(x)^2 = 4C_2^2x^2 + 2CC_2|x| + C^2/4$. Sustituyendo ahora estos valores en la ecuación (2.60)

$$\begin{aligned}\frac{\hbar^2}{2m}\Bigg[-\left(4C_2^2x^2 + 2CC_2|x| + \frac{C^2}{4}\right)\frac{1}{C^2}\frac{m^2}{(2\hbar\gamma_1 t + m\gamma_2)^2} + 2\frac{C_2}{C}\frac{m}{2\hbar\gamma_1 t + m\gamma_2} + \\ + i\frac{2m}{\hbar}\left(C_2x^2 + \frac{C}{2}|x| + C_0\right)\frac{1}{C}\frac{(-2\hbar m\gamma_1)}{(2\hbar\gamma_1 t + m\gamma_2)^2}\Bigg] = i\hbar\frac{\dot{A}(t)}{A(t)} + \dot{E}(t)t + E(t)\end{aligned} \tag{2.61}$$

Operando obtenemos

$$
\begin{aligned}
&\frac{\hbar^2}{2C}\frac{m}{(2\hbar\gamma_1 t+m\gamma_2)^2}\left[-\left(4\frac{C_2^2}{C}x^2+2C_2|x|+\frac{C}{4}\right)+2\frac{C_2}{m}(2\hbar\gamma_1 t+m\gamma_2)-\right.\\
&\left.-i4\gamma_1\left(C_2x^2+\frac{C}{2}|x|+C_0\right)\right]=i\hbar\frac{\dot{A}(t)}{A(t)}+\dot{E}(t)t+E(t)
\end{aligned}
\tag{2.62}
$$

Se puede comprobar que los términos en x^2 y $|x|$ se anulan, ya que esto es precisamente lo que impusimos en (2.44), y nos queda una expresión independiente de x

$$
\frac{\hbar^2}{C}\frac{m}{(2\hbar\gamma_1 t+m\gamma_2)^2}\left[\frac{2\hbar C_2\gamma_1}{m}t+C_2\gamma_2-2iC_0\gamma_1-\frac{C}{8}\right]=i\hbar\frac{\dot{A}(t)}{A(t)}+\dot{E}(t)t+E(t)
\tag{2.63}
$$

La derivada de $A(t)$ la podemos separar en una contribución debida a la variación de su módulo y otra debida a la variación de la fase usando (2.59)

$$
\frac{\dot{A}(t)}{A(t)}=\frac{1}{|A(t)|}\frac{\partial|A(t)|}{\partial t}+i\dot{\theta}(t)
\tag{2.64}
$$

y, como ya conocemos el módulo de $A(t)$ podemos escribir

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{|A(t)|}\frac{\partial|A(t)|}{\partial t}&=-\frac{2\hbar\gamma_1}{4\hbar\gamma_1 t+2m\gamma_2}-\frac{4\hbar m\gamma_1}{(4\hbar\gamma_1 t+2m\gamma_2)^2}\frac{C_0C^*+C_0^*C}{|C|^2}=\\
&=-\frac{m\hbar\gamma_1}{(2\hbar\gamma_1 t+m\gamma_2)^2}\left[2\frac{\hbar}{m}\gamma_1 t+\gamma_2+\frac{C_0C^*+C_0^*C}{|C|^2}\right]
\end{aligned}
\tag{2.65}
$$

Así que sustituyendo (2.65) y (2.64) en (2.63) obtenemos una relación para $E(t)$ y $\dot{\theta}(t)$

$$
\begin{aligned}
&-\hbar\dot{\theta}(t)+\dot{E}(t)t+E(t)=\frac{\hbar^2 m}{(2\hbar\gamma_1 t+m\gamma_2)^2}\left[-i2\cancel{\frac{\hbar\gamma_1^2}{m}}t+\cancel{(-i\gamma_1)\gamma_2}-i2\frac{C_0}{C}\gamma_1-\frac{1}{8}\right.\\
&\left.+i2\cancel{\frac{\hbar\gamma_1^2}{m}}t+\cancel{i\gamma_1\gamma_2}+i\gamma_1\frac{C_0C^*+C_0^*C}{|C|^2}\right]=\frac{\hbar^2 m}{(2\hbar\gamma_1 t+m\gamma_2)^2}\left[i\frac{\gamma_1}{|C|^2}(C_0^*C-C_0C^*)-\frac{1}{8}\right]
\end{aligned}
\tag{2.66}
$$

De este modo llegamos a la relación

$$
-\hbar\dot{\theta}(t)+\dot{E}(t)t+E(t)=\frac{\hbar^2 m}{(2\hbar\gamma_1 t+m\gamma_2)^2}\left[i\frac{\gamma_1}{|C|^2}(C_0^*C-C_0C^*)-\frac{1}{8}\right]
\tag{2.67}
$$

Aunque no conocemos la forma de $E(t)$ y de $\theta(t)$ separadamente, a partir de esta ecuación podemos obtener la forma de una función $\Gamma(t)=-E(t)t/\hbar+\theta(t)$, ya que el término de la izquierda es $-\hbar\dot{\Gamma}(t)$

Tras integrar tendremos

$$
\Gamma(t)=\frac{m}{4\hbar\gamma_1 t+2m\gamma_2}\left[i\frac{1}{|C|^2}(C_0^*C-C_0C^*)-\frac{1}{8\gamma_1}\right]
\tag{2.68}
$$

La función de onda que hemos obtenido tras todo este proceso para el caso de un potencial de la forma

$$\boxed{a(t) = -\frac{\hbar^2}{4\hbar\gamma_1 t + 2m\gamma_2}} \tag{2.69}$$

es la siguiente ecuación de onda

$$\Psi(x,t) = |A(t)|e^{i\theta(t)} \exp\left(\left[i\gamma_1 x^2 - \frac{1}{2}|x| - \frac{C_0}{C}\right] \frac{m}{2\hbar\gamma_1 t + m\gamma_2}\right) \exp\left(-i\frac{E(t)}{\hbar}t\right) \tag{2.70}$$

y sustituyendo $\Gamma(t)$ y la expresión encontrada para el módulo de $|A(t)|$ tenemos

$$\boxed{\Psi(x,t) = \sqrt{\frac{m}{4\hbar\gamma_1 t + 2m\gamma_2}} \exp\left(\left[i\gamma_1 x^2 - \frac{1}{2}|x| - i\frac{1}{16\gamma_1}\right] \frac{m}{2\hbar\gamma_1 t + m\gamma_2}\right)} \tag{2.71}$$

donde γ_1 y γ_2 son dos constantes reales que quedan completamente determinadas por la forma del potencial

En el caso estacionario las constantes toman los valores $\gamma_1 = 0$ y $\gamma_2 = \frac{\hbar^2}{2m\lambda}$

Para la ecuación diferencial adimensional tendremos que para un potencial

$$\mathcal{A}(T) = -\frac{1}{4\gamma_1 t + \gamma_2} \tag{2.72}$$

la solución es

$$\Phi(X,T) = \sqrt{\frac{1}{8\gamma_1 T + 2\gamma_2}} \exp\left(\left[i\gamma_1 X^2 - \frac{1}{2}|X| - i\frac{1}{16\gamma_1}\right] \frac{1}{4\hbar\gamma_1 T + \gamma_2}\right) \tag{2.73}$$

Parte I

Resolución de la ecuación diferencial utilizando el método de separación de variables

Capítulo 3

Resolución de la ecuación en el caso de una delta independiente del tiempo. Onda plana

La ecuación diferencial que queremos resolver en este trabajo es la siguiente,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+a(t)\delta(x)\Psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \tag{3.1}$$

para una función $a(t)$ con una dependencia arbitraria con el tiempo

Sin embargo, como el potencial $V(x,t)=a(t)\delta(x)$ tiene una dependencia complicada en x y t, se comprueba que esta ecuación no es de variables separadas en todo el espacio. Es por ello que las técnicas usadas para resolver la ecuación de Schrödinger estacionaria (1.8) no son directamente aplicables en este caso

Para ganar intuición sobre como resolverla para cualquier función $a(t)$, introduzcamos primero el método y las soluciones del caso independiente del tiempo, cuando $a(t)=\lambda$ y por tanto $V=V(x)=\lambda\delta(x)$. En esta situación la ecuación sí que es separable, por lo que podemos hallar una solución factorizada[1] $\Psi(x,t)=\psi(x)T(t)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\left(\psi(x)T(t)\right)}{\partial x^2}+\lambda\delta(x)\ \psi(x)T(t)=i\hbar\frac{\partial\left(\psi(x)T(t)\right)}{\partial t} \tag{3.2}$$

Podemos operar esta ecuación para dejar a cada lado de la igualdad una función que dependa únicamente de la variable x o de la variable t respectivamente, por lo que concluimos que ambos términos han de ser constantes. Despejando obtenemos las siguientes ecuaciones diferenciales ordinarias en una única variable

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+\lambda\delta(x)\psi(x)=E\psi(x) \\[2ex] i\hbar\dfrac{\partial T(t)}{\partial t}=E\,T(t) \end{cases} \tag{3.3}$$

Las soluciones dependerán del valor de E, y vamos a ver que hay infinitas soluciones cuando $E>0$ (un continuo de estados indexados por la constante E), denominados *estados*

[1] La ecuación de Schrödinger es separable siempre que el potencial dependa solo de una de las dos variables[8, pág. 32]

de scattering, y una única solución cuando $E < 0$ y solo si $a < 0$ también, a la que se conoce como *estado ligado*[2]

Para la dependencia temporal de la ecuación tenemos la ecuación diferencial

$$i\hbar\frac{\partial T(t)}{\partial t} = E\,T(t) \tag{3.4}$$

cuya solución es inmediata y que queda en función de una constante a la que denominaremos h

$$T(t) = he^{-i\frac{E}{\hbar}t} \tag{3.5}$$

Vamos a dar ahora la solución general a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + \lambda\delta(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{3.6}$$

Cuando $x \neq 0$ tenemos la ecuación que describe a una partícula libre, $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = E\psi(x)$, cuya solución conocemos. Planteemos primero la solución a ambos lados y a continuación veremos como relacionar las constantes a, b, c y d que nos salen. La solución a trozos es

$$\begin{cases} \psi^L(x) = \left(\tilde{a}e^{ikx} + \tilde{d}e^{-ikx}\right) & x < 0 \\ \psi^R(x) = \left(\tilde{b}e^{ikx} + \tilde{c}e^{-ikx}\right) & x > 0 \end{cases} \qquad \text{con} \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{3.7}$$

La solución completa de la ecuación de Schrödinger la podemos obtener a partir de $\Psi(x,t) = \psi(x)T(t)$, y caracteriza completamente la evolución de una onda plana en este potencial

$$\begin{cases} \Psi^L(x,t) = \left(ae^{ikx} + de^{-ikx}\right)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} & x < 0 \\ \Psi^R(x,t) = \left(be^{ikx} + ce^{-ikx}\right)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} & x > 0 \end{cases} \qquad \text{con} \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{3.8}$$

donde hemos agrupado h con los coeficientes que aparecían en (3.7) para dar a, b, c y d

En el esquema de la figura 3.1 se aprecia mejor qué dirección tiene cada una de las ondas que acompañan a estos coeficientes

Esta solución se puede hallar también a partir de la ecuación adimensional (1.12), en cuyo caso tendremos

$$\begin{cases} \Phi^L(X,T) = \left(ae^{ikX} + de^{-ikX}\right)e^{-i\epsilon T} & X < 0 \\ \Phi^R(x,t) = \left(be^{ikX} + ce^{-ikX}\right)e^{-i\epsilon T} & X > 0 \end{cases} \qquad \text{con} \qquad k = \sqrt{\epsilon} \tag{3.9}$$

[2]Esta terminología se corresponde con el espectro del operador hamiltoniano, tal como se explica en la referencia [10, pág. 73]

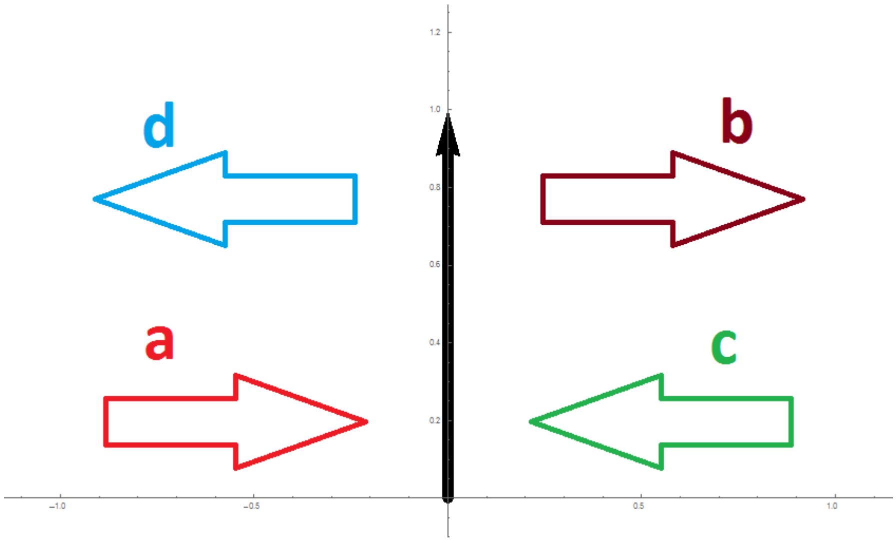


Figura 3.1: Dirección de desplazamiento de cada onda

3.1. Continuidad

Como la función de onda debe ser continua en todo el espacio debemos imponer que en $x = 0$ las dos partes tomen el mismo valor para todo instante de tiempo t

$$\Psi^L(0,t) = \Psi^R(0,t) \longrightarrow \psi^L(0) = \psi^R(0) \tag{3.10}$$

por ser la función $T(t)$ la misma a ambos lados de $x = 0$ y tener que verificarse la ecuación para cualquier valor de t

A partir de esta igualdad obtenemos la condición

$$\boxed{a + d = b + c} \tag{3.11}$$

Esta condición es igual en el caso adimensional

3.2. Derivabilidad

La condición sobre la derivada de la función se traduce, en el caso de la delta, en que la función tendrá un salto en la derivada en $x = 0$ y el salto vendrá dado por

$$\left.\frac{d\Psi^R(x,t)}{dx}\right|_{x=0^+} - \left.\frac{d\Psi^L(x,t)}{dx}\right|_{x=0^-} = \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\Psi(0) \tag{3.12}$$

Para una onda plana, la derivada de cada una de las partes de la función respecto de x es

$$\begin{cases} \dfrac{d\Psi^L(x,t)}{dx} = ik\left(ae^{ikx} - de^{-ikx}\right)e^{-i\frac{E(k)}{\hbar}t} & x < 0 \\ \dfrac{d\Psi^R(x,t)}{dx} = ik\left(be^{ikx} - ce^{-ikx}\right)e^{-i\frac{E(k)}{\hbar}t} & x > 0 \end{cases} \tag{3.13}$$

Si ahora sustituimos la función (3.13) en la condición (3.12) para $x = 0$ obtenemos

$$ik\left[(b-c)-(a-d)\right]=\frac{2m\lambda}{\hbar^2}(a+d)\quad\longrightarrow\quad b-c-a+d=-i\frac{2m\lambda}{\hbar^2 k}(a+d) \tag{3.14}$$

o, haciendo uso de (3.11)

$$\boxed{b-a=-i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}(a+d)} \tag{3.15}$$

En el caso en el que trabajamos con la ecuación adimensional esta relación se convierte, mediante el uso de los resultados de la sección 1.2, en

$$b-a=-i\frac{\lambda}{2k}(a+d) \tag{3.16}$$

3.3. Conservación de la densidad de probabilidad

Si el operador $H(t)$ es hermítico, la densidad de probabilidad se conserva[3] (y, en particular, si la función de onda es normalizable la norma es constante para todo t). Por lo tanto, si $a(t)$ es una función real, el hamiltoniano será hermítico y podremos garantizar que la densidad de probabilidad se conservará

La ecuación de continuidad de la densidad de probabilidad en mecánica cuántica se define como[4]

$$\frac{\partial\rho(\vec{x},t)}{\partial t}+\vec{\nabla}\cdot\vec{J}(\vec{x},t)=0 \tag{3.17}$$

donde la densidad de probabilidad ρ es

$$\rho(\vec{x},t)=|\Psi(\vec{x},t)|^2=\Psi^*(\vec{x},t)\Psi(\vec{x},t) \tag{3.18}$$

y la corriente de probabilidad, $\vec{J}$, verifica[5]

$$\vec{J}=\frac{\hbar}{2mi}\left[\Psi^*(\vec{x},t)\left(\vec{\nabla}\cdot\Psi(\vec{x},t)\right)-\Psi(\vec{x},t)\left(\vec{\nabla}\cdot\Psi^*(\vec{x},t)\right)\right] \tag{3.19}$$

Para funciones de onda en una dimensión espacial el vector densidad de corriente $\vec{J}$ se reduce a un único parámetro, J

$$J=\frac{\hbar}{2mi}\left[\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right] \tag{3.20}$$

Vamos a calcular $\rho(x,t)=\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$. La función ρ será una función a trozos por serlo $\Psi(x,t)$, y por lo tanto podemos calcular independientemente su valor para $x<0$ y para $x>0$, siendo función en el primer caso de $\Psi^L(x,t)$ y en el segundo de $\Psi^R(x,t)$. Operando con el valor a la izquierda del cero, $\Psi^L=\left(ae^{ikx}+de^{-ikx}\right)he^{-iEt/\hbar}$, la densidad de probabilidad toma el valor

[3] Este resultado se deriva fácilmente a partir de la ecuación de Schrödinger, como se ve en [8, pág.237]

[4] Esta ecuación se obtiene de manera análoga que en el caso de la mecánica de fluidos [8, pág.238]

[5] Para el caso de un hamiltoniano expresable como $H=T+V$ [8, pág.238]

$$\rho^L(x,t) = \left(a^* e^{-ik^*x} + d^* e^{ik^*x}\right)\left(a e^{ikx} + d e^{-ikx}\right) e^{iE^*t/\hbar} e^{-iEt/\hbar} = \tag{3.21}$$
$$= \left(|a|^2 e^{i(k-k^*)x} + |d|^2 e^{-i(k-k^*)x} + a d^* e^{i(k+k^*)x} + a^* d\, e^{-i(k+k^*)x}\right) \tag{3.22}$$

Donde en la última línea hemos usado $E = E^*$, ya que la energía siempre es real. Con esto se cancela la dependencia temporal, y podemos concluir

$$\frac{\partial \rho^L(x,t)}{\partial t} = 0 \tag{3.23}$$

Los cálculos para $\rho^R(x,t)$ son análogos, utilizando $\Psi^R(x,t)$ y llegando también a que $\partial\rho^R(x,t)/\partial t = 0$

El resultado (3.23) nos indica que la probabilidad de encontrar la onda en un cierto punto del espacio es la misma en cualquier instante de tiempo t, es decir, tenemos una situación estacionaria. Usando esta expresión en la ecuación (3.17) vemos que nos aparece la condición $\partial J/\partial x = 0$, es decir, que la densidad de corriente de probabilidad debe ser independiente de la posición en todos los puntos. Esto no implica que tenga que ser nula: podemos tener un flujo continuo de probabilidad atravesando el espacio, pero este tiene que ser igual en todos los puntos

Calculemos ahora la densidad de corriente asociada a $\Psi^L(x,t) = \psi^L(x)T(t)$

Podemos de nuevo agrupar la constante multiplicativa h del término $T(t)$ dentro de los coeficientes a, b, c, d. Para ello redefinimos la función como $\Psi^L(x,t) = \widetilde{\psi^L}(x)\widetilde{T}(t)$, donde $\widetilde{T}(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ y por lo tanto $|\widetilde{T}(t)|^2 = 1$

La fórmula para la densidad de corriente será entonces

$$J^L = \frac{\hbar}{2mi}\left[\widetilde{\psi^L}^* \frac{\partial \widetilde{\psi^L}}{\partial x} - \widetilde{\psi^L}\frac{\partial \widetilde{\psi^L}^*}{\partial x}\right] \tag{3.24}$$

Antes de empezar a operar hemos de resaltar de nuevo que, debido a que el hamiltoniano H es un observable, sus autovalores son números reales, es decir, $E \in \mathbb{R}$

Entonces, como se puede apreciar en (3.8), k será un número real si $E > 0$ y será imaginario puro si $E < 0$, por lo que siempre tendremos $k = k^*$ o bien $k = -k^*$. De momento no haremos distinción entre ambos casos, pero al final veremos el distinto carácter de la ecuación en función de que k sea real o imaginario

Sustituyendo ahora los valores de (3.8) y (3.13) en (3.24) y haciendo el conjugado cuando corresponda (es indiferente derivar primero y luego conjugar o conjugar antes de derivar, el resultado es el mismo), obtenemos

$$\begin{aligned} J^L = \frac{\hbar}{2mi}&\left[\left(a^* e^{-ik^*x} + d^* e^{ik^*x}\right) ik \left(a e^{ikx} - d e^{-ikx}\right) - \right.\\ &\left. - \left(a e^{ikx} + d e^{-ikx}\right)(-ik^*)\left(a^* e^{-ik^*x} - d^* e^{-ik^*x}\right)\right] = \\ = \frac{\hbar}{2mi}&\left[ik\left(|a|^2 e^{i(k-k^*)x} - |d|^2 e^{-i(k-k^*)x} + a d^* e^{i(k+k^*)x} - a^* d\, e^{-i(k+k^*)x}\right) + \right.\\ &\left. + ik^*\left(|a|^2 e^{i(k-k^*)x} - |d|^2 e^{-i(k-k^*)x} - a d^* e^{i(k+k^*)x} + a^* d\, e^{-i(k+k^*)x}\right)\right] \end{aligned} \tag{3.25}$$

que, reagrupando, podemos escribir como

$$\frac{\hbar}{2m}\left[(k+k^*)\left(|a|^2 e^{i(k-k^*)x} - |d|^2 e^{-i(k-k^*)x}\right) + (k-k^*)\left(a d^* e^{i(k+k^*)x} - a^* d e^{-i(k+k^*)x}\right)\right] \tag{3.26}$$

Ahora ya vamos a distinguir el carácter de k para ver los dos resultados distintos a los que nos lleva la ecuación en función de este

Cuando $E > 0$, $k = k^*$ y por tanto $k - k^* = 0$ tenemos que

$$J^L(x,t) = \frac{\hbar}{2m}\left[2k\left(|a|^2 - |d|^2\right)\right] = \frac{\hbar k}{m}\left(|a|^2 - |d|^2\right) \tag{3.27}$$

$$J^L = \frac{\hbar k}{m}\left(|a|^2 - |d|^2\right) \tag{3.28}$$

Mientras que para $E < 0$, $k = -k^*$, con lo que $k + k^* = 0$

$$J^L(x,t) = \frac{\hbar}{2m}\left[2k\left(ad^* - a^*d\right)\right] = \frac{\hbar k}{m}\left(ad^* - a^*d\right) \tag{3.29}$$

$$J^L = \frac{\hbar k}{m}\left(ad^* - a^*d\right) \tag{3.30}$$

Se puede repetir exactamente el mismo proceso para Ψ^R y se obtendría finalmente que si $E > 0$

$$J^R = \frac{\hbar k}{m}\left(|b|^2 - |c|^2\right) \tag{3.31}$$

y si $E > 0$

$$J^R = \frac{\hbar k}{m}\left(bc^* - b^*c\right) \tag{3.32}$$

Vemos que efectivamente las densidades de corriente son independientes de x en cada zona, $x < 0$ y $x > 0$, como debía verificarse

En el caso adimensional tendríamos $J^L = 2k\left(|a|^2 - |d|^2\right)$ y $J^L = 2k\left(ad^* - a^*d\right)$ respectivamente, e igual para J^R

Solo nos queda imponer que la ecuación de continuidad también se cumpla en $x = 0$. Como $\partial\rho/\partial t = 0$ también en 0, la derivada de J respecto de x debe anularse en este punto. Para ello, ambas expresiones de J deben ser iguales entre sí, para que sean efectivamente independiente de x en todo el espacio

$$J^L = J^R \longrightarrow \frac{\hbar k}{m}\left(|a|^2 - |d|^2\right) = \frac{\hbar k}{m}\left(|b|^2 - |c|^2\right) \tag{3.33}$$

Por lo tanto tenemos las condiciones que buscábamos

$$\boxed{|a|^2 + |c|^2 = |b|^2 + |d|^2} \qquad \text{si} \qquad \boxed{E > 0} \tag{3.34}$$

y

$$\boxed{ad^* - a^*d = bc^* - b^*c} \qquad \text{si} \qquad \boxed{E < 0} \tag{3.35}$$

Estas condiciones son iguales en el caso adimensional

3.4. Solución para $E > 0$

Como hemos visto que los paquetes de ondas se pueden tratar estudiando cada modo separadamente, vamos a centrarnos solo en las ondas planas

En las secciones anteriores hemos obtenido tres condiciones que deben cumplir las ondas planas con $E > 0$

$$\begin{cases} a + d = b + c \\ b - a = -i\dfrac{m\lambda}{\hbar^2 k}(a+d) \\ |a|^2 + |c|^2 = |b|^2 + |d|^2 \end{cases} \tag{3.36}$$

Las dos primeras de estas ecuaciones son sobre números complejos, mientras que la última es solo sobre sus módulos. Esto significa que si queremos calcular los 8 parámetros reales que caracterizan los coeficientes a, b, c y d, estas ecuaciones solo nos fijan 5 parámetros, dejando tres libres

Este resultado es perfectamente lógico desde el punto de vista físico: las condiciones que tenemos que dar al problema son las ondas planas que inciden sobre la delta tanto desde la izquierda como desde la derecha, caracterizadas por a y c. Pero, además, una fase compleja global no tiene sentido físico, solo la fase relativa lo tiene, por lo que solo podemos dar dos módulos y una fase, y los otros 5 parámetros quedan totalmente determinados a partir de (3.36)

Podemos despejar las ecuaciones para dejar b y d como función de a y c, sustituyendo la primera ecuación, la ecuación de continuidad, en la segunda, la condición de salto

$$\begin{cases} b = \dfrac{1}{1 + i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}a - \dfrac{i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}{1 + i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}c \\ d = -\dfrac{i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}{1 + i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}a + \dfrac{1}{1 + i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}c \end{cases} \tag{3.37}$$

que como podemos ver son lineales en a y b, lo que nos va a permitir definir un operador lineal relacionando estas parejas de parámetros, como vamos a ver en la sección 3.5. Los parámetros que acompañan a c y a se denominan *coeficientes de reflexión y de transmisión*

Para el caso adimensional estas relaciones son

$$\begin{cases} b = \dfrac{2k}{2k + i\lambda}a - \dfrac{i\lambda}{2k + i\lambda}c \\ d = -\dfrac{i\lambda}{2k + i\lambda}a + \dfrac{2k}{2k + i\lambda}c \end{cases} \tag{3.38}$$

Si nos fijamos ahora en la condición adicional que aparece en (3.36), la tercera, al sustituir el módulo al cuadrado de b y d a partir de las expresiones que acabamos de obtener nos queda de la siguiente manera

$$|a|^2+|c|^2 = \left(\left|\frac{1}{1+i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}\right|^2 |a|^2 + \left|\frac{i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}{1+i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}\right|^2 |c|^2\right) + \left(\left|\frac{i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}{1+i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}\right|^2 |a|^2 + \left|\frac{1}{1+i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}\right|^2 |c|^2\right) \quad (3.39)$$

e igualando los coeficientes de $|a|$ y $|c|$ de ambos miembros obtenemos finalmente la condición

$$\left|\frac{i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}{1+i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}\right|^2 + \left|\frac{1}{1+i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}\right|^2 = 1 \quad (3.40)$$

Es decir, la condición de conservación de la densidad de probabilidad nos lleva a que la suma de los parámetros de transmisión y reflexión debe ser igual a 1: La partícula o bien se refleja o bien se transmite, no puede quedarse en la barrera (que además es un conjunto de medida nula)

3.5. Matriz de *scattering*

La matriz de *scattering*, o matriz S, es un operador unitario[6] ($SS^+ = \mathbb{I}$) que relaciona los estados de dispersión asintóticamente libres del hamiltoniano H_{in} con los de H_{out}, es decir, $S : H_{in} \to H_{out}$ y equivalentemente $S^+ = S^{-1} : H_{out} \to H_{in}$

$$|\psi>_{out} = S|\psi>_{in}; \qquad |\psi>_{in} = S^+|\psi>_{out} \quad (3.41)$$

Los polos de la matriz S se corresponden con las resonancias de *scattering*, o lo que es lo mismo, con los estados ligados del sistema[7]

Si ahora escribimos la matriz de *scattering* de nuestro problema, los estados iniciales son los caracterizados por los coeficientes a y c sobre la base e^{ikx}, e^{-ikx}, mientras que los estados finales vendrán dados por b y d en esta misma base. Por lo tanto podemos escribir la matriz de *scattering* siguiente

$$\begin{pmatrix} b \\ d \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a \\ c \end{pmatrix} \quad (3.42)$$

La matriz S se puede descomponer en submatrices, asociadas a la transmisión y reflexión de la onda caracterizada por a (que denotaremos T y R respectivamente) y a la transmisión y reflexión de la onda c (que por analogía llamaremos T', R')

$$S = \left(\begin{array}{c|c} T & R' \\ \hline R & T' \end{array}\right) \longrightarrow \begin{array}{l} b = Ta + R'c \\ d = Ra + T'c \end{array} \quad (3.43)$$

Se puede ver intuitivamente esta relación revisando la figura 3.1, viendo que b tendrá una contribución debida a la transmisión de a y otra debida a la reflexión de c, y análogamente d se compone de la transmisión de c más la reflexión de a

[6]Para garantizar el carácter unitario de S basta con que el potencial $V(x,t)$ sea una función real [10, pág.156]. Esta propiedad está asociada con la conservación de la probabilidad utilizada en la sección 3.3

[7]Cuando la matriz S tiene polos, los estados correspondientes son estados ligados [1, pág. 5]. Se pueden interpretar como los estados iniciales que no conducen a estados finales asintóticamente libres (ya que quedan atrapados en el potencial), y de ahí que aparezca una singularidad en S

Como esta ecuación es funcionalmente igual que (3.37), podemos igualar los coeficientes de ambos sistemas y obtener

$$T = T' = \frac{\hbar^2 k}{\hbar^2 k + im\lambda}, \quad R = R' = -\frac{im\lambda}{\hbar^2 k + im\lambda} \tag{3.44}$$

Y usando la fórmula (3.40) que hemos calculado en la sección 3.4 tenemos

$$|T|^2 + |R|^2 = |T'|^2 + |R'|^2 = 1 \tag{3.45}$$

La matriz de *scattering* es entonces

$$S = \frac{\hbar^2 k}{\hbar^2 k + im\lambda} \begin{pmatrix} 1 & -im\lambda \\ -im\lambda & 1 \end{pmatrix} \tag{3.46}$$

Para dar completitud al problema podemos escribir finalmente la ecuación de onda estacionaria solución del problema cuando $E > 0$ como función de los coeficientes a y c y de la energía de la partícula incidente. La solución será por tanto

$$\begin{cases} \Psi^L(x,t) = \left(ae^{ikx} + (Ra + Tc)e^{-ikx}\right) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} & x < 0 \\ \Psi^R(x,t) = \left((Ta + Rc)e^{ikx} + ce^{-ikx}\right) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} & x > 0 \end{cases} \qquad \text{con} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{3.47}$$

Debemos tener en cuenta que R y T son función tanto de la energía incidente como de la fuerza del potencial delta ($R(E,\lambda)$, $T(E,\lambda)$)

Para la ecuación adimensional tenemos en cambio

$$\begin{cases} \Phi^L(X,T) = \left(ae^{ikX} + (Ra + Tc)e^{-ikX}\right) e^{-i\epsilon T} & X < 0 \\ \Phi^R(X,T) = \left((Ta + Rc)e^{ikX} + ce^{-ikX}\right) e^{-i\epsilon T} & X > 0 \end{cases} \qquad \text{con} \quad k = \sqrt{\epsilon} \tag{3.48}$$

y los coeficientes R y T serán

$$T = \frac{2k}{2k + i\lambda} \qquad R = -\frac{i\lambda}{2k + i\lambda} \tag{3.49}$$

Las soluciones obtenidas para $c = 0$, $a = 1$ y diversos valores de k se pueden ver en las figuras 3.2 y 3.3, distinguiendo en función del signo de la constante λ, siendo positivo para la primera figura y negativo en la segunda. Las ondas rojas representan la onda incidente (a), las azules la transmitida ($b = Ta$) y las verdes la reflejada ($d = Ra$). Como la función de onda es compleja no podemos representarla completa, así que vamos a tomar primero la parte imaginaria en $t = 0$ para que se anule la función en $x = 0$ y ver mejor así cuanto se transmite

Como se puede ver en la ecuación, el signo de λ solo influye en la fase de las ondas, pero los coeficientes T y R son iguales para λ y para $-\lambda$, por lo que la fracción de onda que se refleja y la fracción que se transmite es independiente del signo de esta. Sin embargo se diferencian en el caso en que $E < 0$, pues como veremos a continuación solo la delta negativa puede ligar un estado

Para ver la discontinuidad de la derivada de la función de onda vamos a representar la parte real de la función para $t = 0$ en la figura 3.4

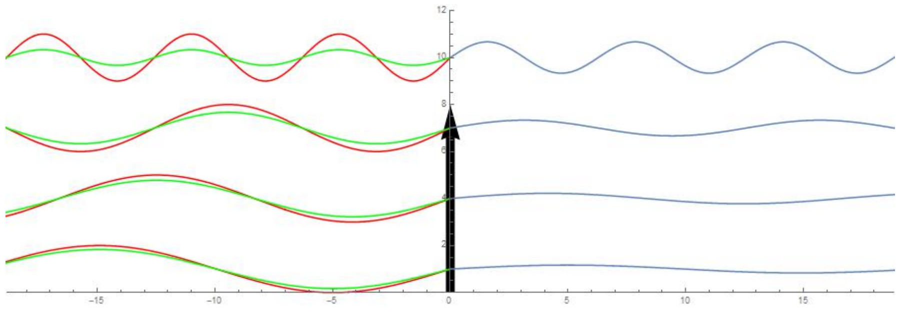


Figura 3.2: Comportamiento de algunas ondas planas al encontrarse con una delta de Dirac constante y positiva

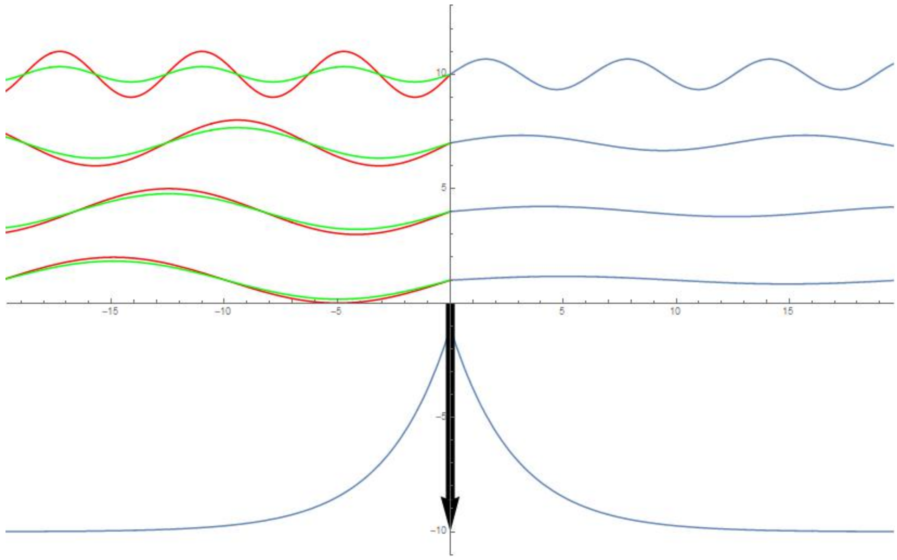


Figura 3.3: Comportamiento de algunas ondas planas al encontrarse con una delta de Dirac constante y negativa

Vemos que la función de onda es continua en el cero, ya que sumando los valores de cada una de las ondas planas tenemos $1-0{,}5=0{,}5$. La derivada en cambio tiene una discontinuidad, como era de esperar

Podemos representar también el módulo en la figura 3.5

Teniendo en cuenta que la condición de densidad de probabilidad nos dice que $|a|^2 = |b|^2 + |d|^2$ y teniendo en cuenta que $|b| = |d| = \sqrt{2}/2$ (que es aproximadamente 0,7, como se ve en la figura), se verifica que $1 = 2/4 + 2/4$

3.6. Solución para $E < 0$

Las condiciones que hemos sacado para el caso de energía negativa, que solo se diferencian de las del caso anterior en la última ecuación, son las siguientes

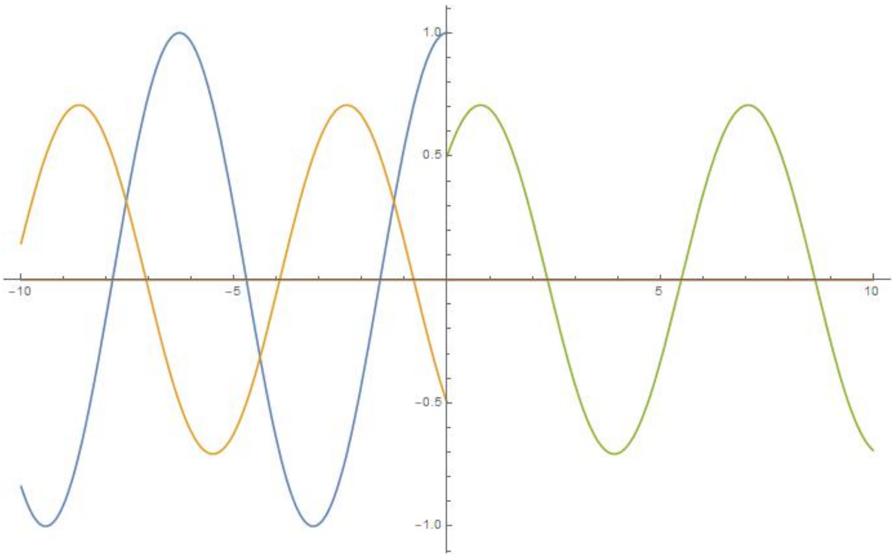


Figura 3.4: Parte real de la función de onda al incidir sobre la delta

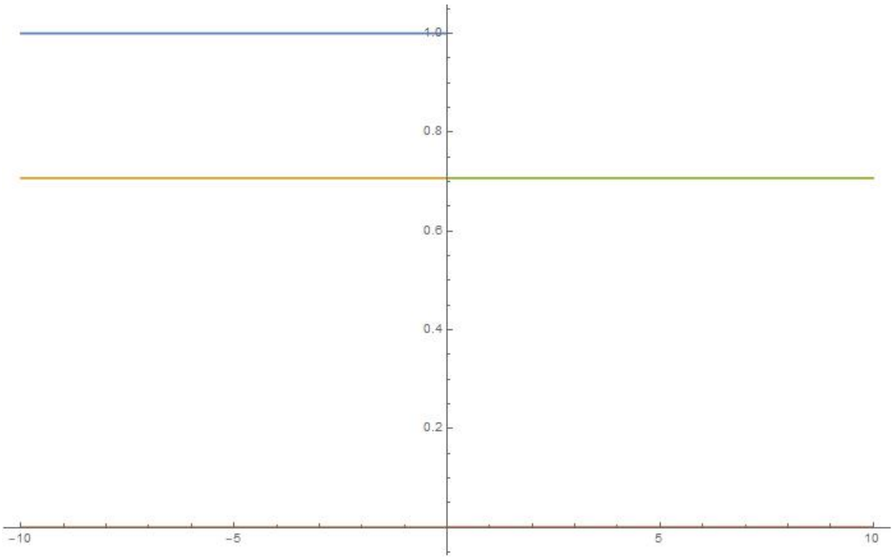


Figura 3.5: Módulo de la función de onda plana al incidir sobre la delta

$$\begin{cases} a + d = b + c \\ b - a = -i\dfrac{m\lambda}{\hbar^2 k}(a + d) \\ ad^* - a^*d = bc^* - b^*c \end{cases} \tag{3.50}$$

Si queremos eliminar las exponenciales crecientes, que son soluciones no físicas, debemos hacer $a = c = 0$ fijando así 4 grados de libertad. Sin embargo, tal como hemos discutido en la sección 3.4, el sistema (3.50) solo tiene 3 grados de libertad si los parámetros son nuestras únicas incógnitas

La solución a este problema consiste en convertir k en un parámetro más: ya no podremos fijar su valor de antemano, este estará determinado por el sistema de ecuaciones. Por lo tanto, a diferencia del caso $E > 0$, en el que teníamos infinitas soluciones, una para cada valor de k, y tres parámetros libres, ahora solo existe solución para un único k, y además todos los coeficientes del sistema están totalmente determinados

Despejando las ecuaciones (3.50) obtenemos

$$\begin{cases} b = d \\ \\ k = -i\dfrac{m\lambda}{\hbar^2}\dfrac{d}{b} = -i\dfrac{m\lambda}{\hbar^2} \end{cases} \tag{3.51}$$

Si $\lambda > 0$, entonces $k = -i|k|$ y las exponenciales de los términos b y d se vuelven exponenciales crecientes, así que tenemos que igualar $b = d = 0$ y la ecuación de onda es por tanto idénticamente nula. Esto nos permite concluir que no existen estados con $E < 0$ (estados ligados) para una delta positiva

Sin embargo, si $\lambda < 0$ tenemos $b \neq 0$, $d \neq 0$, y k debe tomar el valor

$$k = i\frac{m|\lambda|}{\hbar^2} \qquad E = -\frac{m^2\lambda^2}{\hbar^4} \tag{3.52}$$

Podemos ahora escribir la solución completa de la función de onda en el caso en el que conservamos los términos b y d (las soluciones que se alejan de la delta). Sería equivalente haber hecho $b = d = 0$ y haber conservado las soluciones en a y d, ya que el signo de k sería el contrario en ese caso, y la solución permanecería por lo tanto inalterada

La solución a trozos será

$$\begin{cases} \Psi^L(x,t) = b\exp(-ikx)h\exp(-i\frac{E}{\hbar}t) \qquad \text{si} \qquad x < 0 \\ \\ \Psi^R(x,t) = b\exp(ikx)h\exp(-i\frac{E}{\hbar}t) \qquad \text{si} \qquad x > 0 \end{cases} \tag{3.53}$$

que podemos reescribir en función de una nueva variable real y positiva, $\mathbf{k} = -ik$, $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^+$ como

$$\begin{cases} \Psi^L(x,t) = bh\exp(\mathbf{k}x)\exp(-i\frac{E}{\hbar}t) \qquad \text{si} \qquad x < 0 \\ \\ \Psi^R(x,t) = bh\exp(-\mathbf{k}x)\exp(-i\frac{E}{\hbar}t) \qquad \text{si} \qquad x > 0 \end{cases} \tag{3.54}$$

o, condensándolo en una sola fórmula

$$\Psi(x,t) = bhe^{-\mathbf{k}|x|}\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) \tag{3.55}$$

Se cumple que

$$\mathbf{k} = -\frac{m\lambda}{\hbar^2} = \frac{m|\lambda|}{\hbar^2} \qquad E = -\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} = -\frac{m^2\lambda^2}{\hbar^4} \tag{3.56}$$

Si en particular queremos que la ecuación de onda describa una única partícula ligada a la delta, la integral del módulo de la función de onda extendida a todo el espacio debe sumar 1. Si quisiéramos en cambio que describiera n partículas, la integral tendría que sumar n

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = n \longrightarrow |bh|^2 2\int_0^{\infty} e^{-2\mathbf{k}x} dx = n \longrightarrow |bh| = \sqrt{\mathbf{k}n} \tag{3.57}$$

y podemos elegir el factor de fase global como queramos, ya que no tiene sentido físico
La ecuación de ondas del problema es entonces, para una partícula

$$\Psi(x,t) = \sqrt{\mathbf{k}} e^{-\mathbf{k}|x|} \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) \tag{3.58}$$

y, escribiéndola explícitamente en función de la variable λ y las constantes físicas tendremos

$$\boxed{\Psi(x,t) = \sqrt{\frac{m|\lambda|}{\hbar^2}} \exp\left(-\frac{m|\lambda|}{\hbar^2}|x|\right) \exp\left(i\frac{m^2\lambda^2}{\hbar^5}t\right)} \tag{3.59}$$

En el caso adimensional tendremos $\mathbf{k} = |\lambda|/2$, $\epsilon = -\lambda^2/4$, y por lo tanto la función de onda será

$$\Phi(X,T) = \sqrt{\frac{|\lambda|}{2}} \exp\left(-\frac{|\lambda|}{2}|X|\right) \exp\left(i\frac{\lambda^2}{4}T\right) \tag{3.60}$$

Una representación de esta función de onda tomando la fase real se ve en la figura 3.6

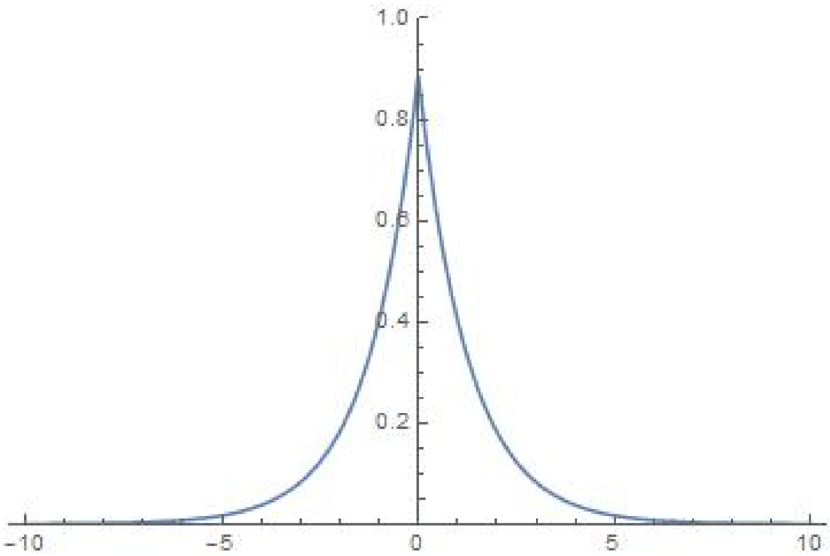


Figura 3.6: Estado ligado

Si volvemos ahora a la matriz de *scattering*, (3.46), vemos que esta matriz tiene un único polo, que ocurre justo cuando $k = -im\lambda/\hbar^2$. Este valor es el mismo que hemos obtenido despejando las ecuaciones (3.50), por lo que vemos que a partir de la matriz de *scattering* hubiéramos podido estudiar los estados ligados perfectamente simplemente buscando los polos de la matriz

Capítulo 4

Resolución de la ecuación en el caso de una delta independiente del tiempo. Paquete de ondas

En este caso nuestra función de onda es una combinación lineal de varias ondas planas como las dadas en (3.7), cada una con distinto vector de onda k, y ponderadas por un factor de forma $f(k)$

$$\Psi^L(x,t) = \int_0^\infty f(k)\left(a(k)e^{ikx} + d(k)e^{-ikx}\right)h(k)e^{-i\frac{E(k)}{\hbar}t}dk = \tag{4.1}$$

$$= \int_0^\infty \left(f_1(k)e^{ikx} + f_2(k)e^{-ikx}\right)e^{-i\frac{E(k)}{\hbar}t}dk \tag{4.2}$$

donde $f_1(k) = f(k)a(k)h(k)$ y $f_2(k) = f(k)d(k)h(k)$

La integral solo va de 0 a infinito porque ya hemos considerado explícitamente un término proporcional a una exponencial positiva y otro proporcional a una negativa. Si quisieramos que variara entre menos infinito e infinito valdría con considerar solo una de estas dos funciones, pero por comodidad nos restringimos al intervalo $(0,\infty)$ porque $E(k)$ es una función cuadrática de k, y en este intervalo es inyectiva mientras que no lo es entre menos infinito e infinito

Para la solución a la derecha de la delta tenemos, de forma equivalente

$$\Psi^R(x,t) = \int_0^\infty g(k)\left(b(k)e^{ikx} + b(k)e^{-ikx}\right)h(k)e^{-i\frac{E(k)}{\hbar}t}dk = \tag{4.3}$$

$$= \int_0^\infty \left(g_1(k)e^{ikx} + g_2(k)e^{-ikx}\right)e^{-i\frac{E(k)}{\hbar}t}dk \tag{4.4}$$

Podemos dibujar esquemáticamente la dirección de cada onda, igual que hacíamos cuando teníamos los coeficientes a, b, c y d, y obtenemos la figura 4.1

4.1. Continuidad

La continuidad impone ahora

$$\Psi^L(0,t) = \Psi^R(0,t) \quad \forall t \longrightarrow \int_0^\infty \left(f_1(k) + f_2(k)\right)e^{-i\frac{E(k)}{\hbar}t}dk = \int_0^\infty \left(g_1(k) + g_2(k)\right)e^{-i\frac{E(k)}{\hbar}t}dk \tag{4.5}$$

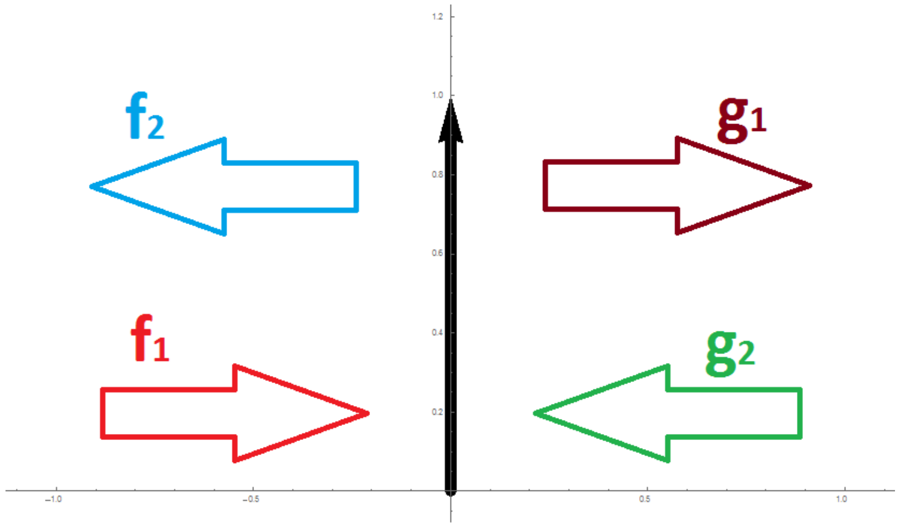


Figura 4.1: Dirección de desplazamiento de cada onda

Pasando ambos términos al mismo lado de la igualdad podemos incluir los dos dentro de la misma integral, y sacando factor común a la exponencial dependiente del tiempo tenemos

$$\Psi^L(0,t) = \Psi^R(0,t) \quad \forall t \longrightarrow \int_0^\infty \left[(f_1(k) + f_2(k)) - (g_1(k) + g_2(k))\right] e^{-i\frac{E(k)}{\hbar}t} dk = 0 \tag{4.6}$$

Vamos a llevar esta expresión a la forma de una transformada de Fourier, para lo cual debemos linealizar la exponencial respecto a la variable de integración. Como $E(k)/\hbar = \hbar k^2/2m$, llamando a esta variable u obtenemos $\hbar k/2m \; dk = du$, y la integral es

$$\int_0^\infty \left[(f_1(k(u)) + f_2(k(u))) - (g_1(k(u)) + g_2(k(u)))\right] \left(\frac{2m}{\hbar k(u)}\right) e^{-iut} du = 0 \tag{4.7}$$

Si la transformada de Fourier respecto de una variable u de una función $F(u)$ es igual a 0, entonces la función debe ser 0 en casi todas partes (es decir, para cualquier valor de u excepto en una cantidad numerable de conjuntos de medida nula), y podemos igualar a 0 el integrando de nuestra expresión

$$\left[(f_1(k(u)) + f_2(k(u))) - (g_1(k(u)) + g_2(k(u)))\right] \left(\frac{2m}{\hbar k(u)}\right) = 0 \tag{4.8}$$

Deshaciendo el cambio de variable de $k(u)$ a k (sin considerar de momento el caso en que $k = 0$ en el que el argumento diverge que tendremos que tratar por separado), obtenemos la condición

$$(f_1(k) + f_2(k)) - (g_1(k) + g_2(k)) = 0 \qquad \text{para} \qquad k > 0 \tag{4.9}$$

En el caso $k = 0$ podemos también obligar a que esta expresión sea nula, pero la solución con este vector de onda no tiene sentido físico (son soluciones constantes, y su densidad de corriente de probabilidad se comprueba que es nula por lo que no pueden describir ninguna partícula), así que podemos ignorarla y para el resto de valores obtenemos finalmente que para cada k

$$\boxed{f_1(k) + f_2(k) = g_1(k) + g_2(k)} \tag{4.10}$$

Esta ecuación nos dice que las amplitudes de las ondas de cada modo caracterizado por k deben conservarse separadamente

4.2. Derivabilidad

Hagamos ahora un tratamiento análogo al de la sección 3.2 para los paquetes de ondas dados por las ecuaciones (4.2) y (4.4)

Tenemos que hallar la derivada de la función total, y teniendo en cuenta la variable x es independiente de k podemos intercambiar de orden la derivada y la integral sin problema

Las derivadas de nuestras funciones son

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi^L(x,t)}{\partial x} &= \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial x}\left(f_1(k)e^{ikx} + f_2(k)e^{-ikx}\right) e^{-i\frac{E(k)}{\hbar}t} dk = \\ &= \int_0^\infty (ik)\left(f_1(k)e^{ikx} - f_2(k)e^{-ikx}\right) e^{-i\frac{E(k)}{\hbar}t} dk \end{aligned} \tag{4.11}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi^R(x,t)}{\partial x} &= \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial x}\left(g_1(k)e^{ikx} + g_2(k)e^{-ikx}\right) e^{-i\frac{E(k)}{\hbar}t} dk = \\ &= \int_0^\infty (ik)\left(g_1(k)e^{ikx} - g_2(k)e^{-ikx}\right) e^{-i\frac{E(k)}{\hbar}t} dk \end{aligned} \tag{4.12}$$

La condición de salto sobre la derivada es igual que para las ondas planas

$$\left.\frac{d\Psi^R(x,t)}{dx}\right|_{x=0^+} - \left.\frac{d\Psi^L(x,t)}{dx}\right|_{x=0^-} = \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\Psi_0(0,t) \tag{4.13}$$

Sustituyendo (4.11) y (4.11) en (4.13) para $x = 0$

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty ik\left[g_1(k) - g_2(k) - f_1(k) + f_2(k)\right] e^{-i\frac{E(k)}{\hbar}t} dk = \\ &\qquad = \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\int_0^\infty \left(f_1(k) + f_2(k)\right) e^{-i\frac{E(k)}{\hbar}t} dk \end{aligned} \tag{4.14}$$

Podemos meter el factor $2m\lambda/\hbar^2$ dentro de la integral, ya que este término no depende de k, y llevarlo todo al mismo lado de la igualdad

$$\int_0^\infty \left[ik\left(g_1(k) - g_2(k) - f_1(k) + f_2(k)\right) - \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\left(f_1(k) + f_2(k)\right)\right] e^{-i\frac{E(k)}{\hbar}t} dk = 0 \tag{4.15}$$

De nuevo vamos a transformar esta integral en una transformada de Fourier respecto de una variable $u = \hbar k^2/2m$ y cuyo diferencial es $du = \hbar k/m \, dk$

$$\int_0^\infty \left[i\left(\frac{m}{\hbar}\right)[g_1(k(u)) - g_2(k(u)) - f_1(k(u)) + f_2(k(u))] + \frac{2m^2\lambda}{\hbar^3 k(u)}[f_1(k(u)) + f_2(k(u))]\right] e^{-iut} du = 0 \tag{4.16}$$

Ignoramos otra vez el caso $k = 0$ y obtenemos la condición

$$i\left(\frac{m}{\hbar}\right)[g_1(k(u)) - g_2(k(u)) - f_1(k(u)) + f_2(k(u))] + \frac{2m^2\lambda}{\hbar^3 k(u)}[f_1(k(u)) + f_2(k(u))] = 0 \tag{4.17}$$

que, deshaciendo el cambio de variable y despejando nos lleva por último a

$$g_1(k) - g_2(k) - f_1(k) + f_2(k) = -i\frac{2m\lambda}{\hbar^2 k}(f_1(k) + f_2(k)) \tag{4.18}$$

Esta es una condición análoga a (3.14), que nos da las relaciones entre los coeficientes al atravesar la delta. Vemos que cada modo es independiente de los demás, y el paquete de ondas se puede estudiar separadamente en función de las ondas planas que lo componen

Usando la condición (4.10) podemos escribir

$$\boxed{g_1(k) - f_1(k) = -i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}(f_1(k) + f_2(k))} \tag{4.19}$$

4.3. Conservación de la densidad de probabilidad

Vamos a calcular $\rho(x,t) = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$ para la ecuación de onda a la izquierda del 0, dada por (4.2), y extrapolaremos este resultado para (4.4)

$$\begin{gathered}
\rho^L(x,t) = \Psi^{L^*}(x,t)\Psi^L(x,t) = \\
\left[\int_0^\infty \left(f_1^*(k')e^{-ik'^*x} + f_2^*(k')e^{ik'^*x}\right) e^{i\frac{E(k')}{\hbar}t} dk'\right]\left[\int_0^\infty \left(f_1(k)e^{ikx} + f_2(k)e^{-ikx}\right) e^{-i\frac{E(k)}{\hbar}t} dk\right] = \\
= \int_0^\infty \int_0^\infty \Big(f_1(k)f_1^*(k')e^{i(k-k'^*)x} + f_2(k)f_2^*(k')e^{-i(k-k'^*)x} + \\
+ f_1(k)f_2^*(k')e^{i(k+k'^*)x} + f_1^*(k')f_2(k)e^{-i(k+k'^*)x}\Big) e^{i\frac{E(k')-E(k)}{\hbar}t} dk dk'
\end{gathered} \tag{4.20}$$

Podemos ver la diferencia con el caso de una onda plana, ya que en este caso intervienen dos ínidces distintos, k y k', y distinguir el carácter real o imaginario de estos no va a simplificar ahora el resultado (de hecho van a tener carácter distinto en algunos factores)

Sin embargo podemos hallar su derivada temporal fácilmente, obteniendo la ecuación

$$\begin{gathered}
\frac{\partial \rho^L(x,t)}{\partial t} = \int_0^\infty \int_0^\infty i\frac{E(k') - E(k)}{\hbar}\Big(f_1(k)f_1^*(k')e^{i(k-k'^*)x} + f_2(k)f_2^*(k')e^{-i(k-k'^*)x} + \\
+ f_1(k)f_2^*(k')e^{i(k+k'^*)x} + f_1^*(k')f_2(k)e^{-i(k+k'^*)x}\Big) e^{i\frac{E(k')-E(k)}{\hbar}t} dk dk'
\end{gathered} \tag{4.21}$$

Calculemos ahora $J^L(x,t)$ a partir de (3.20)

$$J^L(x,t) =$$
$$= \frac{\hbar}{2mi}\left(\left[\int_0^\infty \left(f_1^*(k')e^{-ik'^*x} + f_2^*(k')e^{ik'^*x}\right)e^{i\frac{E(k')}{\hbar}t}dk'\right]\left[\int_0^\infty (ik)\left(f_1(k)e^{ikx} - f_2(k)e^{-ikx}\right)e^{-i\frac{E(k)}{\hbar}t}dk\right] -\right.$$
$$\left. - \left[\int_0^\infty \left(f_1(k)e^{ikx} + f_2(k)e^{-ikx}\right)e^{-i\frac{E(k)}{\hbar}t}dk\right]\left[\int_0^\infty (-ik'^*)\left(f_1^*(k')e^{-ik'^*x} - f_2^*(k')e^{ik'^*x}\right)e^{i\frac{E(k')}{\hbar}t}dk'\right]\right) =$$
$$= \frac{\hbar}{2mi}\int_0^\infty\int_0^\infty \left[(ik)\left(f_1(k)f_1^*(k')e^{i(k-k'^*)x} - f_2(k)f_2^*(k')e^{-i(k-k'^*)x} + f_1(k)f_2^*(k')e^{i(k+k'^*)x} -\right.\right.$$
$$\left. - f_1^*(k')f_2(k)e^{-i(k+k'^*)x}\right) + (ik'^*)\left(f_1(k)f_1^*(k')e^{i(k-k'^*)x} - f_2(k)f_2^*(k')e^{-i(k-k'^*)x} -\right.$$
$$\left.\left. - f_1(k)f_2^*(k')e^{i(k+k'^*)x} + f_1^*(k')f_2(k)e^{-i(k+k'^*)x}\right)\right]e^{i\frac{E(k')-E(k)}{\hbar}t}dkdk' \tag{4.22}$$

Despejando de esta última ecuación podemos escribir

$$\begin{aligned} J^L(x,t) = \frac{\hbar}{2m}\int_0^\infty\int_0^\infty &\left[(k+k'^*)\left(f_1(k)f_1^*(k')e^{i(k-k'^*)x} - f_2(k)f_2^*(k')e^{-i(k-k'^*)x}\right)\right. \\ &\left.+(k-k'^*)\left(f_1(k)f_2^*(k')e^{i(k+k'^*)x} - f_1^*(k')f_2(k)e^{-i(k+k'^*)x}\right)\right]e^{i\frac{E(k')-E(k)}{\hbar}t}dkdk' \end{aligned} \tag{4.23}$$

Ahora vamos a calcular la derivada parcial de $J^L(x,t)$ respecto de x, con lo que obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial J^L(x,t)}{\partial x} = \frac{\hbar}{2m}\int_0^\infty\int_0^\infty & i(k+k'^*)(k-k'^*)\left[\left(f_1(k)f_1^*(k')e^{i(k-k'^*)x} + f_2(k)f_2^*(k')e^{-i(k-k'^*)x} +\right.\right. \\ &\left.\left.+f_1(k)f_2^*(k')e^{i(k+k'^*)x} + f_1^*(k')f_2(k)e^{-i(k+k'^*)x}\right)\right]e^{i\frac{E(k')-E(k)}{\hbar}t}dkdk' \end{aligned} \tag{4.24}$$

Una vez que hemos calculado explícitamente todos los términos que aparecen en la ecuación de continuidad (3.17), podemos unirlos para comprobar si se verifica

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty\int_0^\infty \left(i\frac{E(k')-E(k)}{\hbar} + i\frac{\hbar}{2m}(k+k'^*)(k-k'^*)\right)\left[\left(f_1(k)f_1^*(k')e^{i(k-k'^*)x} +\right.\right. \\ &\left.\left.+f_2(k)f_2^*(k')e^{-i(k-k'^*)x} + f_1(k)f_2^*(k')e^{i(k+k'^*)x} + f_1^*(k')f_2(k)e^{-i(k+k'^*)x}\right)\right]e^{i\frac{E(k')-E(k)}{\hbar}t}dkdk' \end{aligned} \tag{4.25}$$

Como

$$(k+k'^*)(k-k'^*) = k^2 - k'^{*2} = 2m\frac{E(k)-E(k')}{\hbar^2} \tag{4.26}$$

la ecuación se anula idénticamente en el semieje $x<0$

Para el semieje positivo la ecuación también se verifica, como se puede comprobar simplemente cambiando f_1, f_2 por g_1, g_2 donde corresponda

Finalmente, en el 0 debemos comprobar que la función $\rho(x,t)$ sea continua, ya que $\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$ debe ser continua por serlo $\Psi(x,t)$

Además, escribiendo la ecuación de continuidad en el cero llegamos a la condición

$$\frac{\partial \rho^L(0,t)}{\partial t} + \frac{\partial J^L(0,t)}{\partial x} = \frac{\partial \rho^R(0,t)}{\partial t} + \frac{\partial J^R(0,t)}{\partial x} = 0 \longrightarrow \tag{4.27}$$

$$\longrightarrow \frac{\partial(\rho^L(0,t) - \rho^R(0,t))}{\partial t} = \frac{\partial(J^R(0,t) - J^L(0,t))}{\partial x} \tag{4.28}$$

Y, por ser $\rho(x,t)$ continua, ambos lados de la igualdad deben anularse idénticamente. Esto nos lleva a que

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty \int_0^\infty \left[f_1(k)f_1^*(k') + f_2(k)f_2^*(k') + f_1(k)f_2^*(k') + f_1^*(k')f_2(k)\right] e^{i\frac{E(k')-E(k)}{\hbar}t} dk\, dk' = \\ =&\int_0^\infty \int_0^\infty \left[g_1(k)g_1^*(k') + g_2(k)g_2^*(k') + g_1(k)g_2^*(k') + g_1^*(k')g_2(k)\right] e^{i\frac{E(k')-E(k)}{\hbar}t} dk\, dk' \end{aligned} \tag{4.29}$$

Para poder resolver esta integral necesitamos hacer un cambio de variable, ya que el exponente depende tanto de k como de k', y habrá diversas combinaciones de estos que den como resultado la misma constante, y por lo tanto contribuirán conjuntamente a la hora de anular el término que acompaña a la exponencial. Definimos una nueva variable $u = \frac{E(k')-E(k)}{\hbar} = \frac{\hbar(k'^2-k^2)}{2m}$, y hacemos el cambio de variable $(k,k') \to (k,u)$. Para poder hacer el cambio de variable de una integral en dos variables debemos calcular el jacobiano de estas, que se define como

$$J(k,u) = \begin{vmatrix} \frac{\partial k}{\partial k} & \frac{\partial k}{\partial u} \\ \frac{\partial k'}{\partial k} & \frac{\partial k'}{\partial u} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & -\frac{m}{\hbar k} \\ 0 & \frac{m}{\hbar k'} \end{vmatrix} = \frac{m}{\hbar k'} \tag{4.30}$$

por lo que la condición de conservación de la probabilidad se puede escribir como

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty \int_0^\infty \left(\frac{m}{\hbar k'(u)}\right) \left[f_1(k)f_1^*(k'(u)) + f_2(k)f_2^*(k'(u)) + f_1(k)f_2^*(k'(u)) + f_1^*(k'(u))f_2(k)\right] e^{iut} dk\, du = \\ =&\int_0^\infty \int_0^\infty \left(\frac{m}{\hbar k'(u)}\right) \left[g_1(k)g_1^*(k'(u)) + g_2(k)g_2^*(k'(u)) + g_1(k)g_2^*(k'(u)) + g_1^*(k'(u))g_2(k)\right] e^{iut} dk\, du \end{aligned} \tag{4.31}$$

Ahora ya podemos igualar los integrandos de ambas integrales, ya que serán iguales excepto en un conjunto de puntos de medida nula. Tenemos entonces

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty \frac{1}{k'(u)} \left[f_1(k)f_1^*(k'(u)) + f_2(k)f_2^*(k'(u)) + f_1(k)f_2^*(k'(u)) + f_1^*(k'(u))f_2(k)\right] dk = \\ =&\int_0^\infty \frac{1}{k'(u)} \left[g_1(k)g_1^*(k'(u)) + g_2(k)g_2^*(k'(u)) + g_1(k)g_2^*(k'(u)) + g_1^*(k'(u))g_2(k)\right] dk \end{aligned} \tag{4.32}$$

Como la variable u es $u = \sqrt{k^2 - \frac{2mu}{\hbar}}$, que depende de k y está dentro de una integral respecto de k, en este caso no podemos ignorarla y volver a la variable muda k' sino que tenemos que trabajar con u. Las ecuaciones que obtenemos (una para cada posible valor de u) son

$$\begin{aligned}
&\boxed{\int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{k^2-\frac{2mu}{\hbar}}}\left[f_1(k)f_1^*\left(\sqrt{k^2-\frac{2mu}{\hbar}}\right)+f_2(k)f_2^*\left(\sqrt{k^2-\frac{2mu}{\hbar}}\right)+\right.}\\
&\qquad\boxed{\left.+f_1(k)f_2^*\left(\sqrt{k^2-\frac{2mu}{\hbar}}\right)+f_1^*\left(\sqrt{k^2-\frac{2mu}{\hbar}}\right)f_2(k)\right]dk=}\\
&\boxed{=\int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{k^2-\frac{2mu}{\hbar}}}\left[g_1(k)g_1^*\left(\sqrt{k^2-\frac{2mu}{\hbar}}\right)+g_2(k)g_2^*\left(\sqrt{k^2-\frac{2mu}{\hbar}}\right)+\right.}\\
&\qquad\boxed{\left.+g_1(k)g_2^*\left(\sqrt{k^2-\frac{2mu}{\hbar}}\right)+g_1^*\left(\sqrt{k^2-\frac{2mu}{\hbar}}\right)g_2(k)\right]dk}
\end{aligned}\tag{4.33}$$

4.4. Solución general

De nuevo tenemos tres condiciones independientes, al igual que en el caso de la onda plana estudiado en el capítulo 3, aunque en este caso la tercera condición es una ecuación integral. La ecuación de continuidad y la condición de salto recordamos que son

$$\begin{cases} f_1(k)+f_2(k)=g_1(k)+g_2(k) \\ \\ g_1(k)-f_1(k)=-i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}\left(f_1(k)+f_2(k)\right) \end{cases}\tag{4.34}$$

A partir de estas expresiones obtenemos $f_2(k)$ y $g_1(k)$ como función de $f_1(k)$ y $g_2(k)$

$$\begin{cases} f_2(k)=-\dfrac{i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}{1+i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}f_1(k)+\dfrac{1}{1+i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}g_2(k) \\ \\ g_1(k)=\dfrac{1}{1+i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}f_1(k)-\dfrac{i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}{1+i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}g_2(k) \end{cases}\tag{4.35}$$

Y estas ecuaciones nos determinan la solución completa del problema a partir de las condiciones iniciales que le metamos

En el caso adimensional tendremos las relaciones

$$\begin{cases} f_2(k)=-\dfrac{i\lambda}{2k+i\lambda}f_1(k)+\dfrac{2k}{2k+i\lambda}g_2(k) \\ \\ g_1(k)=\dfrac{2k}{2k+i\lambda}f_1(k)-\dfrac{i\lambda}{2k+i\lambda}g_2(k) \end{cases}\tag{4.36}$$

La tercera relación es la ecuación integral obtenida en (4.33) al imponer que el módulo de la función de onda fuera continuo en $x=0$

$$
\begin{aligned}
&\int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{k^2-\frac{2mu}{\hbar}}}\left[f_1(k)f_1^*\left(\sqrt{k^2-\frac{2mu}{\hbar}}\right)+f_2(k)f_2^*\left(\sqrt{k^2-\frac{2mu}{\hbar}}\right)+\right.\\
&\left.+f_1(k)f_2^*\left(\sqrt{k^2-\frac{2mu}{\hbar}}\right)+f_1^*\left(\sqrt{k^2-\frac{2mu}{\hbar}}\right)f_2(k)\right]dk=\\
&=\int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{k^2-\frac{2mu}{\hbar}}}\left[g_1(k)g_1^*\left(\sqrt{k^2-\frac{2mu}{\hbar}}\right)+g_2(k)g_2^*\left(\sqrt{k^2-\frac{2mu}{\hbar}}\right)+\right.\\
&\left.+g_1(k)g_2^*\left(\sqrt{k^2-\frac{2mu}{\hbar}}\right)+g_1^*\left(\sqrt{k^2-\frac{2mu}{\hbar}}\right)g_2(k)\right]dk
\end{aligned}
\tag{4.37}
$$

4.5. Matriz de *scattering*

Podemos de nuevo definir una matriz que relacione los estados asintóticamente libres que entran con los que salen

La diferencia es que ahora no tenemos solo cuatro estados para caracterizar el sistema, a, b, c y d, como teníamos para las ondas planas, sino que cada solución para un cierto k lleva asociados cuatro parámetros $f_1(k), f_2(k), g_1(k)$ y $g_2(k)$, y tenemos infinitos posibles valores de k. Por lo tanto para definir un vector que describa el paquete de ondas necesitamos que este tenga dimensión infinita, e infinita continua, además

La matriz S tiene que ser por tanto una matriz infinita cuadrada (en el sentido en que sus filas y columnas se puedan poner en biyección 1 a 1), indexada por dos índices k y k', que varían entre cero e infinito

$$
\begin{pmatrix} \vdots \\ g_1(k) \\ \vdots \\ f_2(k) \\ \vdots \end{pmatrix}
=
\left(\begin{array}{ccc|ccc}
 & \vdots & & & \vdots & \\
\cdots & T(k,k') & \cdots & \cdots & R'(k,k') & \cdots \\
 & \vdots & & & \vdots & \\
\hline
 & \vdots & & & \vdots & \\
\cdots & R(k,k') & \cdots & \cdots & T'(k,k') & \cdots \\
 & \vdots & & & \vdots &
\end{array}\right)
\begin{pmatrix} \vdots \\ f_1(k') \\ \vdots \\ g_2(k') \\ \vdots \end{pmatrix}
\tag{4.38}
$$

Vemos que la matriz está dividida en cuatro submatrices que hemos denominado T, R', T' y R, en analogía con la situación que teníamos para las ondas planas

Ya que las ecuaciones que hemos obtenido relacionan solo coeficientes con el mismo valor de k, la matriz S solo tendrá elementos no nulos en las posiciones en las que $k = k'$. Es decir, cada una de las cuatro matrices es diagonal

Además, para cada k la relación que existe entre los coeficientes es la misma que tenemos para una onda plana caracterizada por k, por lo que podemos reescribir las matrices en función de estos parámetros (que denotaremos $T(k), R(k)$..., aunque no debemos olvidar que estos coeficientes dependen también de la fuerza del potencial delta, λ)

Las matrices de *scattering* de los paquetes de onda las podemos escribir entonces en función de los coeficientes para las ondas planas como

$$
[T]_{k,k'} = T(k)\delta_{k,k'}, \quad [R]_{k,k'} = R(k)\delta_{k,k'}, \quad [T']_{k,k'} = T'(k)\delta_{k,k'}, \quad [R']_{k,k'} = R'(k)\delta_{k,k'} \tag{4.39}
$$

Capítulo 5

Resolución de la ecuación en el caso de una delta dependiente del tiempo

Vamos a resolver ahora el caso en el que la delta va multiplicada por un factor $a(t)$ que depende del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+a(t)\delta(x)\Psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \tag{5.1}$$

Para intentar aplicar un método de resolución similar al usado en el caso independiente del tiempo vamos a dividir el espacio total en zonas donde la ecuación diferencial sea separable, resolveremos la ecuación diferencial en cada una de estas zonas tratándolo como un problema de condiciones de frontera. En nuestro caso tendríamos que aplicar las condiciones de Cauchy[1], que nos dan una condición para la función de onda y otra para su derivada, en $x = 0$. La condición que impondremos a la ecuación de onda es que las soluciones sean iguales a la misma función en $x = 0$, o lo que es lo mismo, que la función sea continua en ese punto, mientras que la condición que aplicaremos para sus derivadas será la condición de salto dada por la delta

En nuestro caso dividiremos el problema en dos regiones respecto al eje x (sin preocuparnos por la coordenada temporal por ahora), y resolveremos la ecuación cuando $x < 0$ y cuando $x > 0$, aplicando después las condiciones de frontera de Cauchy en $x = 0$

Cuando $x \neq 0$ la ecuación diferencial en derivadas parciales es separable en sus partes espaciales y temporales, y por lo tanto se pueden obtener dos ecuaciones diferenciales ordinarias igualadas a una cierta constante, que llamaremos μ. En el caso independiente del tiempo la constante es la misma en ambos semiejes, ya que el potencial es separable en todo el espacio, y además esta constante se identifica con la energía de la partícula, E. Esto no será así para una dependencia arbitraria de la delta con el tiempo ya que al sustituir en la ecuación diferencial una onda plana determinada por la misma constante μ a los dos lados se comprueba que solo puede cumplir la ecuación en el caso $a(t) = \text{cte}$, es decir, en el caso estacionario. La razón de que no podamos verificar la solución con una onda plana a cada lado se debe a que para verificar las condiciones de frontera en $x = 0$ necesitamos plantear la solución completa de la ecuación de onda en cada lado, y no nos vale con igualar dos soluciones particulares como hacíamos en el caso estacionario

Procedamos a resolver la ecuación restringida a cada uno de los dominios, $\mathbb{R}^+$ y $\mathbb{R}^-$

Al separar la ecuación (5.1), en cada una de las dos zonas el potencial $V(x,t)$ toma el valor $V = 0$ tanto para $x < 0$ como para $x > 0$, por lo que la solución es factorizable en esos

[1] Las condiciones de Cauchy son una combinación de las condiciones de frontera de Neumann y de las de Dirichlet [6]

dominios. Para $x = 0$ la dependencia espacial desaparece y el potencial solo dependerá del tiempo (además, es un subconjunto de contenido cero respecto a la recta real)

$$\begin{aligned}
&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_1(x,t)}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\Psi_1(x,t)}{\partial t} && x<0 \\
&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_0(0,t)}{\partial x^2} + a(t)\delta(0)\Psi_0(0,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi_0(0,t)}{\partial t} && x=0 \\
&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_2(x,t)}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\Psi_2(x,t)}{\partial t} && x>0
\end{aligned} \tag{5.2}$$

Por lo tanto las ecuaciones diferenciales a cada lado las podemos igualar a una constante y factorizar las soluciones como $\Psi_1(x,t) = \psi_1(x)T_1(t)$ y $\Psi_2(x,t) = \psi_2(x)T_2(t)$

$$x<0 \begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{1}{\psi_1(x)}\dfrac{\partial^2\psi_1(x)}{\partial x^2} = \mu_1 \\ \\ i\hbar\dfrac{1}{T_1(t)}\dfrac{\partial T_1(t)}{\partial t} = \mu_1 \end{cases} \tag{5.3}$$

$$x>0 \begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{1}{\psi_2(x)}\dfrac{\partial^2\psi_2(x)}{\partial x^2} = \mu_2 \\ \\ i\hbar\dfrac{1}{T_2(t)}\dfrac{\partial T_2(t)}{\partial t} = \mu_2 \end{cases} \tag{5.4}$$

Cada una de las dos constantes, μ_1 y μ_2, nos sale después de restringirnos a cada una de las zonas (el semieje negativo y el semieje positivo respectivamente), por lo que se justifica que puedan ser distintas, a diferencia del caso estacionario

Resolvamos ahora las ecuaciones diferenciales para un valor arbitrario de la constante. Teniendo en cuenta que la solución espacial es la función de onda de una partícula libre y la temporal es una exponencial compleja, las soluciones a cada lado son

$$x<0 \begin{cases} \psi_1(x) = A_1e^{ik_1x} + B_1e^{-ik_1x} \\ \\ T_1(t) = C_1e^{-i\frac{\mu_1}{\hbar}t} \end{cases} \quad \text{con} \quad k_1^2 = \frac{2m\mu_1}{\hbar^2} \tag{5.5}$$

y

$$x>0 \begin{cases} \psi_2(x) = A_2e^{ik_2x} + B_2e^{-ik_2x} \\ \\ T_2(t) = C_2e^{-i\frac{\mu_2}{\hbar}t} \end{cases} \quad \text{con} \quad k_2^2 = \frac{2m\mu_2}{\hbar^2} \tag{5.6}$$

Debemos plantear en cada semieje la solución general de la ecuación, dada por la integral ponderada de las ondas planas extendida a todos los posibles valores de μ_1 y μ_2 respectivamente (equivalentemente los podemos indexar a través del valor de k, que está relacionado con estas constantes, y hacer en su lugar la integral en k). Llamaremos a las soluciones con un cierto k *canales de scattering* caracterizados por ese vector de onda

La razón física de plantear las soluciones generales a cada lado de la delta en lugar de restringirnos a soluciones particulares, como en el caso estacionario, se debe a que en ese caso atravesar la delta no conduce en ningún caso a una variación del canal por el que se dispersa la onda (se trata de *scattering elástico*, la energía se conserva al atravesar el potencial). Por eso en el caso estacionario podemos aplicar todas las condiciones separadamente a cada canal (identificado por $E(k)$ o por k), como obtuvimos en el capítulo 4 al estudiar el comportamiento de un paquete de ondas

En el caso de la delta con dependencia temporal, una onda que viajaba por el canal k_1 puede ser dispersada a otro canal k_2, tanto al reflejarse como al transmitirse (tendremos *scattering inelástico* por lo tanto). Es por esto por lo que hace falta plantear las soluciones completas a ambos lados del 0, porque se darán cambios de canal

Las soluciones generales en cada lado son

$$\Psi_1(x,t) = \int_0^\infty \left(A_1(k)e^{ikx} + B_1(k)e^{-ikx}\right) C_1(k)e^{-i\frac{\mu_1(k)}{\hbar}t}dk = \tag{5.7}$$

$$= \int_0^\infty \left(f_1(k)e^{ikx} + f_2(k)e^{-ikx}\right) e^{-i\frac{\mu_1(k)}{\hbar}t}dk \tag{5.8}$$

$$\Psi_2(x,t) = \int_0^\infty \left(A_2(k)e^{ikx} + B_2(k)e^{-ikx}\right) C_2(k)e^{-i\frac{\mu_2(k)}{\hbar}t}dk = \tag{5.9}$$

$$= \int_0^\infty \left(g_1(k)e^{ikx} + g_2(k)e^{-ikx}\right) e^{-i\frac{\mu_2(k)}{\hbar}t}dk \tag{5.10}$$

De nuevo podemos representar las direcciones de las ondas involucradas, como se ve en la figura 5.1

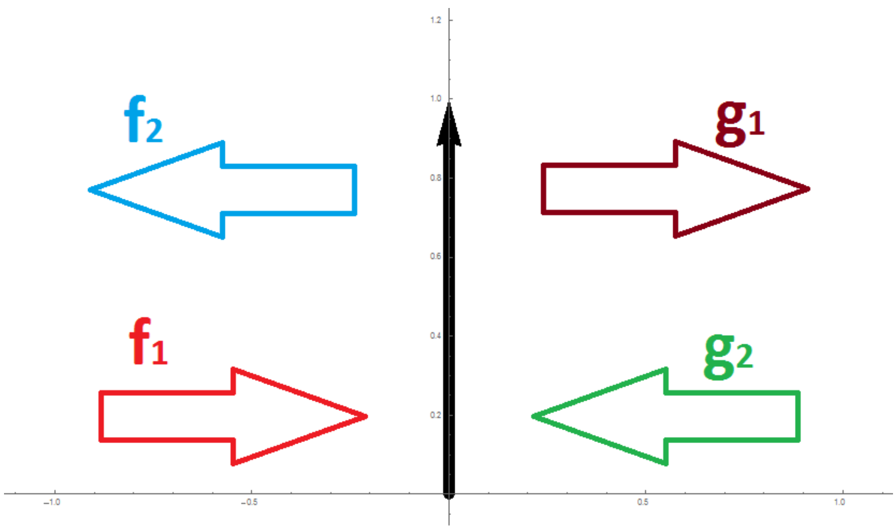


Figura 5.1: Dirección de desplazamiento de cada onda

5.1. Continuidad

El siguiente paso debe ser aplicar las condiciones de continuidad y de salto en la primera derivada a las funciones $\Psi^L(x,t)$ y $\Psi^R(x,t)$ que acabamos de construir, en particular en el punto $x = 0$ deben tomar el mismo valor para todo t. Vemos que la dependencia de μ_1 y μ_2 con k es la misma, por lo que podemos abandonar el subíndice y usar una única variable $\mu(k) = k^2\hbar^2/2m$

$$\Psi_1(0,t) = \Psi_2(0,t) \quad \forall t \longrightarrow \int_0^{\infty} \left[(f_1(k,t) + f_2(k,t)) - (g_1(k,t) + g_2(k,t))\right] e^{-i\frac{k^2\hbar}{2m}t} dk = 0 \tag{5.11}$$

La diferencia con el caso de los paquetes de onda incidiendo sobre una delta estacionaria estudiado en la sección 4.1 es que ahora los parámetros dependen del instante de tiempo t considerado y la conversión de la integral en una transformada de Fourier ya no es inmediata, ya que la variable t no puede aparecer en el argumento de la transformada

Podemos sortear este problema reescribiendo los coeficientes f, g como una transformada de Fourier, eliminando así la dependencia explícita con el tiempo, concretamente necesitaremos la transformada inversa

Teniendo en cuenta que la transformada inversa se define como

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \overline{f(p)} e^{ipt} dp \tag{5.12}$$

Como la integral depende de una variable muda p que recorre toda la recta real, podremos agrupar todos los términos bajo una única integral

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} \Bigg[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \overline{f_1}(k,p) e^{ipt} dp + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \overline{f_2}(k,p) e^{ipt} dp - \\ - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \overline{g_1}(k,p) e^{ipt} dp - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \overline{g_2}(k,p) e^{ipt} dp \Bigg] e^{-i\frac{k^2\hbar}{2m}t} dk = 0 \end{aligned} \tag{5.13}$$

$$\int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\overline{f_1}(k,p) + \overline{f_2}(k,p) - \overline{g_1}(k,p) - \overline{g_2}(k,p)\right] \; e^{i\left(p - \frac{k^2\hbar}{2m}\right)t} dp \, dk = 0 \tag{5.14}$$

Ahora ya hemos conseguido eliminar la dependencia temporal de cada parámetro, y se tendrán relaciones entre los parámetros para los que $p - k^2\hbar/2m$ sean igual a la misma constante. Podemos hacer un cambio de variable para operar

Definimos la variable $u = p - k^2\hbar/2m$, y pasamos de la integral doble en las variables (k,p) a la integral sobre las variables (k,u). Para ello necesitamos el determinante jacobiano $(k,p) \to (k,u)$

$$J(k,u) = \begin{vmatrix} \frac{\partial k}{\partial k} & \frac{\partial k}{\partial u} \\ \frac{\partial p}{\partial k} & \frac{\partial p}{\partial u} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{2} \frac{-1}{\sqrt{p-u}} \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = 1 \tag{5.15}$$

La integral es entonces

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \left[\overline{f_1}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)+\overline{f_2}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)-\overline{g_1}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)-\overline{g_2}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)\right] e^{iut}dudk=0 \tag{5.16}$$

Ahora ya podemos afirmar que cada componente de esta integral se debe anular separadamente para cada u fijo, y tenemos finalmente la condición para que la función de onda sea continua

$$\int_0^\infty \left[\overline{f_1}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)+\overline{f_2}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)-\overline{g_1}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)-\overline{g_2}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)\right] dk=0 \tag{5.17}$$

Es decir, la suma de los coeficientes de Fourier con una cierta relación entre el parámetro p del desarrollo de Fourier y el vector de onda k extendida a todos los k debe ser igual a ambos lados de la delta

Reescribimos finalmente la condición como

$$\boxed{\int_0^\infty \overline{f_1}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)+\overline{f_2}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right) dk=\int_0^\infty \overline{g_1}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)+\overline{g_2}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right) dk} \tag{5.18}$$

La diferencia principal con el caso de la delta estacionaria es que aquí los modos con un cierto k no se conservan separadamente. Tendremos mezcla de modos con varias energías al cruzar la delta, o lo que es lo mismo, un modo de una energía caracterizada por k_1 puede tener una energía distinta, dada por k_2, al cruzar la delta

Es la amplitud total la que se conserva, y no la amplitud de cada modo

5.2. Derivabilidad

Veamos ahora qué condiciones nos imponen ahora las derivadas sobre las funciones $\Psi(x,t)$. Igual que en el caso estacionario, al calcular la derivada podemos intercambiar el orden de la derivada respecto de x y de la integral respecto de k, ya que son independientes

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Psi_1(x,t)}{\partial x} &= \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial x}\left(f_1(k,t)e^{ikx}+f_2(k,t)e^{-ikx}\right)e^{-i\frac{\mu(k)}{\hbar}t}dk= \\ &= \int_0^\infty (ik)\left(f_1(k,t)e^{ikx}-f_2(k,t)e^{-ikx}\right)e^{-i\frac{\mu(k)}{\hbar}t}dk\end{aligned} \tag{5.19}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Psi_2(x,t)}{\partial x} &= \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial x}\left(g_1(k,t)e^{ikx}+g_2(k,t)e^{-ikx}\right)e^{-i\frac{\mu(k)}{\hbar}t}dk= \\ &= \int_0^\infty (ik)\left(g_1(k,t)e^{ikx}-g_2(k,t)e^{-ikx}\right)e^{-i\frac{\mu(k)}{\hbar}t}dk\end{aligned} \tag{5.20}$$

La condición de salto sobre la derivada se obtiene igual que en el caso estacionario, integrando la ecuación diferencial respecto de x, y se obtiene

$$\left.\frac{d\Psi_2(x,t)}{dx}\right|_{x=0^+} - \left.\frac{d\Psi_1(x,t)}{dx}\right|_{x=0^-} = \frac{2ma(t)}{\hbar^2}\Psi_0(0,t) \tag{5.21}$$

Vemos que la única diferencia con (4.13) es que ahora $a(t)$ es una función del tiempo en vez de una constante

Sustituyendo, obtenemos

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty ik\left[(g_1(k,t) - g_2(k,t) - f_1(k,t) + f_2(k,t)\right] e^{-i\frac{k^2\hbar}{2m}t} dk = \\ &\qquad = \frac{2ma(t)}{\hbar^2}\int_0^\infty \left(f_1(k,t) + f_2(k,t)\right) e^{-i\frac{k^2\hbar}{2m}t} dk \end{aligned} \tag{5.22}$$

De nuevo queremos hacer un proceso análogo al llevado a cabo en 4.2, pero para poder tratar las dependencias temporales de los coeficientes y de $a(t)$ haremos un desarrollo de Fourier como hemos hecho en la sección 5.1

La diferencia es que ahora necesitamos nombres distintos para la variable de Fourier de los coeficientes y la de $a(t)$, ya que están multiplicados y tenemos que operar con dos variables independientes

Definamos entonces $a(t)$ como

$$a(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^\infty \bar{a}(k')e^{ik't}dk' \tag{5.23}$$

La ecuación (5.22) la podemos reescribir entonces en función de los coeficientes de Fourier de cada parámetro

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty ik\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left[\int_{-\infty}^\infty \overline{g_1}(k,p)e^{ipt}dp - \int_{-\infty}^\infty \overline{g_2}(k,p)e^{ipt}dp - \right.\\ &\left. - \int_{-\infty}^\infty \overline{f_1}(k,p)e^{ipt}dp + \int_{-\infty}^\infty \overline{f_2}(k,p)e^{ipt}dp\right] e^{-i\frac{k^2\hbar}{2m}t}dk = \\ = \frac{2m}{\hbar^2}&\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^\infty \bar{a}(k')e^{ik't}dk'\right]\int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left[\int_{-\infty}^\infty \overline{f_1}(k,p)e^{ipt}dp + \int_{-\infty}^\infty \overline{f_2}(k,p)e^{ipt}dp\right] e^{-i\frac{k^2\hbar}{2m}t}dk \end{aligned} \tag{5.24}$$

Y, agrupando las integrales

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty\int_{-\infty}^\infty ik\left[\overline{g_1}(k,p) - \overline{g_2}(k,p) - \overline{f_1}(k,p) + \overline{g_2}(k,p)\right] e^{ipt}e^{-i\frac{k^2\hbar}{2m}t}dp\, dk = \\ =&\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^\infty\int_{-\infty}^\infty\int_{-\infty}^\infty \bar{a}(k')\left[\overline{f_1}(k,p) + \overline{f_2}(k,p)\right] e^{ipt}e^{ik't}e^{-i\frac{k^2\hbar}{2m}t}dp\, dk'\, dk \end{aligned} \tag{5.25}$$

De nuevo hacemos un cambio de variable, pero esta vez hacemos un cambio distinto en cada lado de la igualdad

A la izquierda vamos a definir la variable $u_1 = p - k^2\hbar/2m$, y hacemos el cambio de variable $(k,p) \to (k,u_1)$

A la derecha usamos $u_2 = p + k' - k^2\hbar/2m$, y el cambio será $(k,k',p) \to (k,k',u_2)$

En el primer caso el determinante jacobiano será el mismo que en (5.15), y por tanto será igual a 1

En el segundo podemos calcularlo como

$$J(k,k',u_2)=\begin{vmatrix}\frac{\partial k}{\partial k} & \frac{\partial k}{\partial k'} & \frac{\partial k}{\partial u_2}\\ \frac{\partial k'}{\partial k} & \frac{\partial k'}{\partial k'} & \frac{\partial k'}{\partial u_2}\\ \frac{\partial p}{\partial k} & \frac{\partial p}{\partial k'} & \frac{\partial p}{\partial u_2}\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}1 & 0 & -\frac{m}{\hbar k}\\ 0 & 1 & 1\\ 0 & 0 & 1\end{vmatrix}=1 \tag{5.26}$$

Con lo que podemos reescribir las integrales en las nuevas variables

$$\begin{aligned}\int_0^\infty\int_{-\infty}^\infty ik\left[\overline{g_1}\left(k,u_1+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)-\overline{g_2}\left(k,u_1+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)\right.\\ \left.-\overline{f_1}\left(k,u_1+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)+\overline{g_2}\left(k,u_1+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)\right]e^{iu_1t}du_1\,dk=\\ =\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^\infty\int_{-\infty}^\infty\int_{-\infty}^\infty\bar{a}(k')\left[\overline{f_1}\left(k,u_2-k'+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)+\right.\\ \left.+\overline{f_2}\left(k,u_2-k'+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)\right]e^{iu_2t}du_2\,dk'\,dk\end{aligned} \tag{5.27}$$

Y ahora podemos agrupar las dos integrales haciendo $u_1=u_2=u$ y anular cada término con un u fijo, obteniendo la relación

$$\begin{aligned}\int_0^\infty ik\left[\overline{g_1}\left(k,u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)-\overline{g_2}\left(k,u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)-\overline{f_1}\left(k,u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)+\overline{g_2}\left(k,u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)\right]dk=\\ =\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^\infty\int_{-\infty}^\infty\bar{a}(k')\left[\overline{f_1}\left(k,u-k'+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)+\overline{f_2}\left(k,u-k'+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)\right]dk'\,dk\end{aligned} \tag{5.28}$$

Y usando la ecuación (5.18) podemos reescribirla finalmente como

$$\begin{aligned}\boxed{\int_0^\infty ik\left[\overline{g_1}\left(k,u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)-\overline{f_1}\left(k,u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)\right]dk=}\\ \boxed{=\frac{m}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^\infty\int_{-\infty}^\infty\bar{a}(k')\left[\overline{f_1}\left(k,u-k'+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)+\overline{f_2}\left(k,u-k'+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)\right]dk'\,dk}\end{aligned} \tag{5.29}$$

Es decir, esta ecuación relaciona los valores de parámetros con varios valores de k distintos (relaciona varios canales de *scattering*), y cuales son los k que intervienen y con qué peso es función de los coeficientes de Fourier del desarrollo de $a(t)$

5.3. Conservación de la densidad de probabilidad

De manera análoga a lo que hacíamos en el caso estacionario vamos a calcular la corriente de probabilidad de las soluciones a cada lado de la delta y vamos a imponer que se verifique la ecuación de continuidad

El tratamiento es muy parecido al de la sección 3.3, pero teniendo en cuenta que ahora nuestros coeficientes van a ser funciones del tiempo

Operando podemos obtener la ecuación análoga a (5.30)

$$\begin{aligned}\rho^L(x,t) =&\Psi^{L^*}(x,t)\Psi^L(x,t) = \\ =&\int_0^\infty\int_0^\infty \Big(f_1(k,t)f_1^*(k',t)e^{i(k-k'^*)x} + +f_2(k,t)f_2^*(k',t)e^{-i(k-k'^*)x} + \\ &+ f_1(k,t)f_2^*(k',t)e^{i(k+k'^*)x} + f_1^*(k',t)f_2(k,t)e^{-i(k+k'^*)x}\Big)\, e^{i\frac{\mu^*(k')-\mu(k)}{\hbar}t}dkdk'\end{aligned} \tag{5.30}$$

Ahora la derivada temporal de esta ecuación la podemos descomponer como un término análogo al del caso estacionario más un término que contiene las derivadas de los coeficientes

$$\frac{\partial\rho^L(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial\rho^L_{estacionario}}{\partial t} + \frac{\partial\rho^L_{coeficientes}}{\partial t} \tag{5.31}$$

Para la densidad de corriente, $J^L(x,t)$, podemos hacer lo mismo que en la ecuación (4.23), llegando a

$$\begin{aligned}J^L(x,t) = \frac{\hbar}{2m}\int_0^\infty\int_0^\infty &\Big[(k+k'^*)\Big(f_1(k,t)f_1^*(k',t)e^{i(k-k'^*)x} - f_2(k,t)f_2^*(k',t)e^{-i(k-k'^*)x}\Big) \\ &+(k-k'^*)\Big(f_1(k,t)f_2^*(k',t)e^{i(k+k'^*)x} - f_1^*(k',t)f_2(k,t)e^{-i(k+k'^*)x}\Big)\Big]\, e^{i\frac{\mu^*(k')-\mu(k)}{\hbar}t}dkdk'\end{aligned} \tag{5.32}$$

La derivada respecto de x de esta función es exactamente igual que en el caso estacionario, en la ecuación (4.24), ya que los coeficientes no dependen explícitamente de la posición

$$\frac{\partial J^L(x,t)}{\partial x} = \frac{\partial J^L_{estacionario}}{\partial x} \tag{5.33}$$

Se puede comprobar que, igual que en el caso estacionario, $\frac{\partial\rho^L_{estacionario}}{\partial x} + \frac{\partial J^L_{estacionario}}{\partial x} = 0$

Por lo tanto debemos tener

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho^L_{coeficientes}}{\partial t} = 0 \longrightarrow &\int_0^\infty\int_0^\infty \Bigg[\left(\frac{\partial f_1(k,t)}{\partial t}f_1^*(k',t) + f_1(k,t)\frac{\partial f_1^*(k',t)}{\partial t}\right)e^{i(k-k'^*)x} + \\ &+\left(\frac{\partial f_2(k,t)}{\partial t}f_2^*(k',t) + f_2(k,t)\frac{\partial f_2^*(k',t)}{\partial t}\right)e^{-i(k-k'^*)x} + \\ &+\left(\frac{\partial f_1(k,t)}{\partial t}f_2^*(k',t) + f_1(k,t)\frac{\partial f_2^*(k',t)}{\partial t}\right)e^{i(k+k'^*)x} + \\ &+\left(\frac{\partial f_1^*(k',t)}{\partial t}f_2(k,t) + f_1^*(k',t)\frac{\partial f_2(k,t)}{\partial t}\right)e^{-i(k+k'^*)x}\Bigg]\, e^{i\frac{\mu^*(k')-\mu(k)}{\hbar}t}dkdk' = 0\end{aligned} \tag{5.34}$$

Podemos pasar de esta integral doble a una integral simple llevando una vez más la exponencial a la forma de una transformada de Fourier, para lo cual definimos $u = \frac{\mu^*(k')-\mu(k)}{\hbar} = \frac{\hbar(k'^2-k^2)}{2m}$, y hacemos el cambio $(k,k') \to (k,u)$. El jacobiano de este cambio de variable será igual que en (4.30)

$$J(k,u) = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial k}{\partial k} & \dfrac{\partial k}{\partial u} \\ \\ \dfrac{\partial k'}{\partial k} & \dfrac{\partial k'}{\partial u} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & -\dfrac{m}{\hbar k} \\ \\ 0 & \dfrac{m}{\hbar k'} \end{vmatrix} = \frac{m}{\hbar k'} \tag{5.35}$$

La integral es entonces

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{m}{\hbar k'(u)} \Bigg[& \left(\frac{\partial f_1(k,t)}{\partial t} f_1^*(k'(u),t) + f_1(k,t) \frac{\partial f_1^*(k'(u),t)}{\partial t} \right) e^{i(k-k'^*(u))x} + \\ & + \left(\frac{\partial f_2(k,t)}{\partial t} f_2^*(k'(u),t) + f_2(k,t) \frac{\partial f_2^*(k'(u),t)}{\partial t} \right) e^{-i(k-k'^*(u))x} + \\ & + \left(\frac{\partial f_1(k,t)}{\partial t} f_2^*(k'(u),t) + f_1(k,t) \frac{\partial f_2^*(k'(u),t)}{\partial t} \right) e^{i(k+k'^*(u))x} + \\ & + \left(\frac{\partial f_1^*(k'(u),t)}{\partial t} f_2(k,t) + f_1^*(k'(u),t) \frac{\partial f_2(k,t)}{\partial t} \right) e^{-i(k+k'^*(u))x} \Bigg] e^{iut} dk du = 0 \end{aligned} \tag{5.36}$$

que se tiene que anular independientemente para cada u y nos conduce a la integral simple

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{1}{k'(u)} \Bigg[& \left(\frac{\partial f_1(k,t)}{\partial t} f_1^*(k'(u),t) + f_1(k,t) \frac{\partial f_1^*(k'(u),t)}{\partial t} \right) e^{i(k-k'^*(u))x} + \\ & + \left(\frac{\partial f_2(k,t)}{\partial t} f_2^*(k'(u),t) + f_2(k,t) \frac{\partial f_2^*(k'(u),t)}{\partial t} \right) e^{-i(k-k'^*(u))x} + \\ & + \left(\frac{\partial f_1(k,t)}{\partial t} f_2^*(k'(u),t) + f_1(k,t) \frac{\partial f_2^*(k'(u),t)}{\partial t} \right) e^{i(k+k'^*(u))x} + \\ & + \left(\frac{\partial f_1^*(k'(u),t)}{\partial t} f_2(k,t) + f_1^*(k'(u),t) \frac{\partial f_2(k,t)}{\partial t} \right) e^{-i(k+k'^*(u))x} \Bigg] dk = 0 \end{aligned} \tag{5.37}$$

Por último, impongamos que $\rho(x,t)$ sea una función continua por ser la propia función de onda continua, igual que hacíamos en la sección 4.3. La condición $\rho^L = \rho^R$ se traduce en que

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty & [f_1(k,p) f_1^*(k',p') + f_2(k,p) f_2^*(k',p') + f_1(k,p) f_2^*(k',p') + \\ & + f_1^*(k',p') f_2(k,p)]\, e^{i\left(p-p'^* + \frac{\mu^*(k')-\mu(k)}{\hbar}\right)t} dp\, dp' dk\, dk' = \\ = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty & [g_1(k,p) g_1^*(k',p') + g_2(k,p) g_2^*(k',p') + g_1(k,p) g_2^*(k',p') + \\ & + g_1^*(k',p') g_2(k,p)]\, e^{i\left(p-p'^* + \frac{\mu^*(k')-\mu(k)}{\hbar}\right)t} dp\, dp' dk\, dk' \end{aligned} \tag{5.38}$$

Haremos de nuevo un cambio de variable, $(k,k',p,p') \to (k,k',p,u)$ definiendo $u = p - p^* + \frac{\mu^*(k')-\mu(k)}{\hbar} = p - p' + \frac{\hbar(k'^2-k^2)}{2m}$. El jacobiano en este caso es un determinante de orden 4

$$J(k,k',p,u) = \begin{vmatrix} \frac{\partial k}{\partial k} & \frac{\partial k}{\partial k'} & \frac{\partial k}{\partial p} & \frac{\partial k}{\partial u} \\ \frac{\partial k'}{\partial k} & \frac{\partial k'}{\partial k'} & \frac{\partial k'}{\partial p} & \frac{\partial k'}{\partial u} \\ \frac{\partial p}{\partial k} & \frac{\partial p}{\partial k'} & \frac{\partial p}{\partial p} & \frac{\partial p}{\partial u} \\ \frac{\partial p'}{\partial k} & \frac{\partial p'}{\partial k'} & \frac{\partial p'}{\partial p} & \frac{\partial p'}{\partial u} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & -\frac{m}{\hbar k} \\ 0 & 1 & 0 & \frac{m}{\hbar k'} \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = 1 \tag{5.39}$$

Con esto la integral se convierte en

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty [f_1(k,p)f_1^*(k',p'(u)) + f_2(k,p)f_2^*(k',p'(u)) + f_1(k,p)f_2^*(k',p'(u)) + \\ &\qquad + f_1^*(k',p'(u))f_2(k,p)]\, e^{iut} dp\, du\, dk\, dk' = \\ &= \int_0^\infty \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty [g_1(k,p)g_1^*(k',p'(u)) + g_2(k,p)g_2^*(k',p') + g_1(k,p)g_2^*(k',p'(u)) + \\ &\qquad + g_1^*(k',p'(u))g_2(k,p)]\, e^{iut} dp\, du\, dk\, dk' \end{aligned} \tag{5.40}$$

que conduce por último a

$$\begin{aligned} &\boxed{\int_0^\infty \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [f_1(k,p)f_1^*(k',p'(u)) + f_2(k,p)f_2^*(k',p'(u)) +} \\ &\quad \boxed{+ f_1(k,p)f_2^*(k',p'(u)) + f_1^*(k',p'(u))f_2(k,p)]\, dp\, dk\, dk' =} \\ &\boxed{= \int_0^\infty \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [g_1(k,p)g_1^*(k',p'(u)) + g_2(k,p)g_2^*(k',p') +} \\ &\quad \boxed{+ g_1(k,p)g_2^*(k',p'(u)) + g_1^*(k',p'(u))g_2(k,p)]\, dp\, dk\, dk'} \end{aligned} \tag{5.41}$$

5.4. Solución general

Igual que en la sección 3.4, vamos a enunciar las condiciones que hemos obtenido sobre los coeficientes e intentar sacar información sobre ellos

Conocemos perfectamente $a(t)$ (y, por lo tanto $\bar{a}(k')$), ya que es una condición inicial del problema

$$
\begin{cases}
\text{Continuidad} \\
\left\{ \int_0^{\infty} \overline{f_1}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right) + \overline{f_2}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right) dk = \int_0^{\infty} \overline{g_1}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right) + \overline{g_2}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right) dk \right. \\
\\
\text{Condición de salto} \\
\begin{cases}
\int_0^{\infty} ik\left[\overline{g_1}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right) - \overline{f_1}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)\right] dk = \\
= \frac{m}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \bar{a}(k')\left[\overline{f_1}\left(k, u-k'+\frac{k^2\hbar}{2m}\right) + \overline{f_2}\left(k, u-k'+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)\right] dk'\, dk
\end{cases} \\
\\
\text{Conservación de la densidad de probabilidad} \\
\begin{cases}
\int_0^{\infty}\int_0^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} [f_1(k,p)f_1^*(k',p'(u)) + f_2(k,p)f_2^*(k',p'(u)) + \\
\qquad + f_1(k,p)f_2^*(k',p'(u)) + f_1^*(k',p'(u))f_2(k,p)]\, dp\, dk\, dk' = \\
= \int_0^{\infty}\int_0^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} [g_1(k,p)g_1^*(k',p'(u)) + g_2(k,p)g_2^*(k',p') + \\
\qquad + g_1(k,p)g_2^*(k',p'(u)) + g_1^*(k',p'(u))g_2(k,p)]\, dp\, dk\, dk'
\end{cases}
\end{cases}
\tag{5.42}
$$

Operemos sobre las dos primeras ecuaciones para obtener una relación entre los parámetros de cada modo. Cuando estudiamos *scattering* conocemos también los coeficientes de las ondas que inciden sobre la delta ya que son los parámetros del problema sobre los que tenemos control. Esto es, conocemos $f_1(k,t)$ y $g_2(k,t)$, y sus infinitos coeficientes de Fourier y podemos despejar f_2 y g_1 en función de estos parámetros, con lo que llegamos a las siguientes relaciones (análogas a las obtenidas en el capítulo 3 para el caso estacionario)

$$
\begin{cases}
\int_0^{\infty}\left[ik\,\overline{f_2}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right) dk - \frac{m}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \bar{a}(k')\overline{f_2}\left(k, u-k'+\frac{k^2\hbar}{2m}\right) dk'\right] dk = \\
= \int_0^{\infty}\left[ik\,\overline{g_2}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right) dk + \frac{m}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \bar{a}(k')\overline{f_1}\left(k, u-k'+\frac{k^2\hbar}{2m}\right) dk'\right] dk \\
\\
\int_0^{\infty}\left[ik\,\overline{g_1}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right) dk - \frac{m}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \bar{a}(k')\overline{g_1}\left(k, u-k'+\frac{k^2\hbar}{2m}\right) dk'\right] dk = \\
= \int_0^{\infty}\left[ik\,\overline{f_1}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right) dk + \frac{m}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \bar{a}(k')\overline{g_2}\left(k, u-k'+\frac{k^2\hbar}{2m}\right) dk'\right] dk
\end{cases}
\tag{5.43}
$$

Podemos ver que la diferencia es que ahora intervienen coeficientes con distintos valores de k en la misma ecuación, pero la forma funcional es muy parecida a la del caso independiente del tiempo. Para mayor claridad reescribamos estas ecuaciones teniendo en cuenta que $\overline{a}(k')$, $\overline{f_1}(k,p)$ y $\overline{g_2}(k,p)$ son funciones perfectamente conocidas, y que para una función arbitraria $f(x) = \int f(x+y)\delta(y)dy$

$$\begin{cases} \displaystyle\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \overline{f_2}\left(k, u-k'+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)\left[ik\delta(k')-\frac{m}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\bar{a}(k')\right]dk'\,dk = F(u) \\ \displaystyle\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \overline{g_1}\left(k, u-k'+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)\left[ik\delta(k')-\frac{m}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\bar{a}(k')\right]dk'\,dk = G(u) \end{cases} \tag{5.44}$$

donde $F(u)$ y $G(u)$ son funciones conocidas

5.5. Matriz de *scattering*

Siguiendo el mismo proceso que hacíamos en las secciones 3.5 y 4.5 podemos escribir la matriz de *scattering* del sistema, pero ahora la matriz no será diagonal por bloques

Una integral es en efecto un operador matricial de dimensión infinita, por lo que las integrales relacionando distintos valores se pueden escribir en el formalismo de la matriz de *scattering* como una matriz por el vector de estado del sistema

Como el miembro de la izquierda también es una integral, la forma de nuestra ecuación es

$$A|\psi>_{out} = B|\psi>_{in} \tag{5.45}$$

por lo que tendremos que definir S como $S = A^{-1}B$ (en los casos en los que A sea invertible)

La forma integral de las matrices las podemos deducir estudiando primero algunos casos sencillos[2]

En el caso de una integral en una variable la podemos tratar como el producto interno de un espacio de Hilbert, obteniendo la integración como el producto de un vector fila y un vector columna, cuyo resultado será un número independiente de x

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)g(x)dx = (\cdots f(x')\cdots)\cdot\begin{pmatrix}\vdots\\ g(x')\\ \vdots\end{pmatrix} = C \tag{5.46}$$

En el caso en el que una de las dos funciones dependa de dos variables, esta vendrá representada por una matriz, y como la integral solo es sobre una variable el resultado será un vector. Que sea un vector fila o columna dependerá del orden en que escribamos las funciones

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x,y)g(x)dx = \begin{pmatrix} & \vdots & \\ \cdots & f(x',y') & \cdots \\ & \vdots & \end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\vdots\\ g(x')\\ \vdots\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\vdots\\ \int_{-\infty}^{\infty} f(x,y')g(x)dx\\ \vdots\end{pmatrix} \tag{5.47}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x,y)g(x)dx = (\cdots g(x')\cdots)\cdot\begin{pmatrix} & \vdots & \\ \cdots & f(x',y') & \cdots \\ & \vdots & \end{pmatrix} = \left(\cdots \int_{-\infty}^{\infty} f(x,y)g(x)dx\ \cdots\right) \tag{5.48}$$

[2]Estos casos son análogos a la representación de operadores lineales como matrices infinito-dimensionales llevada a cabo en [8, pág. 126]

Si ahora nos fijamos de nuevo en las ecuaciones (5.43) vemos que a cada lado de la igualdad tenemos un término con dos variables, k y u, y otro con tres k, k' y u, por lo que necesitaremos un tensor de orden 3 para describir este segundo término

De momento vamos a simplificar el problema suponiendo que u es una constante fijada e ignorando la integración en k por el momento, por lo que vamos a intentar escribir en forma matricial la siguiente ecuación (suponiendo que depende de dos variables, k y k'

$$ik\,\overline{g_1}\left(k, u + \frac{k^2\hbar}{2m}\right) dk - \frac{m}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \bar{a}(k')\overline{g_1}\left(k, u - k' + \frac{k^2\hbar}{2m}\right) dk' \tag{5.49}$$

Vamos a escribir $\overline{g_1}\left(k, u + \frac{k^2\hbar}{2m}\right)$ como un vector columna que depende de la variable k y $\overline{g_1}\left(k, u - k' + \frac{k^2\hbar}{2m}\right)$ como una matriz función de k y k', teniendo la dependencia en k por columnas y en k' por filas. $\bar{a}(k')$ tiene que ser entonces un vector columna que multiplica a $\overline{g_1}\left(k, u - k' + \frac{k^2\hbar}{2m}\right)$ por la derecha

$$ik\begin{pmatrix} \vdots \\ \overline{g_1}\left(k, u + \frac{k^2\hbar}{2m}\right) \\ \vdots \end{pmatrix} - \frac{m}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\begin{pmatrix} & \vdots & \\ \cdots & \overline{g_1}\left(k, u - k' + \frac{k^2\hbar}{2m}\right) & \cdots \\ & \vdots & \end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix} \vdots \\ \bar{a}(k') \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{5.50}$$

A su vez podemos escribir $\overline{g_1}\left(k, u + \frac{k^2\hbar}{2m}\right) = \overline{g_1}\left(k, u - k' + \frac{k^2\hbar}{2m}\right)\delta_{k'0}$, y $\delta_{k'0}$ en notación matricial es una matriz fila cuyos elementos son todos 0 excepto en la fila 0, en la que tiene un 1

Sacando factor común escribimos

$$\begin{pmatrix} & \vdots & \\ \cdots & \overline{g_1}\left(k, u - k' + \frac{k^2\hbar}{2m}\right) & \cdots \\ & \vdots & \end{pmatrix}\left[ik\begin{pmatrix} \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} - \frac{m}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\begin{pmatrix} \vdots \\ \bar{a}(k') \\ \vdots \\ \bar{a}(0) \\ \vdots \\ \bar{a}(k') \\ \vdots \end{pmatrix}\right] \tag{5.51}$$

Esta ecuación matricial es equivalente a (5.49), y ahora es suficiente realizar la integral en k de todo este término para obtener la forma funcional correcta

La integral en k es una suma extendida a todos los términos con distinto k pero para los que el resto de coeficientes son constantes. Estos valores en nuestra matriz se encuentran colocados por columnas, por lo que la integral respecto de k se puede escribir como la multiplicación por la izquierda de una matriz fila infinita de unos

$$
\left(\cdots 1 \cdots 1 \cdots 1 \cdots\right)\begin{pmatrix} & \vdots & \\ \cdots & \overline{g_1}\left(k, u-k'+\frac{k^2\hbar}{2m}\right) & \cdots \\ & \vdots & \end{pmatrix}\left[ik\begin{pmatrix}\vdots\\0\\\vdots\\1\\\vdots\\0\\\vdots\end{pmatrix}-\frac{m}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\begin{pmatrix}\vdots\\\bar{a}(k')\\\vdots\\\bar{a}(0)\\\vdots\\\bar{a}(k')\\\vdots\end{pmatrix}\right] \tag{5.52}
$$

Este término está igualado a otra integral,

$$
\int_0^\infty \left[ik\,\overline{f_1}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)dk+\frac{m}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\bar{a}(k')\overline{g_2}\left(k, u-k'+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)dk'\right]\,dk \tag{5.53}
$$

donde la diferencia con el término anterior es que ahora tenemos dos funciones, f_1 y g_2, que son distintas y por lo tanto no nos permitirán sacar factor común

La ecuación matricial de esta integral será

$$
\left(\cdots\quad 1\quad 1\quad 1\quad \cdots\right)\left[ik\begin{pmatrix}\vdots\\\overline{f_1}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)\\\vdots\end{pmatrix}+\frac{m}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\begin{pmatrix} & \vdots & \\ \cdots & \overline{g_2}\left(k, u-k'+\frac{k^2\hbar}{2m}\right) & \cdots \\ & \vdots & \end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\vdots\\\bar{a}(k')\\\vdots\end{pmatrix}\right] \tag{5.54}
$$

Y la ecuación completa que nos dará la forma de g_1 en función de f_1 y g_2 será

$$
\left(\cdots\quad 1\quad 1\quad 1\quad \cdots\right)\begin{pmatrix} & \vdots & \\ \cdots & \overline{g_1}\left(k, u-k'+\frac{k^2\hbar}{2m}\right) & \cdots \\ & \vdots & \end{pmatrix}\left[-\frac{m}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\begin{pmatrix}\vdots\\\bar{a}(k')\\\vdots\\\bar{a}(0)-i\sqrt{2\pi}\dfrac{\hbar^2 k}{m}\\\vdots\end{pmatrix}\right]= \tag{5.55}
$$

$$
\left(\cdots\quad 1\quad 1\quad 1\quad \cdots\right)\left[ik\begin{pmatrix}\vdots\\\overline{f_1}\left(k, u+\frac{k^2\hbar}{2m}\right)\\\vdots\end{pmatrix}+\frac{m}{\hbar^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\begin{pmatrix} & \vdots & \\ \cdots & \overline{g_2}\left(k, u-k'+\frac{k^2\hbar}{2m}\right) & \cdots \\ & \vdots & \end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\vdots\\\bar{a}(k')\\\vdots\end{pmatrix}\right] \tag{5.56}
$$

Si fuéramos capaces de invertir esta expresión para hallar $\overline{f_1}$ y $\overline{g_2}$ tendríamos ya la matriz de *scattering* del problema, pero este es un resultado que aún no se ha logrado y en el que se sigue trabajando en este momento

5.6. Casos particulares

5.6.1. Equilibrio estacionario

Podemos estudiar el caso particular en que los coeficientes de las ondas planas no dependen del tiempo. En este caso no hace falta recurrir a las transformadas de Fourier de los coeficientes, podemos sacar relaciones entre ellos directamente. Sin embargo seguimos teniendo que hacer la transformada para el coeficiente de la delta, $a(t)$, que sigue dependiendo del tiempo

En este caso, la ecuación de continuidad tiene exactamente la misma forma que para un paquete de ondas en el caso independiente del tiempo, (4.6), por lo que la ecuación que obtendremos será la misma que (4.10)

$$\boxed{f_1(k) + f_2(k) = g_1(k) + g_2(k)} \tag{5.57}$$

Usando el desarrollo de Fourier de $a(t)$ dado en (5.23), la condición de salto de la derivada se puede escribir como

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty ik_1 \left[(g_1(k_1) - f_1(k_1) - g_2(k_1) + f_2(k_1))\right] e^{-i\frac{k_1^2\hbar}{2m}t} dk_1 - \\ &-\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \frac{2m\bar{a}(k')}{\hbar^2} \left[f_1(k_2) + f_2(k_2)\right] e^{i\left(k' - \frac{k_2^2\hbar}{2m}\right)t} dk_2\, dk' = 0 \end{aligned} \tag{5.58}$$

Tenemos que realizar entonces un cambio de variable en las dos integrales, en la primera de k_1 a u_1, y en la segunda de $(k, k_2) \longrightarrow (k, u_2)$

En el primer caso tomamos $u_1 = k_1^2\hbar/2m$, y por lo tanto $du_1 = k_1\hbar/m\ dk_1$, mientras que en el segundo caso, para $k' - k_2^2\hbar/2m$, el jacobiano es equivalente a (5.15) y será igual a 1 también

$$\begin{aligned} &\frac{m}{\hbar}\int_0^\infty i \left[(g_1(k_1(u_1)) - f_1(k_1(u_1)) - g_2(k_1(u_1)) + f_2(k_1(u_1)))\right] e^{-iu_1 t} du_1 - \\ &-\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \left[\frac{2m\bar{a}(k')}{\hbar^2}(f_1(k_2) + f_2(k_2))\right] e^{iu_2 t} du_2\, dk' = 0 \end{aligned} \tag{5.59}$$

y esta ecuación nos lleva a la condición

$$\begin{aligned} &\frac{m}{\hbar} i \left[(g_1(k) - f_1(k) - g_2(k) + f_2(k))\right] - \\ &- \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^\infty \left[\frac{2m\bar{a}(k')}{\hbar^2}\left[f_1\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar}(k'-u)}\right) + f_2\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar}(k'-u)}\right)\right]\right] dk' = 0 \end{aligned} \tag{5.60}$$

De estas dos ecuaciones tendremos que despejar los coeficientes $f_2(k)$ y $g_1(k)$ y resolver el sistema

5.6.2. *Scattering* de una onda plana

Podemos estudiar el caso de una onda plana que incide sobre la delta desde la izquierda si escogemos los parámetros de modo que $f_1(k) = f_1(k_i)\delta(k - k_i)$ $(k_i > 0)$, con lo que $f_1(k) = 0$ si $k \neq k_i$, y $g_2(k) = 0 \quad \forall k$

La condición de continuidad impone

$$\int_0^\infty f_1(k)dk = f_1(k_i) = \int_0^\infty (g_1(k,t) - f_2(k,t))dk \tag{5.61}$$

condición que, en el espacio transformado de Fourier es

$$\boxed{\overline{f_1}\left(k_i, u + \frac{k_i^2\hbar}{2m}\right) = \int_0^\infty \overline{g_1}\left(k, u + \frac{k^2\hbar}{2m}\right) - \overline{f_2}\left(k, u + \frac{k^2\hbar}{2m}\right) dk} \tag{5.62}$$

que, si f_1 no depende del tiempo se convierte en

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty \overline{g_1}\,(k,0) - \overline{f_2}\,(k,0)\,dk = f_1(k_i) \\ &\int_0^\infty \overline{g_1}\left(k, u + \frac{k^2\hbar}{2m}\right) - \overline{f_2}\left(k, u + \frac{k^2\hbar}{2m}\right) dk = 0 \qquad \text{si} \qquad u \neq -\frac{k^2\hbar}{2m} \end{aligned} \tag{5.63}$$

Capítulo 6

Potenciales periódicos

6.1. Teoría de Floquet

Para ecuaciones diferenciales ordinarias con un coeficiente temporal que es periódico en el tiempo, $\frac{\partial x}{\partial t} = A(t)x$, el teorema de Floquet nos da la solución canónica de manera equivalente a como el teorema de Bloch fija la forma de las soluciones para funciones periódicas en el espacio en física del estado sólido

El teorema impone que las soluciones deben cumplir

$$x(t) = f(t)e^{kt} \tag{6.1}$$

y $f(t)$ debe tener la periodicidad de $A(t)$[1]

En particular nosotros tenemos una ecuación en la que la derivada temporal es de primer orden, y por lo tanto existe una versión adaptada del teorema que nos permite proponer la forma de las soluciones (debemos tener en cuenta que nosotros tenemos a mayores un término que incluye la derivada segunda de la función respecto de la posición)

Sin embargo el resultado obtenido es idéntico al obtenido en la ecuación homogénea de Floquet[2], y se traduce en que las soluciones deben tener la misma periodicidad temporal que el potencial que introduzcamos en la ecuación

Para un potencial $a(t)$ que sea periódico en el tiempo con periodo T en vez de realizar una transformada de Fourier nos vale con desarrollar la función en serie, de modo que

$$a(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\frac{2\pi}{T}t} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\omega t}, \qquad T = 2\pi/\omega \tag{6.2}$$

Por el teorema de Floquet sabemos que los coeficientes de las ondas planas que usemos como solución del problema deben ser también desarrollables en serie

Particularizando los resultados de la sección anterior podemos

Sin embargo, como el hamiltoniano depende del tiempo no va a ser una constante del movimiento de nuestro sistema, y por lo tanto la energía, E, no se nos conservará. Aun así podemos definir la llamada *energía de Floquet*, ε, como la constante asociada con este hamiltoniano , y podremos escribir las soluciones a nuestra ecuación diferencial como un

[1]Todos los resultados obtenidos para las funciones de Bloch son extrapolables aquí y se pueden consultar en [5]

[2]Este resultado se puede ver en [1]

sumatorio ponderado de las soluciones de la parte espacial multiplicadas por una exponencial periódica con la *cuasi-energía* de Floquet asociada a cada término del sumatorio[3]

6.1.1. Potencial armónico

Vamos a estudiar un caso fácil, con un único coeficiente de Fourier, por ejemplo

$$a(t) = V\cos(\omega t), \qquad T = 2\pi/\omega \tag{6.3}$$

$$\Psi_\varepsilon(x,t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi_n(x) \exp\left[-i\frac{(\varepsilon + n\hbar\omega)}{\hbar}\right] \tag{6.4}$$

siendo $\psi_n(x)$ la solución para la ecuación estacionaria a cada lado del cero antes de imponer las condiciones de continuidad y derivabilidad a la solución, resultado que podemos tomar del cálculo dado en el capítulo 5. El vector de onda de cada función $\psi_n(x)$ es k_n, definido como

$$k_n = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon + n\hbar\omega)} \tag{6.5}$$

Vamos a escribir la forma de ψ_n explícitamente en función de dos parámetros a cada lado, a_n y d_n para $x < 0$ y b_n y c_n para $x > 0$, igual que hicimos en (3.7)

$$\begin{cases} \psi_n^L(x) = \dfrac{1}{\sqrt{k_n}}\left(a_n e^{ik_n x} + d_n e^{-ik_n x}\right) & x < 0 \\ \\ \psi_n^R(x) = \dfrac{1}{\sqrt{k_n}}\left(c_n e^{ik_n x} + b_n e^{-ik_n x}\right) & x > 0 \end{cases} \tag{6.6}$$

Si aplicamos la función de continuidad a ambos lados del cero a la función $\Psi_\varepsilon(x,t)$, debido a que las exponenciales imaginarias forman un conjunto independiente de funciones esta condición se traduce necesariamente en que cada función $\psi_n(x)$ debe ser continua en el cero, con lo que obtenemos

$$\boxed{a_n + d_n = b_n + c_n} \tag{6.7}$$

Sin embargo al aplicar la continuidad a la derivada de $\Psi_\varepsilon(x,t)$ el caso es algo más complicado y no se reduce a la igualdad de derivadas de las $\psi_n(x)$

La condición de salto para la delta explicada en la sección I nos da en este caso

$$\left.\frac{d\Psi_\varepsilon}{dx}\right|_{x=0^+} - \left.\frac{d\Psi_\varepsilon}{dx}\right|_{x=0^-} = \frac{2mV}{\hbar^2}\cos(\omega t)\Psi_\varepsilon(0,t) \tag{6.8}$$

que, derivando, conduce finalmente a una relación entre los coeficientes dada por

$$c_n + d_n - b_n - a_n = -2i\left[h_{n-1}(a_{n-1} + d_{n-1}) + h_n(a_{n+1} + d_{n+1})\right] \tag{6.9}$$

con

[3]La energía no se conserva en este problema, pero podemos definir ciertos valores discretos denominados *cuasi-energías* que forman una base [1, pág. 1]

$$h_n = \frac{mV}{2\hbar^2\sqrt{k_n k_{n+1}}} \tag{6.10}$$

que reescribiéndola usando la ecuación de continuidad sería

$$\boxed{a_n + b_n = i\left[h_{n-1}(a_{n-1} + d_{n-1}) + h_n(a_{n+1} + d_{n+1})\right]} \tag{6.11}$$

La solución de b_n y d_n en función de los a y c es por lo tanto una ecuación recurrente

$$\begin{cases} b_n = -a_n + i\left[h_{n-1}(c_{n-1} + b_{n-1}) + h_n(c_{n+1} + b_{n+1})\right] \\ d_n = -2a_n + c_n + i\left[h_{n-1}(a_{n-1} + d_{n-1}) + h_n(a_{n+1} + d_{n+1})\right] \end{cases} \tag{6.12}$$

6.2. Fracción continua

La relación de recurrencia encontrada en (6.12) se puede resolver transformándola en una fracción continua (esta es la ventaja de tratar con un conjunto discreto de estados, ya que en el continuo disponible en el capítulo 5.1 no se puede construir una fracción continua)

Podemos definir un coeficiente que relaciona la amplitud relativa de dos modos contiguos

Para la onda reflejada hacia la izquierda definiremos

$$f_n = \frac{d_n}{d_{n-1}} \tag{6.13}$$

mientras que para la onda que sale hacia la derecha tendremos

$$g_n = \frac{b_n}{b_{n-1}} \tag{6.14}$$

Dividiendo las expresiones encontradas en (6.12) por d_n y b_n respectivamente y sustituyendo estas expresiones por f_n y g_n adecuadamente llegamos a

$$1 = ih_{n-1}\frac{1}{f_n} + h_n f_{n+1} \qquad 1 = ih_{n-1}\frac{1}{g_n} + h_n g_{n+1} \tag{6.15}$$

Estas relaciones recursivas nos conducen a

$$f_n = \frac{1}{ih_n}\left(1 + \frac{h_{n+1}^2}{1 + \frac{h_{n+2}^2}{1 + \frac{h_{n+3}^2}{\cdots}}}\right) \tag{6.16}$$

para $n > 0$ y

$$f_n = \frac{ih_n}{1 + \frac{h_{n+1}^2}{1 + \frac{h_{n+2}^2}{1 + \frac{h_{n+3}^2}{\cdots}}}} \tag{6.17}$$

para $n < 0$, y exactamente igual para g_n

A partir de estas fracciones continuas se pueden estudiar los polos y los ceros de los coeficientes (siguiendo por ejemplo el análisis llevado a cabo en la referencia [1]), pero en este trabajo no se abordará dicho estudio, que se deja pendiente para un análisis posterior más profundo

Parte II

Transformada integral de la ecuación diferencial

Capítulo 7

Transformada de Fourier

En otros capítulos hemos visto ya la utilidad de usar transformadas integrales para simplificar el problema, en particular descomponiendo las soluciones en armónicos y trabajando sobre los coeficientes de Fourier en vez de con los parámetros en sí

Vamos a transformar ahora la ecuación diferencial aprovechando que las transformadas integrales convierten las derivadas en relaciones algebraicas, simplificando en parte el problema

A cambio deberemos hacer la transformada inversa de la solución al final del problema, lo que muchas veces no es trivial

Partimos de la ecuación diferencial completa

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+a(t)\delta(x)\Psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \tag{7.1}$$

y aplicamos la transformada de Fourier respecto de la posición, x, a ambos miembros de la igualdad. Debido a la linealidad de la transformación podemos analizar cada sumando separadamente

A la transformada de la función de onda solución de la ecuación la llamamos

$$F(k,t)=\mathcal{F}[\Psi(x,t)]=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi(x,t)e^{-ikx}dx \tag{7.2}$$

Como estamos transformando la función respecto de la variable x, las derivadas respecto de esta variable se convierten[1] en una multiplicación por k, aunque solo en el caso en que $\Psi(x,t)$ tienda a 0 en infinito y en menos infinito (tendremos que comprobarlo una vez que obtengamos la solución)

$$\mathcal{F}\left[\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}\right]=(ik)^2\mathcal{F}[\Psi(x,t)]=-k^2F(k,t) \tag{7.3}$$

El término proporcional a la delta lo podemos operar directamente

$$\mathcal{F}\left[a(t)\Psi(x,t)\delta(x)\right]=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}a(t)\Psi(x,t)\delta(x)e^{-ikx}dx=\frac{a(t)\Psi(0,t)}{\sqrt{2\pi}} \tag{7.4}$$

[1] De este modo podemos llevar la ecuación diferencial respecto de x a una ecuación algebraica, una gran ventaja de la transformada de Fourier[7, pág. 145]

Por la teoría de las transformadas de Fourier en varias variables podemos afirmar que si x y t son variables independientes podemos intercambiar la integral respecto de x y la derivada respecto de t sin problemas[2], por lo que para el último término obtenemos

$$\mathcal{F}\left[\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}\right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}e^{-ikx}dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\Psi(x,t)e^{-ikx}}{\partial t}dx = \tag{7.5}$$

$$= \frac{\partial}{\partial t}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi(x,t)e^{-ikx}dx = \partial F(k,t)\partial t \tag{7.6}$$

Tenemos ya todos los términos de nuestra ecuación diferencial, que podemos escribir en función de $F(k,t)$ como

$$\boxed{\frac{\hbar^2}{2m}k^2F(k,t) - i\hbar\frac{\partial F(k,t)}{\partial t} = a(t)\frac{\Psi(0,t)}{\sqrt{2\pi}}} \tag{7.7}$$

Podemos obtener una relación semejante pero adimensional transformando la ecuación (1.4) obtenida en la sección 1.2 respecto de la variable X (denominaremos K a la variable conjugada de X), con lo que obtenemos

$$K^2F(K,T) - i\frac{\partial F(K,T)}{\partial T} = A(T)\frac{\Psi(0,T)}{\sqrt{2\pi}} \tag{7.8}$$

Debido a que las soluciones de la ecuación deben ser 0 en infinito y menos infinito para que la transformada de la derivada segunda converja, como hemos mencionado antes, esta ecuación no será válida para estados de *scattering* no normalizados. Sin embargo será especialmente útil para estudiar estados ligados, ya que sabemos que estos necesariamente se anularán en el infinito

7.1. Resolución de la ecuación diferencial

La ecuación diferencial (7.7) es una *ODE* inhomogénea. La solución general de la ecuación se obtiene como suma de la solución general de la ecuación homogénea asociada más una solución particular

Como la ecuación homogénea es fácil de resolver, bastaría con hallar una solución cualquiera que cumpla la ecuación completa para resolver totalmente el problema, tal como se mencionaba en el capítulo 2, y de ahí el interés en aquellas posibles soluciones para los estados ligados

La ecuación homogénea asociada es

$$\frac{\hbar^2}{2m}k^2F(k,t) - i\hbar\frac{dF(k,t)}{dt} = 0 \tag{7.9}$$

que se trata de una ecuación separable cuya solución se puede obtener por integración a ambos lados de la igualdad

$$\frac{dF(k,t)}{F(k,t)} = -i\frac{\hbar}{2m}k^2dt \tag{7.10}$$

cuya solución, en función de una constante C, será

[2]Se puede demostrar formalmente escribiendo la transformada de Fourier respecto de las dos variables, x y t [7, pág.146]

$$F(k,t) = C \exp\left(-i\frac{\hbar}{2m}k^2 t\right) \tag{7.11}$$

Capítulo 8

Transformada de Laplace

Vamos a hacer la derivada de Laplace respecto a la variable temporal para convertir la derivada temporal en una relación algebraica. En el proceso, el producto $a(t)\delta(x)\psi(x,t)$ nos quedará como una convolución de las transformadas de cada una de las funciones

De nuevo partimos de la ecuación diferencial completa

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + a(t)\delta(x)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \tag{8.1}$$

y calculamos la transformada de Laplace de cada uno de los términos (gracias a la linealidad de la transformada), teniendo en cuenta que

$$\mathcal{L}\left[\Psi(x,t)\right] = L(x,s) = \int_0^\infty \Psi(x,t)e^{-st}dt \tag{8.2}$$

Igual que en la sección 7, podemos intercambiar las derivadas respecto de x con la transformada respecto de t, por ser estas variables independientes

$$\mathcal{L}\left[\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}\right] = \frac{\partial^2\mathcal{L}[\Psi(x,t)]}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 L(x,u)}{\partial x^2} \tag{8.3}$$

Para calcular el término dependiente de la delta podemos definir una función $\alpha(s)$, de modo que

$$\mathcal{L}\left[a(t)\delta(x)\Psi(x,t)\right] = \delta(x)\int_0^\infty a(t)\Psi(x,t)e^{-st}dt = \delta(x)\alpha(s) \tag{8.4}$$

siendo por tanto $\alpha(s)$

$$\boxed{\alpha(s) = \int_0^\infty a(t)\Psi(x,t)e^{-st}dt} \tag{8.5}$$

Por último, calculando la transformada de la derivada respecto al tiempo[1] obtenemos

[1]De nuevo aprovechamos la propiedad de la transformada de Laplace de convertir ecuaciones diferenciales en algebraicas, aunque en esta transformada (a diferencia de la de Fourier) nos aparece un término adicional, el valor de la función sin transformar en $t = 0$ [7, pág. 175]

$$\mathcal{L}\left[\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}\right] = \int_0^\infty \frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} e^{-st} dt \tag{8.6}$$

integramos por partes, tomando las variables $u = e^{-st}$, $dv = \frac{\partial u}{\partial t} dt$, y por lo tanto $du = -se^{-st}$ y $v = \Psi(x,t)$

$$\Psi(x,t)e^{-st}\Big|_0^\infty - \int_0^\infty \Psi(x,t)(-s)e^{-st}dt = 0 - \Psi(x,0) + s\int_0^\infty \Psi(x,t)e^{-st}dt = sL(x,s) - \Psi(x,0) \tag{8.7}$$

Una vez que hemos calculado todos los términos podemos escribir la ecuación diferencial transformada

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 L(x,s)}{\partial x^2} - i\hbar s L(x,s) + i\hbar\Psi(x,0) = \delta(x)\alpha(s)} \tag{8.8}$$

Si en vez de transformar la ecuación (8.1) hubiéramos transformado la ecuación adimensional obtenida en la sección 1.2, (1.4), respecto de la variable X, obtendríamos

$$-\frac{\partial^2 L(X,S)}{\partial X^2} - iSL(X,S) + i\Psi(X,0) = \delta(X)\alpha(S) \tag{8.9}$$

siendo en este caso $\alpha(S)$

$$\alpha(S) = \int_0^\infty A(T)\Psi(X,T)e^{-ST}dT \tag{8.10}$$

A partir de (8.8) podemos obtener además la condición de salto integrando respecto a x entre ϵ y $-\epsilon$ y haciendo el límite $\epsilon \to 0$

De este modo hallamos que

$$\boxed{\left.\frac{\partial L(x,s)}{\partial x}\right|_{x=0^+} - \left.\frac{\partial L(x,s)}{\partial x}\right|_{x=0^-} = -\frac{2m}{\hbar^2}\alpha(s)} \tag{8.11}$$

o de manera equivalente, para el caso adimensional

$$\left.\frac{\partial L(X,S)}{\partial X}\right|_{X=0^+} - \left.\frac{\partial L(X,S)}{\partial X}\right|_{X=0^-} = -\alpha(S) \tag{8.12}$$

8.1. Resolución de la ecuación diferencial

Vamos a trabajar con la ecuación adimensional

Podemos resolver (8.9) para $L(X,S)$ a cada lado del 0 y luego imponer la condición de salto (8.11), igual que hacíamos en los capítulos de la parte I

La ecuación fuera del 0 es

$$\frac{\partial^2 L(X,S)}{\partial X^2} + iSL(X,S) = i\Psi(X,0) \tag{8.13}$$

que es una ecuación diferencial inhomogénea, y cuya solución será suma de la solución homogénea asociada más una solución particular. La ecuación homogénea es de coeficientes constantes, por lo que podemos proponer una solución tipo $L_H(X,S) = \exp(i\lambda X)$ y obtener los valores de λ. Por ejemplo, vamos a resolver para $x < 0$, y lo indicaremos de nuevo con el superíndice L

$$-\lambda^2 \exp(i\lambda X) + iS \exp(i\lambda X) = 0 \longrightarrow \lambda^2 = iS \tag{8.14}$$

S es un número complejo que se encuentra a la derecha de la abcisa de convergencia de la función $\Psi(X,T)$ que estamos transformando. La abcisa se define como el número real σ tal que la integral de la transformada converge siempre que $\mathrm{Re}(S) > \sigma$

En general σ es un número positivo, por lo que podemos escribir S en la fórmula módulo-argumental $S = |S|e^{i\theta}$ con las condiciones de que $|S| > \sigma$ y $\theta \in (-\pi/2, \pi/2)$

Podemos calcular entonces λ como la raíz de un número complejo

$$\lambda = (iS)^{1/2} = \left(e^{i\pi/2}|S|e^{i\theta}\right)^{1/2} = \sqrt{|S|}e^{i/2(\theta+\pi/2+2\pi n)} = \sqrt{|S|}e^{i(\theta/2+\pi/4+\pi n)} \tag{8.15}$$

Ya que $e^{i\pi n}$ es igual a 1 si n es par y a -1 si es impar tendremos para $L_H(X,S)$

$$\exp(i\lambda X) = \exp\left(\pm i\sqrt{|S|}\left[\cos(\theta/2+\pi/4) + i\,\mathrm{sen}\,(\theta/2+\pi/4)\right]X\right) = \tag{8.16}$$

$$= \exp\left(\pm i\sqrt{|S|}\cos(\theta/2+\pi/4)\,X \mp \sqrt{|S|}\,\mathrm{sen}\,(\theta/2+\pi/4)\,X\right) \tag{8.17}$$

Para que esta función esté acotada es necesario que la parte real del exponente sea un número negativo, por lo que tendremos que estudiar el signo de $\sqrt{|S|}\,\mathrm{sen}\,(\theta/2+\pi/4)\,X$

La función $\mathrm{sen}(\phi)$ es positiva en $\phi \in (0,\pi)$ y negativa en $\phi \in (\pi, 2\pi)$, por lo que nuestra función será positiva cuando $\theta \in (-\pi/2, 3\pi/2)$ y negativa si $\theta \in (3\pi/2, 7\pi/2)$

Como hemos dicho que $\theta \in (-\pi/2, \pi/2)$ siempre, el seno siempre será positivo y por lo tanto solo nos tenemos que fijar en el carácter de X

Cuando $X > 0$ tendremos que elegir la solución precedida por un menos, mientras que cuando $X > 0$ usaremos la que va con el signo más. La solución de la ecuación homogénea es por tanto, escrita como función a trozos

$$\begin{cases} C\,\exp\left(-i\sqrt{|S|}\cos(\theta/2+\pi/4)\,X + \sqrt{|S|}\,\mathrm{sen}\,(\theta/2+\pi/4)\,X\right) & \text{si} \quad x < 0 \\ C\,\exp\left(i\sqrt{|S|}\cos(\theta/2+\pi/4)\,X - \sqrt{|S|}\,\mathrm{sen}\,(\theta/2+\pi/4)\,X\right) & \text{si} \quad x > 0 \end{cases} \tag{8.18}$$

que escrita en función del valor absoluto de X será

$$L_H(X,S) = C\exp(i\sqrt{iS}|X|) \tag{8.19}$$

entendiendo $\sqrt{iS}$ como un abuso de notación para denotar el número complejo $\sqrt{|S|}\exp(i(\theta/2+\pi/4))$, y la constante C es independiente de la variable X, pero puede en principio depender de S

Ahora debemos encontrar una solución particular para la ecuación inhomogénea, $L_p(X,S)$, y la suma de ambas será la solución general de la ecuación diferencial

Para encontrar esta solución busquemos una forma funcional plausible tal que la derivada segunda respecto de X sea proporcional a la propia función más un término adicional, una función $\Psi(X,0)$ dada

Esta función tiene que tener un término proporcional a sí misma, así que la elección más natural será una exponencial. Como además queremos un segundo término que no tenga nada que ver con la función original, sino que tiene que ser una función $\Psi(X,0)$ arbitraria que nos será dada, podemos pensar en la exponencial de un valor absoluto, ya que sabemos que su segunda derivada tiene un término proporcional a la delta de Dirac

Siguiendo estos razonamientos se puede llegar a proponer que sea la exponencial del valor absoluto de dos variables, $|X-X'|$, de modo que podamos obtener una función de X simplemente integrando respecto de X'

Planteemos una solución $f=\int_{-\infty}^{\infty}A(S,X')\exp(B(S,X')|X-X'|)dX'$, con dos grados de libertad, A y B (independientes de X), y calculamos su segunda derivada para que $f''+iSf=i\Psi(X,0)$

$$f''=\int_{-\infty}^{\infty}A(S,X')\exp(B(S,X')|X-X'|)[B(S,X')^2+2B(S,X')\delta(X-X')]dX'= \tag{8.20}$$

$$=B(S,X')^2f+2A(S,X)B(S,X)\cancelto{1}{\exp(B|0|)} \tag{8.21}$$

Y al sustituir en la ecuación diferencial obtenemos A y B

$$B(S,X')^2f+2A(S,X)B(S,X)+iSf=i\Psi(X,0) \tag{8.22}$$

$$B(S,X')^2=-iS; \qquad A(S,X)=i\frac{\Psi(X,0)}{2B(S,X)} \tag{8.23}$$

A partir de estas ecuaciones podemos despejar (teniendo en cuenta el abuso de notación para la raíz de un número complejo)

$$B(S)=i\sqrt{iS}; \qquad A(S,X')=\frac{\Psi(X',0)}{2\sqrt{iS}} \tag{8.24}$$

Y sustituyendo en la solución propuesta obtenemos una función que se puede comprobar que verifica la ecuación inhomogénea

$$L_p(X,S)=\frac{1}{2\sqrt{iS}}\int e^{i\sqrt{iS}|X-X'|}\Psi(X',0)dX' \tag{8.25}$$

Ahora que ya tenemos una solución particular, la solución completa será

$$\boxed{L(X,S)=C(S)e^{i\sqrt{iS}\,|X|}+\frac{1}{2\sqrt{iS}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\sqrt{iS}|X-X'|}\Psi(X',0)dX'} \tag{8.26}$$

en la que tenemos una constante $C(S)$ que caracteriza las distintas soluciones particulares

Para poder sustituir (8.26) en (8.11) vamos a calcular la derivada de $L(X,S)$ respecto de X, teniendo en cuenta que la derivada de $|X-X'|$ es $[2H(X-X')-1]$

$$\frac{\partial L(X,S)}{\partial X}=i\sqrt{iS}[2H(X)-1]C(S)e^{i\sqrt{iS}\,|X|}+\frac{i}{2}\int_{-\infty}^{\infty}[2H(X-X')-1]e^{i\sqrt{iS}|X-X'|}\Psi(X',0)dX'=$$
$$=i\sqrt{iS}[2H(X)-1]C(S)e^{i\sqrt{iS}\,|X|}+\frac{i}{2}\int_{-\infty}^{X}e^{i\sqrt{iS}|X-X'|}\Psi(X',0)dX'-\frac{i}{2}\int_{X}^{\infty}e^{i\sqrt{iS}|X-X'|}\Psi(X',0)dX' \tag{8.27}$$

Calculando el límite de esta derivada cuando X tiende a 0 vemos que los dos términos integrales son continuos allí, por lo que la condición de salto nos queda

$$\left.\frac{\partial L(X,S)}{\partial X}\right|_{X=0^+}-\left.\frac{\partial L(X,S)}{\partial X}\right|_{X=0^-}=2i\sqrt{iS}\,C(S)=-\alpha(S)\longrightarrow C(S)=i\frac{\alpha(S)}{2\sqrt{iS}} \tag{8.28}$$

y ya podemos escribir la solución completa de $L(X,S)$ como

$$L(X,S)=\frac{1}{2\sqrt{iS}}\left[i\alpha(S)e^{i\sqrt{iS}|X|}+\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\sqrt{iS}|X-X'|}\Psi(X',0)dX'\right] \tag{8.29}$$

A partir de estos resultados podemos obtener $L(0,S)$

$$L(0,S)=\frac{1}{2\sqrt{iS}}\left[i\alpha(S)+\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\sqrt{iS}|X'|}\Psi(X',0)dX'\right] \tag{8.30}$$

y, como esta función involucra solo funciones cuyas inversas son conocidas, o productos de estas funciones (que se pueden mediante el teorema de la convolución), llegamos a

$$\Psi(0,T)=\mathcal{L}^{-1}[L(0,S)]=\frac{i}{2\sqrt{i}}\,\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{\alpha(S)}{\sqrt{S}}\right]+\frac{1}{2\sqrt{i}}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi(X',0)\,\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{e^{i\sqrt{iS}|X'|}}{\sqrt{S}}\right]dX' \tag{8.31}$$

donde sabemos por (8.10) que $\mathcal{L}^{-1}[\alpha(S)]=a(T)\Psi(0,T)$, y en tablas podemos encontrar[2] $\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{1}{\sqrt{S}}\right]=\frac{T^{-1/2}}{\Gamma(\frac{1}{2})}=\frac{1}{\sqrt{\pi T}}$ y[3] $\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{e^{-a\sqrt{S}}}{\sqrt{S}}\right]=\frac{e^{-\frac{a^2}{4T}}}{\sqrt{\pi T}}$, siendo $a=i\sqrt{i}|X|$, y por lo tanto $a^2=-iX^2$

El teorema de la convolución se puede demostrar de la siguiente manera[4]

[2] La transformada inversa de esta función se puede inferir a partir de la encontrada en [12, pág.311], tomando la identidad 15.4 para n=1/2 (también podríamos utilizar 15.84 en el caso a=0)

[3] Esta transformada aparece en [12, pág. 316], la fórmula 15.84

[4] Siguiendo el procedimiento desarrollado en [7, pág.179]

$$\begin{aligned}
&\mathcal{L}^{-1}\left[F(s)G(s)\right] = \mathcal{L}^{-1}\left[\mathcal{L}[f(t)]\mathcal{L}[g(t)]\right] = \mathcal{L}^{-1}\left[\left(\int_0^\infty f(t)e^{-st}dt\right)\left(\int_0^\infty g(u)e^{-su}du\right)\right] = \\
&= \mathcal{L}^{-1}\left[\int_0^\infty g(u)\left(\int_0^\infty f(t)e^{-s(t+u)}dt\right)du\right] = \mathcal{L}^{-1}\left[\int_0^\infty g(u)\left(\int_0^\infty f(\tau-u)e^{-s\tau}d\tau\right)du\right] = \\
&= \mathcal{L}^{-1}\left[\int_0^\infty e^{-s\tau}\left(\int_0^\infty f(\tau-u)g(u)d\tau\right)du\right] = \mathcal{L}^{-1}\left[\mathcal{L}\left[\int_0^\infty f(\tau-u)g(u)d\tau\right]\right] = \\
&= \int_0^\infty f(\tau-u)g(u)d\tau
\end{aligned} \tag{8.32}$$

Así llegamos a

$$\Psi(0,T) = \frac{1}{i\sqrt{i\pi}}\int_0^T \frac{A(T')\Psi(0,T')}{\sqrt{T-T'}}dT' + \frac{1}{2\sqrt{i\pi T}}\int_{-\infty}^\infty \exp\left(i\frac{X'^2}{4T}\right)\Psi(X',0)dX' \tag{8.33}$$

A partir de esta ecuación podemos obtener $\Psi(X,0)$, con lo que podemos sustituir este resultado en (8.26) y obtener una expresión para $L(X,S)$ que ya podemos invertir para hallar $\Psi(X,T)$

La solución general de la ecuación diferencial original, (8.1), es por lo tanto

$$\boxed{\Psi(X,T) = \frac{1}{i\sqrt{i\pi}}\int_0^T \frac{A(T')\Psi(0,T')}{\sqrt{T-T'}}e^{i\frac{X^2}{4(T-T')}}dT' + \frac{1}{2\sqrt{i\pi t}}\int_{-\infty}^\infty e^{i\frac{(X-X')^2}{4T}}\Psi(X',0)dX'} \tag{8.34}$$

Esta ecuación tiene un término recursivo, el que depende de $\Psi(0,T)$, cuyo valor se puede sustituir a partir de la expresión (8.33). Se puede encontrar la solución completa del problema resolviendo esta igualdad de manera perturbativa para distintos órdenes de precisión siguiendo la *aproximación de Born* si se conoce una condición inicial de la función de onda, $\Psi(X,T)$

8.2. Casos particulares

En ocasiones es posible calcular la función de onda sin conocer $\Psi(0,T)$, usando el propagador de Feynman de la ecuación diferencial (la función de Green asociada)

El propagador se define como la función $G(X,X',T)$ tal que

$$\Psi(X,T) = \int_{-\infty}^\infty G(X,X',T)\Psi(X',0)dX' \tag{8.35}$$

Este proceso es análogo al seguido en la sección 8.1 para encontrar la solución particular de la ecuación inhomogénea, donde calculamos el propagador intuitivamente

El procedimiento analítico para encontrar el propagador en un caso general consiste en encontrar la función $G(X,X',T)$ para la que se cumple

$$\frac{\partial^2 G(X,X',T)}{\partial X^2} + i\frac{\partial G(X,X',T)}{\partial T} = \delta(X-X') \tag{8.36}$$

En el espacio transformado, la ecuación es

$$\frac{\partial^2 \overline{G}(X,X',S)}{\partial X^2} + iS\,\overline{G}(X,X',S) = \delta(X-X') \tag{8.37}$$

Esta ecuación es muy parecida al caso homogéneo de la sección 8.1, pero con $\delta(X-X')$ en vez de $\delta(X)$, por lo que la solución es (tras aplicar la condición de salto)

$$\overline{G}(X,X',S) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{i}{S}}e^{i\sqrt{iS}|X-X'|} \tag{8.38}$$

En esta sección se seguirán los resultados obtenidos en el paper [2]

8.2.1. Salto finito

El potencial en este caso es $V(x,t) = a\,\delta(x)H(-t) + b\,\delta(x)H(t) = a\,\delta(x) + (b-a)\delta(x)H(x)$, es decir, el potencial valdrá $a\,\delta(x)$ cuando $t < 0$ y $b\,\delta(x)$ cuando $t > 0$

Para facilitar el tratamiento del problema vamos a hacer un cambio de variable para que el potencial valga 1 en $t < 0$ y $w = b/a$ para $t > 0$

Haciendo el mismo tratamiento de adimensionalización que en la sección 1.2 obtenemos la misma ecuación que en (1.16) para $t < 0$ mediante el cambio $x = \alpha X$, $t = \beta T$, con $\alpha = \hbar^2/2ma$ y $\beta = \hbar^3/2ma^2$

$$\begin{cases} -\dfrac{d^2\Psi(X)}{dX^2} + \delta(X)\Psi(X) = \epsilon\Psi(X) & \text{si} \quad X < 0 \\[2ex] -\dfrac{d^2\Psi(X)}{dX^2} + w\;\delta(X)\Psi(X) = \epsilon\Psi(X) & \text{si} \quad X > 0 \end{cases} \tag{8.39}$$

El propagador de Feynamn en este caso es

$$\overline{G}(X,X',S) = -\frac{w}{2}\frac{1}{\sqrt{S}(\sqrt{S}+\sqrt{iw})}e^{i\sqrt{iS}|X-X'|} + \frac{1}{2\sqrt{iS}}e^{i\sqrt{iS}|X-X'|} \tag{8.40}$$

e invirtiéndolo y sustituyendo la expresión de $G(X,X',T)$ en (8.35) llegamos a la expresión

$$\Psi(X,T) = -\frac{w}{2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{w(|X|+|X'|)+iw^2 t}\mathrm{erf}\left(w\sqrt{iT} + \frac{|X|+|X'|}{2\sqrt{iT}}\right)\Psi(X',0)dX' + \tag{8.41}$$

$$+\frac{1}{2\sqrt{i\pi T}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{(X-X')^2}{4T}}\Psi(X',0)dX' \tag{8.42}$$

8.2.2. Dependencia inversa con el tiempo

Tenemos como potencial $V(x,t) = C\;\delta(x) + \frac{C\,t_0}{t+t_0}\delta(x)H(t)$. El término de la derecha tendría una singularidad en $t = -t_0$, pero como la función de Heaviside se anula para todo $t < 0$ la función será regular siempre que $t_0 > 0$

La transformada de Laplace de $\frac{C}{t+t_0}$ no la podemos realizar, pero la transformada de $\frac{C}{t+t_0}\delta(x)\Psi(x) = \frac{C}{t+t_0}\Psi(0,t)$ se puede escribir en términos de la transformada de Laplace de $\Psi(x,t)$ como

El propagador de esta ecuación es

$$\overline{G}(X,X',S) = \frac{1}{2\sqrt{iS}}\left[-\frac{2iCt_0}{|X'|+2iCt_0}e^{i\sqrt{iS}(|X|+|X'|)} + e^{i\sqrt{iS}|X-X'|}\right] \tag{8.43}$$

que de nuevo podemos invertir y a partir de $G(X,X',T)$ sacar la función de onda

$$\Psi(X,T) = -\frac{1}{2\sqrt{i\pi T}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{2iCt_0}{|X'|+2iCT_0}e^{i\frac{(|X|+|X'|)^2}{4T}}\Psi(X',0)dX'+ \tag{8.44}$$

$$+\frac{1}{2\sqrt{i\pi T}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\frac{(X-X')^2}{4T}}\Psi(X',0)dX' \tag{8.45}$$

Este resultado se tendrá que comparar con el obtenido en el capítulo 2, pero por falta de tiempo no se ha podido realizar este estudio, que aún está en proceso

Parte III

Conclusiones

Hemos intentado resolver la ecuación de Schrödinger de manera analítica para un potencial $V(x,t) = a(t)\delta(x)$ para una función $a(t)$ arbitraria

En el capítulo 2 propusimos formas funcionales de la ecuación de ondas que pudieran verificar la ecuación diferencial para algún $a(t)$ y vimos como de lejos nos llevaban estas soluciones. Los primeros dos casos solo servían para el caso estacionario, pero el tercero, estudiado en la sección 2.3, ha resultado en una solución satisfactoria para los potenciales que dependen de manera inversa con el tiempo, es decir, para potenciales $a(t) = [k_1 t + k_2]^{-1}$. La función de onda encontrada es (2.71)

En la parte I se resolvió la ecuación diferencial tratándola como un problema de condiciones de frontera en $x = 0$, extrapolando las técnicas utilizadas en el caso estacionario para llegar a unas ecuaciones integrales, resumidas en (5.42). Estas ecuaciones tienen toda la información sobre la solución del problema, pero no hemos conseguido invertir las ecuaciones para obtener una expresión cerrada de los coeficientes en función de las condiciones iniciales del problema. Se sigue trabajando en el momento en este desarrollo buscando la manera de obtener estas soluciones, pero en el estado actual también es útil para verificar rápidamente si una posible solución propuesta verifica todas las condiciones necesarias para que cumpla la ecuación de Schrödinger

Por último, en la parte II se calculó la transformada integral de la ecuación diferencial, primero usando la transformada de Fourier y luego la de Laplace. Esto permite pasar de una ecuación en derivadas parciales a una ecuación diferencial ordinaria (EDO), aunque con el perjuicio de tener que realizar la transformada inversa de las soluciones que hallemos. La transformada de Fourier es especialmente útil para estudiar los casos ligados, mientras que la de Laplace sirve para perturbaciones que se aplican a partir de un instante inicial $t = 0$. A partir de esta segunda se han encontrado expresiones que se pueden integrar numéricamente para estudiar la evolución de la función en ciertos casos particulares

En resumen podemos concluir que aunque en este trabajo no se ha llegado a la resolución completa del problema debido a la dificultad que plantea la introducción del término dependiente del tiempo en la ecuación de Schrödinger, se han dado pasos muy importantes hacia ella, encontrando por el camino resultados que son importantes en sí mismos y afianzando las condiciones que son necesarias y las que son esperables en la solución final

Este trabajo sigue necesitando muchas más horas de dedicación para continuar con todos los desarrollos propuestos y con muchos otros que no se han incluido en esta memoria por la falta de completitud de los mismos y por la ya excesiva extensión del manuscrito

Bibliografía

[1] D. F. Martinez and L. E. Reichl, *Transmission properties of the oscillating δ-function potential*; Physical Review B 64, 2001; DOI: 10.1103/PhysRevB.64.245315

[2] J. Campbell, *Some exact results for the Schrödinger wave equation with a time-dependent potential*; Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical 42, 2009; DOI: 10.1088/1751-8113/42/36/365212

[3] Seung Ki Baek, Su Do Yi, and Minjae Kim, *Particle in a box with a time-dependent δ-function potential*; Physical Review A 94, 2016; arXiv:1611.07129v1 [quant-ph]

[4] M. P. Avakian, G. S. Pogosyan, A. N. Sissakian and V. M. Ter-Antonyan, *Spectroscopy of a singular linear oscillator*; Physics Letters A 124, 1987; DOI: 10.1016/0375-9601(87)90627-X

[5] Floquet Theory, *Encyclopedia of Mathematics*; `https://www.encyclopediaofmath.org/index.php/Floquet_theory`

[6] Cauchy boundary condition, *Wolfram MathWorld*; `http://mathworld.wolfram.com/CauchyBoundaryConditions.html`

[7] M. Gadella, L. M. Nieto, *Métodos matemáticos avanzados para ciencias e ingenierías*; Universidad de Valladolid, Secretariado de publicaciones E.I. 2000

[8] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Laloë, *Quantum Mechanics I*; Wiley-Interscience publication, 1977

[9] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Laloë, *Quantum Mechanics II*; Wiley-Interscience publication, 1977

[10] A. Galindo and P. Pascual, *Quantum Mechanics I*; Eudema Universidad: Manuales, 1989

[11] A. Galindo and P. Pascual, *Quantum Mechanics II*; Eudema Universidad: Manuales, 1989

[12] M. R. Spiegel, *Manual de fórmulas y tablas matemáticas*; Serie Schaum, 2ª edición, Editorial McGraw-Hill, 2000

Apéndice A

Escalón de altura variable

Vamos a aplicar las técnicas utilizadas para resolver el problema de la delta oscilante a otro caso sencillo, el de un escalón en el que cada zona depende de una función del tiempo distinta

$$V(x,t) = \begin{cases} f_1(t) & \text{si} \quad x < 0 \\ \\ f_2(t) & \text{si} \quad x > 0 \end{cases} \tag{A.1}$$

La ecuación de Schrödinger con este potencial no es separable en factores que solo dependan de x o solo de t, por lo que tendremos que resolver la ecuación en cada zona e imponer continuidad, derivabilidad y conservación de la densidad de probabilidad, igual que hacíamos para la delta

Este potencial se puede escribir como $V(x,t) = f_1(t) + H(x)(f_2(t) - f_1(t))$

Vamos a realizar una transformación Gauge a la ecuación diferencial con el objetivo de llevar a cero el potencial del semieje izquierdo ($x < 0$). Para ello definimos una nueva función, $\Phi(x,t)$, de modo que su relación con la función solución, $\Psi(x,t)$, sea $\Phi(x,t) = e^{if(t)}\Psi(x,t)$

La ecuación de Schrödinger para esta nueva función será

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \tag{A.2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}e^{-if(t)}\frac{\partial^2\Phi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)e^{-if(t)}\Phi(x,t) = i\hbar\left(e^{-if(t)}\frac{\partial\Phi(x,t)}{\partial t} - i\dot{f}(t)e^{-if(t)}\Phi(x,t)\right) \tag{A.3}$$

que podemos escribir

$$-\frac{\hbar^2}{2m}e^{-if(t)}\frac{\partial^2\Phi(x,t)}{\partial x^2} + (V(x,t) - \hbar\dot{f}(t))e^{-if(t)}\Phi(x,t) = i\hbar e^{-if(t)}\frac{\partial\Phi(x,t)}{\partial t} \tag{A.4}$$

En esta ecuación podemos simplificar el factor $e^{if(t)}$ y obtenemos de nuevo la ecuación de Schrödinger, pero para la función de onda $\Phi(x,t)$ y con un potencial modificado, $V'(x,t) = V(x,t) - \hbar\dot{f}(t)$

Tomando $\dot{f}(t) = f_1(t)/\hbar$, el potencial modificado será por tanto $V(x,t) = H(x)(f_2(t) - f_1(t))$, o, escrita como función a trozos

$$V(x,t) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad x < 0 \\ \\ f_2(t) - f_1(t) & \text{si} \quad x > 0 \end{cases} \tag{A.5}$$

Además, añadir un factor de fase constante a una función de onda no modifica su significado físico. Sin embargo, en este caso el factor de fase que relaciona $\Psi(x,t)$ con $\Phi(x,t)$ varía con el tiempo

La solución a este potencial es separable a cada lado del cero, siendo la solución para $x < 0$ la de una partícula libre y para $x > 0$ la de una partícula sometida a un potencial que únicamente depende del tiempo

En el primer caso las soluciones son $\Phi_1(x,t) = X_1(x)\phi_1(t)$, donde

$$\begin{cases} X_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, & \text{con} \qquad k = \sqrt{\frac{2m\mu}{\hbar^2}} \\ \phi_1(t) = C_1 e^{-i\frac{\mu}{\hbar}t} \end{cases} \tag{A.6}$$

En el segundo caso obtenemos también una ecuación separable, cuya solución se puede escribir como $\Phi_2(x,t) = X_2(x)\phi_2(t)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X_2(x)}\frac{\partial^2 X_2(x)}{\partial x^2} = i\hbar\frac{1}{\phi_2(t)}\frac{\partial\phi_2(x,t)}{\partial t} - (f_2(t) - f_1(t)) = \mu \tag{A.7}$$

Las ecuaciones diferenciales para cada una de estas autofunciones son

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2 X_2(x)}{\partial x^2} = \mu X_2(x) \\ \\ i\hbar\dfrac{\partial\phi_2(t)}{\partial t} = (\mu + [f_2(t) - f_1(t)])\phi_2(t) \end{cases} \tag{A.8}$$

y las soluciones son

$$\begin{cases} X_2(x) = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}, & \text{con} \qquad k = \sqrt{\frac{2m\mu}{\hbar^2}} \\ \phi_2(t) = C_2 \exp\left(-i\frac{\int[\mu + f_2(t) - f_1(t)]dt}{\hbar}\right) \end{cases} \tag{A.9}$$

Por lo que si la función $f_2(t) - f_1(t)$ es integrable tendremos la solución completa en términos de funciones convencionales

Escribimos las soluciones generales a cada lado del 0, que serán

$$\Phi_1(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(f_1(t)e^{ikx} + f_2(t)e^{-ikx}\right) e^{-i\frac{\mu(k)}{\hbar}t} dk \tag{A.10}$$

$$\Phi_2(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(g_1(t)e^{ikx} + g_2(t)e^{-ikx}\right) e^{-i\frac{\mu(k)}{\hbar}t} e^{-i\frac{\int[f_2(t)-f_1(t)]dt}{\hbar}} dk \tag{A.11}$$

y a partir de estas soluciones podemos proceder como en el caso de la delta

A.1. Continuidad

Igual que hicimos en la sección 5.1, el primer paso es realizar la transformada de Fourier de los coeficientes f_1, f_2, g_1, g_2

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\overline{f_1}(k,p)+\overline{f_2}(k,p)\right]\ e^{i\left(p-\frac{k^2\hbar}{2m}\right)t}dp\ dk = \tag{A.12}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\overline{g_1}(k,p)+\overline{g_2}(k,p)\right]\ e^{i\left(pt-\frac{k^2\hbar}{2m}t-\frac{\int[f_2(t)-f_1(t)]dt}{\hbar}\right)}dp\ dk \tag{A.13}$$

La dificultad en este caso es que al hacer los cálculos asociados con el cambio de variable a $u = pt - \frac{k^2\hbar}{2m}t - \frac{\int[f_2(t)-f_1(t)]dt}{\hbar}$, el jacobiano, los límites de integración y la manera de expresar una variable en función de las demás no son tan sencillos como en los casos estudiados anteriormente

Este caso está todavía siendo estudiado y no se ha llegado a ninguna conclusión por el momento